

Universidad Nacional Autónoma de México

posgrado en Ciencas Físicas

Instituto de Ciencias Nucleares

## GEOMETROTERMODINÁMICA ESTADÍSTICA

## TESIS

### QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE

DOCTOR EN CIENCIAS (FÍSICA)

### PRESENTA:

### VIRIDIANA PINEDA REYES

DIRECTOR DE PROYECTO DE INVESTIGACIÓN / TUTOR PRINCIPAL DR. HERNANDO QUEVEDO CUBILLOS Instituto de Ciencias Nucleares

#### MIEMBROS DEL COMITÉ TUTOR

DR. MIGUEL ALCUBIERRE MOYA Instituto de Ciencias Nucleares DR. VÍCTOR M. ROMERO ROCHÍN Instituto de Física

Ciudad Universitaria, Cd. Mx. a Agosto de 2019



Universidad Nacional Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

### DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

A mis padres.

### Agradecimientos

El desarrollo de una investigación de tesis doctoral es un camino largo y arduo que involucra un crecimiento y autorealización personal. Sin embargo, durante el trayecto hay un sin fin de personas que retroalimentan dicha tarea de manera laboral, académica y hasta personal. Por ello, es para mí un verdadero placer utilizar este espacio para expresarles mis más sinceros agradecimientos por su orientación, ayuda y apoyo en mi crecimiento personal y profesional.

En primer lugar, quiero agradecer al Dr. Hernando Quevedo Cubillos, director del Departamento de Gravitación y Teoría de Campos, en el Instituto de Ciencias Nucleares de la Universidad Autónoma de México; director de esta tesis doctoral. Le agradezco el haberme facilitado siempre los medios suficientes para llevar a cabo todas las actividades propuestas durante el desarrollo de esta tesis. Pero más importante, le agradezco su apoyo, paciencia, optimismo y guía, los cuales fueron clave para la culminación de este trabajo y sin duda para mi desarrollo profesional.

En segundo lugar, quiero agradecer a mis colaboradores; el Dr. Francisco Nettel Rueda y el Dr. Lenin F. Escamilla Herrera. Gracias por las largas tardes de discusión y retroalimentación en el desarrollo de los artículos pertinentes en esta investigación y sobre todo por su guía académica. Quiero agradecer, además, de manera especial a la Dra. Christine Gruber, no solo por su colaboración, guía y orientación laboral, sino también por su sororidad tanto personal como académica. Muchas gracias a los tres. Gracias por compartir conmigo su orientación y su experiencia, sin ellas esto no hubiera sido posible.

En tercer lugar, quiero agradecer a las personas que inspiraron académicamente este viaje. A la Dra. Laura Yeomans, por su apoyo, motivación, comprensión y objetividad. Usted se volvió un ejemplo de todo lo que me gustaría llegar a ser como docente e investigadora. Quiero agradecer especialmente a la maestra Angelina Araujo Uribe. A usted quiero agradecerle su tiempo, su confidencia, su apoyo y sus retos, sus largas lecciones de vida los viernes por la tarde, sus consejos... Maestra Angelina, es usted sin dudas, para mí, una maestra de la vida. En cuarto lugar, quiero agradecer a mis amigos y colegas, a aquellas personas que con su compañía y apoyo hicieron de este arduo trayecto uno un poco más ameno. A mis amigas, Anayeli Ramirez y Mayra Lara, ustedes mejor que nadie entienden la difícil tarea de sobrevivir al posgrado, y por su compañía en los momentos difíciles, gracias. Quiero agradecer especialmente a Ernesto Barrientos. Te agradezco tu amistad, tu confidencia y cariño. Me recordaste que *nadie está solo cuando está con jesucristo* [sic]. Eres de las personas que más cree en mi y eso no hay manera en que te lo pueda agradecer.

En quinto lugar, debo agradecer a la Universidad Nacional Autónoma de México. En especial al Instituto de Ciencias Nucleares que se convirtió en mi segunda casa durante este trayecto. Al Consejo Nacional de Ciencias y Tecnología (CONACYT) por el apoyo económico dado con la beca No. 298816, la cual me permitió concluir esta tesis.

Y dejando los agradecimientos más importantes para el final, a mis padres. A los dos, por sus sacrificios, por su cariño, comprensión y apoyo. A J. Jesús Pineda Peña, por su guía de trabajo arduo en la vida, por su soporte y por toda la confianza que depositaste en mí. A Ma. Teresa Reyes Hernandez, por ser la persona más importante e influyente en mi vida, por ser el máximo ejemplo de determinación y carácter que jamás tendré. A ustedes dos por confiar e invertir en mí, por todo su amor, por ser un hogar al que siempre puedo volver, mil gracias. Papás, esto de ustedes y para ustedes.

A todos ustedes, mi mayor reconocimiento y gratitud. V. Pineda-Reyes, Agosto 2019. "I have no special talents. I am only passionately curious." -Albert Einstein

## Introducción

La geometría como ciencia moderna se restableció de manera axiomática con los trabajas de Hilbert [1]. Este enfoque marcó el cambio al sistema axiomático moderno de la geometría. Desde ese entonces, esta se convirtió en una herramienta auxiliar indispensable para el manejo e interpretación de conceptos en diferentes áreas de la física. Hoy en día, este vínculo ha permitido el avance y desenvolvimiento de la física moderna; electrodinámica cuántica y la teoría de haces fibrados, la relatividad general y la geometría pseudo-Riemanniana, en teoría de cuerdas, la geometría algebraica y topología, etc.

Por otra parte, la termodinámica vió sus inicios en 1824 con los trabajos de Sadi Carnot [2], en los cuales plasmó las relaciones básicas energéticas para máquinas térmicas eficientes. No fue hasta los trabajos de Clausius, Kelvin [3] y Nerst que se formularon las Leyes de la Termodinámica, dándole el carácter a ésta de fenomenológica y axiomática. Dos décadas más tarde, Gibbs [4] notó que es posible darle un carácter geométrico a aquellas ecuaciones que expresan fundamentalmente los principios de la termodinámica. Con esto en mente, Carathéodory [5] trabajó en una formulación matemática vista como consecuencia directa de la segunda ley de la termodinámica; centrada en el comportamiento geométrico de las ecuaciones Pfaffianas, y sus soluciones. Unos setenta años más tarde, Hermann [6] introdujo la geometría de contacto al espacio fase con la finalidad de construir de manera consistente la formulación de la versión geométrica de las leyes de la termodinámica. Weinhold [7] y Ruppeiner [8] introdujeron geometría Riemanniana en el espacio de estados de equilibrio; definieron estructuras métricas como el Hessiano de la energía interna y el negativo de la entropía, respectivamente. Fue así como se vio el nacimiento de lo de lo que hoy en día se conoce como termodinámica geométrica.

Por otro lado, inspirado en los trabajos de Clausius, Maxwell [9] formuló lo la distribución de velocidades moleculares de Maxwell, la cual fue el primer paso a lo que se conoce como mecánica estadística. En esa dirección, Boltzmann [9] trabajó en la interpretación estadística de la termodinámica, introduciendo el concepto moderno de teoría de ensambles. Esto permitió el desarrollo de la mecánica estadística tal como lo conocemos hoy en día. La relación intrínseca, como límite macroscópico, que existe entre la termodinámica y la mecánica estadística ha permitido ver a las propiedades microscópicas de sistemas termodinámicos como consecuencia directa de la interacción cuántica de sus constituyentes microscópicos.

Diferentes avances se han hecho con el fin de geometrizar la mecánica estadística. Quizá el más popular sea el enfoque de geometría de la información que corresponde a la geometrización de la estadística matemática [10], i.e. promover una aproximación geométrica a los modelos de familias estadísticas, para estudiar la mecánica estadística en equilibrio y la termodinámica en equilibrio. Esto se hace a partir de la idea que, la estadística parametrizada se refiere a familias de medidas de probabilidad en algún espacio muestral  $\Omega$ , parametrizadas por  $\theta$  desde algún espacio  $\mathcal M$  que tomaremos como una variedad de Banach, en particular, una variedad de dimensiones finitas, variedad estadística. Este parámetro debe ser estimado, y para ese propósito, uno desea cuantificar la dependencia del modelo en ese parámetro. Eso se logra, por primera vez, con la métrica de Fisher [11] como lo sugirió primero Rao [12], equipando al espacio de estados de equilibrio con una estructura geometrica Riemanniana y aplicar esto para el estudio estadístico de de sistemas termodinámicos. Además, existe una estructura natural afín en los espacios de medidas de probabilidad descubiertos por Amari [10] y Chentsov [13]. Tales estructuras deben ser invariantes ante reparametrizaciones, y esto nos lleva al campo de la geometría diferencial, donde es fácil mostrar que tanto la matriz de información de Fisher y el tensor de Amari-Chentsov resultan ser invariantes ante dichas transformaciones.

En general, los diversos intentos por geometrizar la mecánica estadística desde la perspectiva de geometría de la información han sido en virtud de la distribución exponencial tipo Boltzmann-

Gibbs (BG). Sin embargo, estudios recientes muestran que existen sistemas complejos que están sujetos a distribuciones que obedecen una ley de potencias, en lugar de las distribuciones eponenciales asociadas con Boltzmann-Gibbs. En los últimos años, se ha prestado mucha atención a una a una generalización particular no extensiva de la mecánica estadística de BG. C. Tsallis [14] definió la llamada entropía q, para tratar de explicar fenómenos que no se ajustaban al enfoque usual de la mecánica estadística de BG, seguido de muchos trabajos de investigación relacionados en este tema, ver por ejemplo, Ref. [15]. Tsallis [14] propuso una generalización para la entropía microscópica, de manera que esta capturara la no aditividad en dicha variable termodinámica del sistema. Dicha entropía tiene la propiedad de que en el limite cuando la no aditividad tiende a cero, se recupera la entropía de Shannon. Dicha construcción fue en virtud de funciones exponenciales y logarítmicas generalizadas, llamadas funciones q. La noción de familia q-exponencial está conectada con la familia  $\alpha$  Amari [14], estudiada en el contexto de la geometría de la información. Así, el concepto de la distribución q-Gibbs o la familia qexponencial de distribuciones de probabilidad se induce naturalmente desde este marco. En [16], Amari presenta una base geométrica para la familia q-exponencial basada en la geometría de la información [10], que proporciona definiciones geométricas de la función q-potencial, q-entropía y q-divergencia de una manera unificada. Se define además, a partir de la q-divergencia tipo Bregmann una estructura geométrica que consiste en una métrica Riemanniana Hessiana.

El formalismo de la geometrotermodinámica (GTD) fue recientemente introducido por Quevedo [17], el cual usa geometría de contacto Riemanniana para la definición de la variedad de fase termodinámica y un encaje, como sub variedad de Legendre, para la definición de la variedad de estados de equilibrio. Esta aproximación nos permite interpretar al sistema termodinámico como una hipersuperficie en el espacio de estados de equilibrio completamente determinada por un encaje. Este formalismo tiene la finalidad de incorporar la invariancia de Legendre en las estructuras Riemannianas a nivel de la variedad de fase. La motivación fue introducir, mediante el formalismo de la GTD, una formulación geométrica que tome en cuenta el hecho de que en la termodinámica clásica la descripción de los sistemas no depende de la elección del potencial termodinámico, i.e., la formulación es invariante ante transformaciones de Legendre. El objetivo principal de la GTD ha sido la interpretación, de manera invariante, de la curvatura del espacio de estados de equilibrios como una manifestación de la interacción termodinámica, análogo a lo que pasa en relatividad general. Así, aquellos sistemas sin interacción termodinámica, como el caso del gas ideal, presentan una curvatura nula sobre toda la variedad de estados de equilibrio. Sin embargo, aquellos sistemas que presenten interacción termodinámia, por ejemplo transiciones de fase, la curvatura debería ser no nula y a su vez, en los casos donde se presenten transiciones de fase, podría reproducir el comportamiento cerca de los puntos donde las transiciones de fase ocurren, como es el caso del gas de Van der Waals.

El propósito de este trabajo de tesis doctoral es establecer una conexión microscópica y por lo tanto, ligada a la mecánica estadística, para el formalismo termodinámico geométrico de la GTD. Dicha conexión se hizo a partir de tres enfoques; una perspectiva fundamentalmente geométrica, otro desde el campo de geometría de la información y finalmente desde el enfoque de la geometría de la mecánica estadística no extensiva de Tsallis. Así, el presente manuscrito se organiza de la siguiente manera; la perspectiva fundamentalmente geométrica fue desde la geometría de las fluctuaciones [18], Donde se muestra que en GTD es posible usar la libertad sobre las coordenadas de la Variedad de Fase Termodinámica (VFT) para introducir un nuevo potencial termodinámico en coordenadas tales que en la Variedad de Estados de Equilibrio (VEE) se vea como una métrica Hessiana; y probar así que las componentes de las métricas de GTD pueden ser interpretadas, también, como los segundos momentos de las fluctuaciones del nuevo potencial termodinámico. Dicho desarrollo se encuentra en la sección 2. Se muestra un resumen sobre teoría de fluctuaciones desde la perspectiva de Landau [19] y su conexión física con una métrica Hessiana en 2.1; en 2.2 presentamos una aproximación a teoría de fluctuaciones desde una perspectiva puramente geométrica; en 2.3 se introducen las nuevas coordenadas sobre la VFT y las condiciones para que en la VEE se vea como una métrica Hessiana del nuevo potencial termodinámico; en 2.3.1 se presenta la solución para la métrica  $G^{III}$  de GTD y la aplicación de dicha solución al gas ideal; y en 2.4 se muestran las dificultades y propuestas para encontrar la solución de  $G^{II}$ .

La segunda perspectiva para la construcción de un fundamento microscópico de la GTD fue a partir del punto de vista de geometría de la información. Nuestro primer acercamiento se desarrolló en el artículo [20], donde se exploran las consecuencias de reparametrizaciones termodinámicas en la descripción geométrica de la termodinámica analizando sus efectos en la VFT. Como resultado de esta investigación se encontró que diferentes estructuras de contacto y Riemannianas pueden ser consideradas para generar la VFT asociada a las reparametrizaciones, mientras que la estructura sobre la VEE permanece inalterada. Dicho desarrollo se encuentra en la sección 3. En la Sección 3.1, revisamos cómo se puede obtener la distribución exponencial de BG utilizando el Método de Multiplicadores Indeterminados de Lagrange (MMIL) para maximizar la entropía de Boltzmann y exploramos cómo algunas cantidades se transforman bajo reparametrizaciones de las variables intensivas correspondientes. Además, comparamos el concepto de reparametrizaciones, como se usa en enfoque estadístico, con el concepto más estricto de difeomorfismo y transformaciones de coordenadas, como se usa en la geometría. En la Sección 3.2, revisamos el vínculo entre las fluctuaciones estadísticas y la geometría del VEE. Mostramos explícitamente que las reparametrizaciones que definimos en el VFT corresponden a las transformaciones de coordenadas en la VEE. En la Sección 3.3, analizamos cómo se pueden introducir las reparametrizaciones en el VFT a través de diferentes estructuras de contacto y de Riemann y mostramos que, a pesar de tener diferentes VFT, la estructura de Riemann del VEE permanece sin cambios.

Nuestro segunda propuesta desde la perspectiva de la geometría de la información se desarrolló en el artículo [21], donde usamos una reparametrización particular en la VFT para mostrar que las métricas invariantes de Legendre, en particular las métricas de la GTD tienen un origen estadístico el cual puede ser expresado en términos del valor medio y la varianza de la diferencial de una entropía microscópica. Dicho desarrollo se encuentra en la subsección 3.4. En la sec. 3.5, se muestra cómo, a través de reparametrizaciones generalizadas de las variables termodinámicas, se modifica la estructura Riemanniana de la VFT. En la sec. 3.6, discutimos cómo estos cambios en la VFT conducen a una estructura métrica, que se puede conectar con métricas invariantes

GEOMETROTERMODINÁMICA ESTADÍSTICA

de Legendre y, en particular, con las métricas encontradas en GTD [17].

La tercera propuesta desde el punto de vista de geometría de la información se encuentra en desarrollo en el artículo [22], donde utilizamos la definición de divergencias en geometría de la información para construir una divergencia conforme, lo que nos permite asociar a una distribución tipo BG a una métrica conformalmente Hessiana. En particular definimos una familia de divergencias conformes para generar las métricas  $g^I$  y  $g^{II}$  del formalismo de la GTD. Dicho desarrollo se encuentra en la sección 4.

Finalmente, la tercera perspecitva para la construcción de un fundamento microscópico de la GTD fue a partir del enfoque de la geométrica de la mecánica estadística no extensiva de Tsallis. Dicha aproximación se encuentra en desarrollo en el artículo [23], donde se construyó de manera consistente la VFT y la VEE encontrando que la estructura Riemanniana en la VEE resulta ser una métrica Hessiana. Además se propone una estructura Riemanniana generalizada a la matriz de Fisher consistente con las funciones q asociadas a la mécanica estadística de Tsallis en el rango de interacción asociada a una no extensividad débil. Dicho desarrollo se encuentra en la sección 5. En la subsección 5.1 se presenta un breve resumen de la estadística de Tsallis desde la perspectiva geométrica-estadística. En la subsección 5.1.1 se realiza la construcción de las estructuras Riemannianas en la VFT y la VEE. Además se trabajó en la aplicación de la mecánica estadística de Tsallis para el sistema de un gas autogravitante, publicado en el artículo [24]. Dicho desarrollo se encuentra en la subsección 6. En la sección 6.1 definimos el gas autogravitante como un sistema de largo alcance termodinámico, en la sección 6.2 definimos las variables físicas de Tsallis asociadas al equilibrio termodinámico, en la sección 6.3 se construye la función de partición canónica en la estadística de Tsallis para el gas autogravitante Newtoniano y se obtiene la ecuación de estado y la capacidad calorífica en el regimen diluido y de campo débil, en la sección 6.4 se construye la función de partición microcanónica en la estadística de Tsallis para el gas autogravitante y se obtiene la ecuación de estado y la capacidad calorífica en el regimen diluido y de campo débil, finalmente en la sección 6.5 se discuten las variantes de esta estadística con la de BG, además de la incompatibilidad de dichos ensembles en la estadística de Tsallis y se propone una solución a partir de la redefinición de la energía en el ensamble microcanónico.

# Índice general

	Agra	adecimientos	Ι
	Intro	oducción	V
1.	Geo	ometrotermodinámica	1
	1.1.	Variedad de fase termodinámica	2
	1.2.	La variedad de estados de equilibrio	5
2.	Inte	erpretación Estadística de $G^{III}$	11
	2.1.	Teoría de Fluctuaciones	11
	2.2.	Métricas hessianas y métricas GTD	15
	2.3.	Difeomorfismo en la variedad de fase	18
		2.3.1. Solución para $G^{III}$ en dos dimensiones	25
		2.3.2. Gas Ideal	26
	2.4.	Solución para $G^{II}$ en dos dimensiones $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$	29
		2.4.1. Existencia de potenciales difeomórficos para $G^{I}$ y $G^{II}$	31
3.	Mo	delo de reparametrizaciones en el espacio fase termodinámico	35
	3.1.	Reparametrización estadística	36
	3.2.	La geometría de las fluctuaciones	40
	3.3.	Estructura Riemanniana en el espacio fase termodinámco	43
	3.4.	Origen estadístico de las metricas invariantes de Legendre	47
	3.5.	Función de distribucion generalizada y variedad de contacto Riemanniana $\ .\ .\ .$	48

	3.6.	Métricas invariantes de Legendre	51			
4.	Div	ergencias conformes como origen estadístico de $G^{I}$ y $G^{II}$	55			
5.	Ter	modinámica geométrica No aditiva	61			
	5.1.	La geometría de la estadística de Tsallis	62			
		5.1.1. Variedad de fase y de equilibrio para la estadística de Tsallis $\ .\ .\ .$ .	64			
6.	Mee	cánica estadística de un gas autogravitante Newtoniando en el marco de	е			
	Tsa	llis	75			
	6.1.	Gas autogravitante	77			
	6.2.	Variables físicas en la estadística de Tsallis	79			
	6.3.	Ensamble de temperatura constante	82			
		6.3.1. Regimen diluido	84			
		6.3.2. Ecuación de estado y capacidad calorífica	87			
	6.4.	Ensamble de energía constante	89			
		6.4.1. Regimen diluido	91			
		6.4.2. Ecuación de estado y capacidad calorífica	93			
	6.5.	Discusión	98			
Conclusiones 10						
Aj	pénd	ices	113			
	А.	Transformaciones de Legendre como transformación de coordenadas $\ .\ .\ .\ .$	115			
	В.	Invarianza de Legendre en $G^{I/II/III}$	118			
	С.	Funciones generalizadas de Tsallis	123			
Bi	Bibliografía 13					

## Capítulo 1

## Geometrotermodinámica

Con el objetivo de introducir la invariancia de Legendre en estructuras Riemannianas a nivel del espacio fase y del espacio de estados de equilibrio, Quevedo [17] propuso el formalismo de la Geometrotermodinámica (GTD). La motivación principal para introducir este formalismo fue proponer una descripción geométrica que tome en cuenta el hecho de que la descripción de los sistemas en termodinámica clásica no dependen del potencial termodinámico, i.e., que esta descripción sea invariante ante transformaciones de Legendre. Desde la perspectiva geométrica, consideramos la invariancia de Legendre como una propiedad sobre las estructuras geométricas que pertenecen a una variedad de contacto auxiliar llamada VFT. Mediante un encaje, la 1forma, que le da estructura de contacto a VFT, define a la subvariedad de Legendre de VFT, llamada VEE. Como consecuencia, la primera ley de la termodinámica se satisface sobre cada punto de VEE. Una de las ideas centrales de la termidodinámica geométrica es que cualquier sistema termodinámico es representado por su correspondiente VEE. La estructura Riemmaniana sobre VEE queda determinada dada la ecuación fundamental del sistema termodinámico. Así, las propiedades termodinámicas del sistema están representadas en términos de las propiedades geométricas de VEE, p. ej., la curvatura de VEE puede ser interpretada como una medida de la interacción termodinámica y las singularidades de curvatura indican la presencia de transformaciones de fase. Esto ha sido mostrado para un gran número de sistemas termodinámicos [25].

En esta sección presentaremos los elementos necesarios para la construcción del formalismo de GTD. En la sección (1.1) definiremos la VFT, como una variedad de contacto auxiliar que permite introducir la invariancia de Legendre. En la sección (1.2) definiremos la VEE, como la variedad física que codifica la información termodinámica del sistema en términos de estructuras geométricas.

### 1.1. Variedad de fase termodinámica

Como se mencionó anteriormente, la invariancia de Legendre es una propiedad que impondremos en las estructuras geométricas sobre una variedad auxiliar, la VFT. En GTD es necesario introducir una variedad de contacto Riemmaniana, VFT, cuya métrica y estructura de contacto son invariantes ante transformaciones de Legendre. Para esto, consideramos una transformación de Legendre como una transformación de coordenadas de la variedad VFT. Sea VFT una variedad diferencial de dimensión (2n + 1) y su espacio tangente  $T\mathcal{T}$ . Sobre  $T^*\mathcal{T}$  se introduce  $\theta \in \Lambda(\mathcal{T})$ , una 1-forma de contacto. Llamemos  $\mathcal{V} \subset T\mathcal{T}$  a un campo de hiperplanos en la variedad  $\mathcal{T}$ . Los campos de hiperplanos pueden ser descritos como el kernel de una 1-forma:  $\mathcal{V} := ker(\theta) = \{X \in T\mathcal{T} \mid \theta(X) = \mathbf{0}\}$ ; localmente, para cada punto p en  $\mathcal{T}$  existe una vecindad U y una 1-forma  $\theta$  definida en U tal que el kernel del mapeo lineal  $\theta_p : T_p\mathcal{T} \to \mathbb{R}$  es  $\mathcal{V}_p$  para todo p en U. Llamamos a cada uno de estos hiperplanos un elemento de contacto. Así, decimos que una estructura de contacto es una distribución suave de elementos de contacto  $\mathcal{V}$ , para todo punto p en  $\mathcal{T}$ , máximamente no integrable, i.e., si para cualquier 1-forma local  $\theta$  de  $\mathcal{V}$  se cumple la ecuación

$$\theta \wedge \underbrace{d\theta \wedge \ldots \wedge d\theta}_{n} \neq 0, \tag{1.1}$$

lo que implica que la forma es puntualmente diferente de cero. Geométricamente, la no integrabilidad de  $\mathcal{V}$  significa que  $\mathcal{V}$  no puede ser tangente a ninguna hipersuperficie en  $\mathcal{T}$ . Intuitivamente, esto nos dice que los hiperplanos se tuercen demasiado para ser tangentes a una hipersuperficie. Algo importante que notar que es el lado derecho de la ecuación (1.1) nos permite onstruir un elemento de volumen de la variedad  $\mathcal{T}$ . Con lo anterior, definimos al par  $(\mathcal{T}, \theta)$  como variedad de contacto. Nótese que la condición dada por la ecuación (1.1) es independiente de  $\theta$ ; de hecho, es propiedad de  $\mathcal{V} = ker(\theta)$ . Esto es claro si consideramos un mapeo  $\Omega : \mathcal{T} \to \mathcal{T}$ , tal que  $\Omega^*(\theta) = f\theta$ , donde  $f : \mathcal{T} \to \mathbb{R}/\mathbf{0}$ . Este mapeo nos permite describir a la estructura de contacto como  $\mathcal{V} = ker(f\theta)$ , al igual que reescribir la ecuación (1.1) como

$$f\theta \wedge \underbrace{d(f\theta) \wedge \ldots \wedge d(f\theta)}_{n} = f^{n+1}\theta \wedge \underbrace{d\theta \wedge \ldots \wedge d\theta}_{n} \neq 0.$$

Entonces decimos que  $f\theta$  genera la misma estructura de contacto,  $\mathcal{V} = ker(\theta)$ . Esto implica que la variedad de contacto ( $\mathcal{T}$ ,  $\theta$ ) es única, módulo una transformación conforme de  $\theta$ . Llamamos a este mapeo,  $\Omega$ , contactomorfismo.

Consideraremos que VFT está cubierta por las coordenadas independientes  $Z^A = \{\Phi, E^a, I^a\}$ ,  $a = 1, \ldots, n, A = 0, 1, \ldots, 2n$ . Donde se mostrará que en la VEE,  $\Phi$  representa el potencial termodinámico,  $E^a$  e  $I^a$  las variables extensivas e intensivas, respectivamente. El entero positivo nindica el número de grados de libertad termodinámicos del sistema. Como mencionamos anteriormente, la invariancia de Legendre, desde la perpectiva geométrica, constituye una propiedad sobre las estructuras geométricas de VFT. Esta propiedad se traduce en una invariancia ante una transformación de coordenadas termodinámicas  $\mathcal{L} : \{Z^A\} \longmapsto \{\tilde{Z}^A\}$ . Un estudio más detallado sobre transformaciones de Legendre como transformaciones de coordenadas se presentan en en apéndice (A), donde se exploran algunos ejemplos de transformaciones parciales y totales, ademas de las condiciones de invariancia sobre estructuras geométricas.

El teorema de Darboux [26] nos permite construir una forma local para la 1-forma de contacto  $\theta$  en VFT. Darboux mostró que siempre existen coordenadas de contacto locales  $Z^A = \{\Phi, E^a, I^a\}$ , conocidas en general como coordenadas de Darboux, en el cual  $\theta$  tiene una forma canónica, tambien llamada la 1-forma de contacto  $\theta$  o 1-forma fundamental de Gibbs,

$$\theta = d\Phi - \delta_{ab} I^a dE^b, \qquad \delta_{ab} = diag(1, 1, \dots, 1). \tag{1.2}$$

GEOMETROTERMODINÁMICA ESTADÍSTICA

Esta forma canonica de la 1-forma resulta ser invariante ante transformaciones de Legendre. Un análisis más detallado de esto se encuentra en el apéndice (A). El carácter Riemanniano de la variedad se introducirá a partir de una estructura métrica G. Hasta este punto la construcción de la VFT ha sido sistemática. Sin embargo en la GTD, la métrica Riemanniana Ges completamente arbitraria. Es aquí donde solo tomaremos en cuenta aquellas métricas que sean invariantes ante transformaciones de Legendre. Por lo tanto, la variedad de contacto ( $\mathcal{T}$ ,  $\theta$ ) es invariante ante transformaciones de Legendre y de igual manera la variedad de contacto Riemanniana ( $\mathcal{T}$ ,  $\theta$ , G), siempre y cuando demandemos que G también lo sea. De este modo, definiremos a la Variedad de Fase ( $\mathcal{T}$ ,  $\theta$ ) como cualquier variedad de contacto. En el contexto de la GTD, llamaremos a la Variedad de Fase Termodinámica a aquella variedad de contacto Riemanniana ( $\mathcal{T}$ ,  $\theta$ , G) cuyas componentes sean invariantes ante transformaciones de Legendre, y constituye el punto de partida para la descripción de sistemas termodinámicos en términos de conceptos geométricos.

Dada la construcción anterior, es claro que la única libertad en la construcción de la variedad de fase está en la selección de la métrica G. La invariancia de Legendre implica una serie de condiciones algebraicas para las componentes de la métrica  $G_{AB}$  que en general no se satisfacen de modo trivial, como se muestra en el apéndice (B). Es sencillo mostrar que la métrica plana  $G = \delta_{AB} dZ^A dZ^B$  no es invariante ante una transformación de Legendre, de modo que la variedad de fase es necesariamente curvada [17]. Mediante un análisis detallado de las condiciones de la invariancia de Legendre sobre la métrica, se encontró como solución la métrica [27]

$$G^{III} = (d\Phi - I_a dE^a)^2 + \Lambda (E_a I_a)^{2k+1} dE^a dI^a, \qquad E_a = \delta_{ab} E^b, \qquad I_a = \delta_{ab} I^b$$
(1.3)

donde  $\Lambda = \Lambda(\Phi, E^a, I^a)$  es una función arbitraria invariante ante transformaciones de Legendre, y  $k \in \mathcal{N}^+$ . La métrica (1.3) es la métrica más general que satisface las condiciones para la invariancia de Legendre totales y parciales. Su correspondiente escalar de curvatura [28]

$$R = \frac{2}{\Lambda^2} \left\{ \left[ \sum_{a=1}^n (E_a I_a)^{-2k-1} \right]^2 - 3 \sum_{a\neq b}^n (E_a I_a E_b I_b)^{-2k-1} \right\},$$
(1.4)

GEOMETROTERMODINÁMICA ESTADÍSTICA

muestra claramente que la variedad es curvada. Si nos limitamos al caso de transformaciones totales de Legendre, encontraremos que existe una clase de métricas,

$$G^{I/II} = (d\Phi - I_a dE^a)^2 + (\beta_{\Phi} \Phi)(\chi_{cd} dE^c dI^d),$$
(1.5)

parametrizadas a partir de dos parámetros,  $\beta_{\Phi}$  y  $\chi_{bc}$ .  $\beta_{\Phi}$  es el grado de homogeneidad generalizado del potencial termodinámico [29], introducido mediante una generalizacion de la ecuación de Euler, con el propósito de genralizar la aplicabilidad a GTD a sistemas cuya ecuación fundamental no sea homogenea de grado uno (se analizará con un poco de mas detalle en la siguiente sección). Mientras que  $\chi_{bc}$  es una matriz constante y diagonal que permanece invariante. Dado que este parámetro  $\chi_{bc}$  debe ser constante y diagonal, resulta natural expresarlo en términos de  $\delta_{ab} = diag(1, 1, ..., 1)$  y  $\eta_{ab} = diag(-1, 1, ..., 1)$ , para  $G^{I}$  y  $G^{II}$  respectivamente. Se ha mostrado [30], de manera empírica, que diferentes selecciones para  $\chi_{bc}$  relacionan su correspondiente geometría con diversos tipos de sistemas termodinámicos. Para la selección  $\chi_{ab} = \delta_{ab}$ , la ecuación (1.5) corresponde a  $G^{I}$  y es la métrica adecuada para el análisis de sistemas termodinámicos exóticos tales como agujeros negros. Dicho lo anterior, para un sistema termodinámico dado es muy importante seleccionar la métrica apropiada y así describir correctamente las propiedades termodinámicas en términos de las propiedades geométricas en GTD.

### 1.2. La variedad de estados de equilibrio

En la sección anterior se construyó la variedad auxiliar llamada VFT. Dicha variedad permite el manejo apropiado de las transformaciones de Legendre. Sin embargo, esta no posee la información termodinámica del sistema de interés. Por ello es precisa la introducción de una variedad física que permita, mediante sus estructuras geométricas, el estudio de las interacciones termodinámicas del sistema. Dicha variedad física, VEE, resulta estar contenida en VFT,  $\mathcal{E} \subset \mathcal{T}$ . Consideremos el mapeo suave  $\varphi : \mathcal{E} \to \mathcal{T}$ , donde  $\mathcal{E}$  es un subespacio de  $\mathcal{T}$ . Si  $\mathcal{E}$  es una subvariedad integral de dimensión maximal,  $(\dim(\mathcal{E}) = n)$  tal que el encaje  $\varphi$  satisface  $\varphi^*(\theta) = 0$ entonces  $\mathcal{E}$  es llamada subvariedad de Legendre. La dimensión de la variedad  $\mathcal{E}$  es n y corresponde a el número de variables termodinámicas independientes del sistema, i.e., el número de variables termodinámicas independientes necesarias para describir al sistema termodinámico. Si la 1-forma de contacto de VFT, en su forma local, está en términos de las coordenadas canónicas (1.2), entonces  $\mathcal{E}$  está definida de manera local. Esto es, para cualquier descomposición disjunta  $I \cup J$ del set de índices  $\{1, \ldots, n\}$  y para la función  $\Upsilon(E^I, I_J)$  de n variables  $I_j, j \in J$ , y  $E^i, i \in I$  las (n+1) ecuaciones

$$E^{i} = \frac{\partial \Upsilon}{\partial I_{i}} \quad , \quad I_{i} = -\frac{\partial \Upsilon}{\partial E^{i}} \quad , \quad \Phi = \Upsilon - I_{i} \frac{\partial \Upsilon}{\partial I_{i}}, \tag{1.6}$$

definen a la variedad  $\mathcal{E}$  como una subvariedad de Legendre [26]. Así, cada subvariedad de Legendre  $(\mathcal{E}, \theta)$  en una vecindad para cualquier punto está definida por (1.6) para al menos una de las  $2^n$  posibles formar de particionar el conjunto de índices  $\{1, \ldots, n\}$ . Si la subvariedad de Legendre  $\mathcal{E}$  se expresa como (1.6), entonces se dice que  $\mathcal{E}$  es la subvariedad de Legendre generada por  $\Upsilon(E^I, I_J)$  [32].

Como mencionamos antes, la VEE corresponde a una subvariedad de Legendre. Esto se lleva a cabo mediante el mapeo  $\varphi$ , el cual dede cumplir la condición de anular el pullback de la 1-forma de contacto  $\theta$ . Esto define el encaje como [33],

$$\varphi^*(\theta) = \varphi^*(d\Phi - I_a dE^a) = 0. \tag{1.7}$$

La ecuación (1.7) implica que

$$d\Phi = I_a dE^a, \qquad \frac{\partial \Phi}{\partial E^a} = I_a.$$
 (1.8)

Es claro que este encaje define a las variables  $\{E^a\}$  como las coordenadas canónicas sobre  $\mathcal{E}$  y a  $\{I_a\}$  como las componentes de la 1-forma  $d\Phi$ . En la VFT,  $Z^A = \{\Phi, E^a, I_a\}$  son consideradas como coordenadas independientes. Por lo tanto, no existe relación entre los parámetros  $\{I_a\}$  y  $\{E^a\}$ . Una vez que se define el encaje (1.7), podemos establecer la relación entre las variables termodinámicas (1.8), i.e., los parámetros en VFT adquieren un carácter termodinámico genuino;  $\{I_a\}$  constituyen las variables intensivas,  $\{E^a\}$  las extensivas y  $\Phi(E^a)$  la ecuación fundamental. Dicho esto es claro que las relaciones (1.8) corresponden a la primera ley de la termodinámica y a la condición de equilibrio termodinámico, respectivamente.

Así, decimos que en forma local el encaje  $\varphi : \mathcal{E} \to \mathcal{T}$  está dado como  $\varphi : \{E^a\} \to \{Z^A(E^a)\} = \{\Phi(E^a), E^a, I^a(E^a)\}$ . Dado que la variedad fase está equipada con la métrica no degenerada e invariante ante transformaciones de Legendre G, el pullback  $\varphi^*$  induce de manera canónica una *métrica termodinámica g*, sobre  $\mathcal{E}$ , que hereda de G su invariancia de Legendre,

$$g = \varphi^*(G)$$

$$= Z^A_{,a} Z^B_{,b} G_{AB} dE^a \overset{s}{\otimes} dE^b,$$
(1.9)

donde  $Z_{,a}^A = \frac{\partial Z^A}{\partial E^a}$ .

Dicho lo anterior, el mapeo  $\varphi : \mathcal{E} \to \mathcal{T}$  define una variedad de equilibrio  $(\mathcal{E}, g)$  como una subvariedad extremal de la variedad de fase  $(\mathcal{T}, \theta, G)$  en la cual la primera ley de la termodinámica y la condición de equilibrio termodinámico se cumplen. Esto significa que los estados de equilibrio están representados a través de puntos en la variedad de equilibrio, mientras que la variedad de fase es una estructura geométrica auxiliar que permite manejar correctamente las transformaciones de Legendre y define la variedad de equilibrio de un modo invariante. El mapeo demanda la existencia de la función  $\Phi = \Phi(E^a)$  conocida en la termodinámica como **ecuación fundamental** a partir de la cual todas las ecuaciones de estado pueden ser obtenidas y en la que toda la información termodinámica del sistema, está contenida. La segunda ley de la termodinámica es equivalente a las condiciones de convexidad en el potencial termodinámico

$$\pm \frac{\partial^2 \Phi}{\partial E^a \partial E^b} \ge 0, \tag{1.10}$$

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial E^{a2}} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial E^{b2}} - \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial E^a \partial E^b}\right)^2 \ge 0 \tag{1.11}$$

GEOMETROTERMODINÁMICA ESTADÍSTICA

donde el signo depende del potencial termodinámico. Si  $\Phi$  es definido como la entropía, el signo es negativo, mientras que si  $\Phi$  corresponde a la energía interna, el signo debe ser positivo.

Con el propósito de expandir la aplicabilidad del formalismo de la GTD para diferentes tipos de sistemas termodinámicos, es posible introducir diversas generalizaciones de las relaciones termodinámicas clásicas. Una propiedad importante de los sistemas termodinámicos de laboratorio es que sus ecuaciones fundamentales están dadas en términos de funciones homogéneas de primer orden. Esta propiedad de homogeneidad, en la mayoría de los casos físicos de interés, es una consecuencia del hecho de que las variables extensivas sean aditivas [34]. Sin embargo, en general, la aditividad no implica extensividad ni viceverza. De hecho en general ambos términos, extensividad y aditividad, no son intercambiables y estan ligados a propiedades físicas distintas [35]. Por un lado, se dice que una observable física es aditiviva si, para un sistema compuesto, la observable referida al sistema total es igual a la suma de dicha observable sobre la constribucion individual irreducible de cada subsistema que compone el sistema total. Por otro lado, una observable física es extensiva si la razón entre la observable, para todo el sistema, y n el número de subsistemas que componen el sistema total, permanece constante en el límite cuando  $n \to \infty$ . Condicion asociada a la existencia de un límite termodinámico para cantidades termodinámicas extensivas.

De modo que, si deseamos introducir la propiedad de variables "extensivas" no aditivas, es necesario suponer a  $\Phi(E^a)$  como una ecuación fundamental cuasi-homogénea [36]. En [29], se propuso una clasificación para sistemas termodinámicos como ordinarios y no ordinarios, esto usando el concepto de homogeneidad y homogeneidad generalizada.

Si  $\Phi$  es una función homogénea generalizada [37],

$$\Phi(\lambda^{\beta_1} E^1, \dots, \lambda^{\beta_n} E^n) = \lambda^{\beta_\Phi} \Phi(E^1, \dots, E^n)$$
(1.12)

donde  $\beta_a = (\beta_1, \dots, \beta_n)$  son constantes reales y  $\beta_{\Phi}$  es el grado de homogeneidad generalizado [29], se dice que el sistema es no ordinario. Si  $\beta_1 = \dots = \beta_n = \beta = 1$  recobramos la condición de homogeneidad de primer orden para  $\Phi$ , i.e., los sistemas termodinámicos ordinarios están caracterizados por  $\beta = 1$ . La propiedad de extensividad de los sistemas termodinámicos ordinarios llevan a un número de identidades las cuales suelen ser útiles para el estudio de propiedades físicas. Si se considera la función homogénea generalizada (1.12) y se escribe su derivada con respecto del parámetro  $\lambda$  en ambos lados de la ecuación, para  $\lambda = 1$  obtenemos

$$\beta_{ab}I^a E^b = \beta_\Phi \Phi, \quad con \quad \beta_{ab} = diag(\beta_1, \dots, \beta_n)$$

Donde usamos la segunda ecuación de (1.8). Esta expresión es conocida como *la identidad de Euler*. Calculando la derivada exterior de la ecuación anterior y usando de nuevo (1.7), obtenemos la *relación generalizada de Gibbs-Duhem* 

$$(\beta_{ab} - \beta_{\Phi}\delta_{ab})I^a dE^b + \beta_{ab}E^a dI^b = 0$$

Esta es la relación de Gibbs-Duhem para sistemas no ordinarios. Las expresiones clásicas para la identidad de Euler y para la relación de Gibbs-Duhem se obtienen de hacer  $\beta_{\Phi} = 1$  y  $\beta_{ab} = \delta_{ab}$ .

Tal como habíamos mencionado anteriormente, la métrica g de la variedad de equilibrio queda totalmente determinada por la métrica G mediante el pullback del mapeo  $\varphi$ . La métrica en  $\mathcal{E}$ , asociada a la métrica (1.5) en  $\mathcal{T}$ , se escribe como

$$g^{I/II} = \beta_{\Phi} \Phi(\chi_a^b \Phi_{,bc}) dE^a \otimes dE^c \quad con \quad \Phi_{bc} = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial E^b \partial E^c}$$
(1.13)

la cual ya no tiene constantes arbitrarias. Puede mostrarse que es invariante con respecto a transformaciones totales de Legendre (A).

De igual manera, la métrica (1.3) genera la métrica termodinámica

$$g^{III} = \Lambda(\xi_a^{\ b} E^a \Phi_b)^{2k+1} (\chi_a^{\ b} \Phi_{bc} dE^a dE^c),$$
(1.14)

donde

$$\xi_a^{\ b} = \xi_{ac} \delta^{bc}, \qquad \chi_a^{\ b} = \chi_{ac} \delta^{bc},$$

que resulta ser invariante ante transformaciones totales y parciales de Legendre. Es claro que una vez determinada la ecuación fundamental  $\Phi(E^a)$  las componentes de g quedarán dadas de manera explícita según las ecuaciones anteriores.

## Capítulo 2

# Interpretación Estadística de $G^{III}$

### 2.1. Teoría de Fluctuaciones

La primera aproximación de una descripción microscópica de la GTD la haremos en virtud de las ideas conceptuales de teoría de fluctuaciones en termodinámica clásica [38]. Es bien sabido que las propiedades termodinámicas de un sistema en equilibrio son un reflejo de los grados de libertad microscópicos del sistema. Esta conexión la hace la mecánica estadística. Siguiendo esta idea, decimos que un sistema termodinámico sufre transiciones continuas y azarosas entre entre configuraciones microscópicas. Dicho de otro modo, si un sistema está compuesto de un subsistema y su reservorio y ambos están en contacto térmico, estos experimentan transiciones incesantes entre sus microestados. Estas transiciones llevan a estados tales que la energía total del sistema es compartida en diferentes proporciones entre el reservorio y el subsistema. Así, según la mecánica estadística existe una división única de energía entre el subsistema y el reservorio tal que la entropía del sistema total es máxima. Llamamos a este estado, equilibrio termodinámico. De este modo, la energía del subsistema sufre pequeñas desviaciones alrededor de su valor de equilibrio. Llamamos a estas desviaciones, fluctuaciones.

Dada la pequeña magnitud de estas fluctuaciones, las mediciones macroscópicas de un sistema termodinámico son incapaces de detectarlas. Solo alrededor de puntos críticos, las fluctuaciones se vuelven lo suficientemente grandes para detectarlas mediante simples mediciones macroscópicas. Un ejemplo de esto es la opalescencia crítica. Existe una estrecha relación entre las fluctuaciones de un sistema y sus capacidades caloríficas, las cuales son de gran utilidad para describir las interacciones termodinámicas de éste [34]. Dicho lo anterior, resulta claro la importancia de su estudio para la descripción microscópica de un sistema termodinámico. Mostraremos el método estándar para identificar la distribución de probabilidad de estas fluctuaciones.

Consideremos un sistema grande, cerrado,  $A_o$  con energía y volumen constante,  $U_o$  y  $V_o$  respectivamente. Sabemos que es posible describir todas las propiedades termodinámicas del sistema mediante la ecuación fundamental, la que escribiremos en términos de la entropía

$$S_o = S_o(U_o, V_o)$$

Ahora, dividamos el sistema en dos secciones  $A_r$  y A, unidos por una pared inamovible que permite el flujo de energía térmica. El sistema A está descrito por una energía fluctuante  $U_A$  y volumen fijo  $V_A$ . El resto del universo es el reservorio  $A_r$ , con energía fluctuante  $U_r$  y volumen  $V_r \to \infty$ . Tal como se muestra en la siguiente figura (2.1)



Figura 2.1: Partición imaginaria dentro de un universo infinito, cerrado  $A_o$ . La partición encierra al sistema A, con volumen constante V.  $A_r$  es el reservorio de A, el cual es todo en  $A_o$  fuera de la partición.

Dado que, en general,  $S, U \ge V$  son cantidades aditivas, las ecuaciones fundamentales las podemos escribir como

$$S_o = V_o s_o(u_o),$$
  

$$S_r = V_r s_r(u_r),$$
  

$$S_A = V_A s_A(u_A)$$

donde  $\{s_o, s_r, s_A, u_o, u_r, u_A\}$  son cantidades por unidad de volumen. Dado que el volumen para cada constituyente permanece fijo, antes de llegar al equilibrio la energía es el único grado de libertad. En el momento en que el sistema entra en equilibrio térmico la entropía por unidad de volumen  $s(u^*)$  es común para los tres sistemas,  $A, A_r y A_o$ . Dicho de otro modo, cuando el sistema llega al equilibrio existe una densidad de energía  $u^*$ , igual para los tres constituyentes, que describe el equilibrio. En dicho equilibrio la entropía como funcion de  $u^*$  se vuelve la misma,  $s_o(u^*) = s_r(u^*) = s_A(u^*) = s(u^*)$ . A y  $A_r$  intercambian energía a través de fluctuaciones, las cuales están descritas por la teoría de fluctuaciones termodinámicas [39]. Dado que  $A_o$  corresponde a un sistema cerrado con energía y volumen constante, sus fluctuaciones están descritas por el ensamble microcanónico. Este ensamble nos afirma que todos los microestados accesibles de  $A_o$  ocurren con la misma probabilidad [40]. Por lo tanto, la probabilidad de encontrar la energía interna por unidad de volumen de A entre  $u \ge u + du$  es proporcional al número de microestados de  $A_o$ ,

$$P(u, V)du = C\Omega_o(u, V)du,$$

donde  $\Omega_o(u, V)$  es la densidad de estados accesibles de  $A_o$  y C es una factor de normalización. Usando la expresión de Boltzmann para la entropía [40]

$$S = k_B \ln \Omega_s$$

nos permite llegar a la a la relación de Einstein [38],

GEOMETROTERMODINÁMICA ESTADÍSTICA

$$P(u, V)du = C \exp\left[\frac{S_o(u, V)}{k_B}\right] du.$$
(2.1)

donde  $S_o(u, V)$  es la entropía de  $A_o$  cuando A tienen una energía interna por unidad de volumen u. La ecuación (2.1) es la base de de la teoría de fluctuaciones termodinámicas. Dado que la entropía es una cantidad aditiva, entonces

$$S_o(u, V) = V_A s(u_A) + V_r s(u_r).$$
(2.2)

Denominamos a la división de energía que lleva al equilibrio como  $u_A^*$  y  $u_r^*$ . Expandimos en serie de Taylor la entropía del universo (2.2) alrededor del estado de equilibrio

$$S_{o}(u,V) = S_{o} + V_{A}s'(u_{A}^{*})\Delta u_{A} + V_{r}s'(u_{r}^{*})\Delta u_{r} + \frac{V_{A}}{2!}s''(u_{A}^{*})(\Delta u_{A})^{2} + \frac{V_{r}}{2!}s''(u_{r}^{*})(\Delta u_{r})^{2} + \frac{V_{A}}{3!}s'''(u_{A}^{*})(\Delta u)^{3} + \cdots$$

donde la prima indica derivada con respecto a  $u_A$  para los términos relacionados con la subsistema y con respecto a  $u_r$  para los términos relacionados con el reservorio; y  $S_o$  es la entropía de  $A_o$  en equilibrio. Como permitimos que el sistema entre en equilibrio térmico entonces  $s'(u_A^*) = s'(u_r^*)$ , lo que claramente nos lleva a que  $u_A^* = u_r^*$ . Además, considerando la conservación de energía,  $V_A \Delta u_A = -V_r \Delta u_r$ , los dos términos de primer orden se cancelan. Además esta condición, si  $V_r \to \infty$ , permite cancelar términos de ordenes superiores para potencias de  $\Delta u_r$ . Finalmente, considerando la aditividad de energía  $V_A u_A^* + V_r u_r^* = V_o u_o$  lo que nos permite expresar  $u_A^* = u_r^* = u_o$ , podemos escribir la expansión en serie de Taylor de  $S_o(u, V)$  como

$$S_o(u,V) = S_o + \frac{V}{2!}s''(u_o)(\Delta u)^2 + \frac{V}{3!}s'''(u_o)(\Delta u)^3 + \cdots$$
(2.3)

Truncando esta serie a segundo orden nos lleva a la aproximación Gaussiana en la teoría de fluctuaciones termodinámicas [38]

$$P(u, V)du = \sqrt{\frac{V}{2\pi}} \exp\left[-\frac{V}{2}g(u_o)(\Delta u)^2\right]\sqrt{g(u_o)}du,$$

donde

$$g(u_o) \equiv -\frac{s''(u_o)}{k_B},$$

cantidad que siempre es positiva. Este análisis fue hecho para el caso unidimensional, pero es posible hacer la extensión a más dimensiones. Resulta que para el caso de dimensiones superiores, dos por ejemplo, la densidad de probabilidad de las fluctuaciones de A está dada como [41]

$$Pdx^{1}dx^{2} = \left(\frac{V}{2\pi}\right)\exp\left(-\frac{V}{2}g_{\mu\nu}\Delta x^{\mu}\Delta x^{\nu}\right)\sqrt{g}dx^{1}dx^{2},$$
(2.4)

donde en este caso

$$g_{\mu\nu} \equiv -\frac{1}{k_B} \frac{\partial^2 s}{\partial x^\mu \partial x^\nu} \tag{2.5}$$

representa los elementos de una métrica Hessiana [8].

Es justo en esta dirección que deseamos hacer la conexión entre las métricas de la GTD (1.5)-(1.3) y teoría de fluctuaciones. Deseamos poder heredar toda la información termodinámica contenida en las métricas (1.5)-(1.3) en métricas que se vean como métricas Hessianas de algún potencial termodinámico. Con esto podríamos atribuirle una densidad de probabilidad que caracterice las fluctuaciones de nuestro sistema termodinámico en cuestión y con ello proponer una conexión con la mecánica estadística que gobierna la dinámica de sus grados de libertad internos.

### 2.2. Métricas hessianas y métricas GTD

Tal como vimos anteriormente (2.1) el segundo momento de las fluctuaciones microscópicas de un sistema en equilibrio termodinámico resultan estar directamente relacionadas con las componentes de una métrica Hessiana. Pese a sus múltiples aplicaciones y conexión directa entre la geometría del VEE y la termodinánica del sistema, no es posible establecer una teoría de fluctuaciones microscópicas, de la manera en que se mencionó en (2.1), con GTD. Las métricas de GTD no son métricas Hessiana, y por lo tanto, su interpretación física no es clara. En la próxima sección (2.3) se mostrará que es posible , bajo una selección de coordenadas termodinámicas, transformar las métricas de la GTD en VEE a métricas Hessianas.

A continuación presentaremos una aproximación a teoría de fluctuaciones (2.1) desde el punto de vista geométrico. Considere una función analítica  $H(E^a)$ , a = 1, 2, ..., n. En una variedad n-dimensional, es posible introducir una carta coordenada que nos permita cubrir toda la variedad, de modo que podemos introducir tambien una métrica Hessiana como

$$g^{H} = \frac{\partial^{2} H}{\partial E^{a} \partial E^{b}} dE^{a} dE^{b}, \qquad (2.6)$$

si se satisface la condición  $\det(g^H) \neq 0$ . Si ahora consideramos el conjunto  $\{E^a\}$  como coordenadas de una variedad diferencial  $\mathcal{E}$  y la función  $H(E^a)$  como la ecuación fundamental termodinámica, entonces  $\mathcal{E}$  puede ser interpretada como una variedad de equilibrio con una métrica Hessiana (2.52) determinada por todas las propiedades geométricas de  $\mathcal{E}$ . La función  $H(E^a)$ es también conocida como potencial Hessiano. Este es el procedimiento estándar seguido por la termodinámica geométrica para cubrir el espacio de estados de equilibrio con una métrica. El significado físico de las componentes de la métrica, (2.1), justifica su uso y lleva a un gran número de aplicaciones físicas [42, 43, 44, 45, 46]. Dado que todos los puntos  $p \in \mathcal{E}$  corresponden a estados de equilibrio, entonces el conjunto coordenado  $\{E^a(p)\}$  determina localmente al punto p de equilibrio. Desde un punto de vista físico las fluctuaciones están siempre presentes. Denotaremos por  $dE^a$  a las desviaciones infinitesimales desde el punto de equilibrio de  $E^a$ . Para tomar en cuenta las fluctuaciones de  $H(E^a)$  alrededor del estado de equilibrio se analiza el comportamiento de su expansión en serie de Taylor,

$$H(E^{a} + dE^{a}) = H(E^{a}) + \frac{\partial H}{\partial E^{a}} dE^{a} + \frac{1}{2} \frac{\partial^{2} H}{\partial E^{a} \partial E^{b}} dE^{a} dE^{b} + \dots, \qquad (2.7)$$

En equilibrio, el potencial termodinámico alcanza un valor extremo, el cual puede ser mínimo o

máximo, dependiendo del tipo de potencial termodinámico que estamos usando para describir la termodinámica de nuestro sistema. Si el potencial termodinámico  $H(E^a)$  corresponde al que describe todo el universo (2.1), entonces la derivada de primer orden se anula en el equilibrio, bajo condiciones de equilibrio termodinámico y conservación de energía (2.1), y el segundo momento de las fluctuaciones corresponde a la métrica Hessiana. Podemos considerar a esto como la definición matemática de un potencial termodinámico en el marco de teoría de fluctuaciones. Usaremos esta definición para el análisis de el nuevo potencial termodinámico que introduciremos más adelante.

Sin embargo, desde un punto de vista físico, la interpretación de  $H(E^a)$  como un potencial termodinámico requiere la consideración de propiedades del sistema termodinámico en cuestión. Para analizar los procesos físicos que pueden ocurrir en un sistema termodinámico es necesario considerarlo como parte de un sistema más grande el cual incluye el reservorio (2.1). En el equilibrio, las propiedades de ambos sistemas y el reservorio deben ser consideradas y si la condición de aditividad se satisface, el potencial  $H(E^{a})$  se divide en dos partes, cada una con propiedades distintas. Después, diferentes argumentos se usan para mostrar que el segundo término en la serie de Taylor (2.7) se anula. Los argumentos dependen del significado físico del potencial termodinámico a usar [38]. Así, si H es la entropía S, entonces, el potencial termodinámico debe ser identificado como la entropía de todo el universo. Así, al igual como se realizó en (2.1), bajo condiciones de equilibrio térmico y conservación y energía, el primer momento de las fluctuaciones se anula y así el segundo momento corresponde a la métrica Hessiana de la entropía, la cual es conocida como la métrica de Ruppeiner [47], y también puede ser interpretada como una matriz de estabilidad en teoría de fluctuaciones. Lo anterior provee, a la métrica de Ruppeiner, con un significado físico claro y permite encontrar una conexión directa con teoría de la información [48, 49, 50]. Por otro lado si H es la energía interna U, un argumento similar puede ser usado para mostrar que el segundo momento de las fluctuaciones microscópicas  $\frac{\partial^2 U}{\partial E^a \partial E^b}$  determinan las componentes de la métrica de Weinhold [7], la cual está relacionada con la métrica de Ruppeiner por un factor conforme [51].

GEOMETROTERMODINÁMICA ESTADÍSTICA
#### 2.3. Difeomorfismo en la variedad de fase

En la presente sección mostraremos que es posible, usando la libertad de coordenadas en el VFT y VEE, para introducir un nuevo potencial termodinámico y nuevas coordenadas tales que la métrica  $G^{I}II$  en VEE es una métrica Hessiana. Esto prueba que las componentes de las métricas de la GTD pueden, también, ser interpretadas como el segundo momento de las fluctuaciones de un potencial termodinámio.

Procederemos elaborando un difeomorfismo en VFT tal que la métrica de GTD bajo el difeomorfismo se vea como una métrica  $G_{hess}$  tal que en la subvariedad de Legendre, VEE, la métrica inducida sea una métrica Hessiana. Nuestra meta inicial es poder determinar un difeomorfismo  $\chi_{\mathcal{T}}$ , sobre la variedad de fase termodinámica, tal que transforme las métricas (1.5 -1.3) a otras métricas (que definiremos un poco más adelante). Éstas cumplen que, bajo un encaje  $\bar{\varphi}_X$ , se pueden ver, con condiciones muy particulares, como métricas Hessianas, i.e., como el segundo momento de un potencial termodinámico F(X). Consideraremos el difeomorfismo  $\chi_{\mathcal{T}}$  como la transformación coordenada  $\{Z^A\} \mapsto \{\bar{Z}^A\}$ . Así, tenemos el siguiente esquema que ilustra la transformación sobre la variedad  $\mathcal{T}$ 



Sabemos que sobre el espacio de estados de equilibrio  ${\mathcal E}$  , se debe cumplir que,

$$\begin{split} \varphi_E : \mathcal{E} &\longrightarrow \mathcal{T} \mid \varphi_E^*(\theta) = \varphi_E^*(\theta_A dZ^A) = 0, \\ \bar{\varphi}_X : \mathcal{E} &\longrightarrow \mathcal{T} \mid \bar{\varphi}_X^*(\bar{\theta}) = \bar{\varphi}_X^*(\theta_{\bar{A}} d\bar{Z}^A) = 0. \end{split}$$

Donde  $\theta$  se la 1-forma de contacto sobre  $T^*\mathcal{T}$  con  $dim(\mathcal{T}) = 2n + 1$ . De manera más explícita,

tomando las coordenadas  $\{\bar{Z}^A\}=\{F,X^a,Y^a\},$ dado el mape<br/>o $\varphi$  de la transformación,

$$\varphi_E : \mathcal{E} \longrightarrow \mathcal{T} \mid \varphi_E : \{E^a\} \to \{Z^A\} = \{\Phi, E^a, I^a\},$$
  
$$\bar{\varphi}_X : \mathcal{E} \longrightarrow \mathcal{T} \mid \bar{\varphi}_X : \{X^a\} \to \{\bar{Z}^A\} = \{F, X^a, Y^a\}$$

Por el teorema de Daboux [52] tenemos que en general, dadas las coordenadas  $\{Z^A\} = \{\Phi, E^a, I^a\}, \theta$  se puede escribir de manera canónica (1.2), donde es claro que  $\theta \in T^*\mathcal{T}_{\{Z^A\}}$ . Como mencionamos en la sección (1.1), podemos construir la 1-forma de contacto módulo una transformación conforme. Así, dado el teorema de Darboux [52] es posible construir, en las coordenadas  $\{\bar{Z}^A\} = \{F, X^a, Y^a\}$ , una 1-forma de contacto canónica dada como  $\bar{\theta} =$  $f(F, X^a, Y^a)(dF - \delta_{ab}Y^a dX^b)$ , donde  $f(F, X^a, Y^a)$  es una función no nula y suave. Lo que debemos corroborar es si la transformación coordenada  $Z^A \to \bar{Z}^A$  puede ser usada también para identificar las dos formas canónicas, i.e., si la ecuación diferencial  $d\Phi - \delta_{ab}I^a dE^b = f(dF - \delta_{ab}Y^a dX^b)$ se satisface. En términos técnicos, nos preguntamos si la transformación  $Z^A \to \bar{Z}^A$  es un contactomorfismo [53]. Para corroborar esto es necesario calcular las ecuaciones no se satisfacen para cualesquiera métricas de la GTD. Sin embargo, un análisis detallado de la forma analítica de las condiciones de integrabilidad muestran que éstas se satisfacen si imponemos una "deformación" en la 1-forma de contacto en las coordenadas  $\bar{Z}^A$ , i.e.,  $\theta \to f_0 dF - \delta_{ab}(f'Y)^a dX^b$ , donde las funciones  $f_0$  y  $f'^a$  son no nulas y suaves que dependen de todas las coordenadas  $\{F, X^a, Y^a\}$ .

Así, la nueva 1-forma de contacto  $\bar{\theta}$  está dada como

$$\bar{\theta} = f_a dF - \delta_{ab} (f'Y)^a dX^b. \tag{2.8}$$

Esta será la 1-forma de contacto que utilizaremos para todos cálculos posteriores. Para poner una estructura Riemanianna sobre  $\mathcal{T}$  usaremos una métrica no degenerada que además es *invariante* ante transformaciones de Legendre:

$$ds^{2} = \theta^{2} + h_{ab}dE^{a}dI^{b}$$
  
=  $(d\Phi - \delta_{ab}I^{a}dE^{b})^{2} + h_{ab}(Z^{A})dE^{a}dI^{b},$  (2.9)

donde  $h_{ab}$  es una matriz que define a cual métrica de la GTD corresponde:

$$h_{ab} = \begin{cases} \delta_{ab} \Lambda(Z^A) \delta_{cd} E^c I^d & para \ G^I \\ \eta_{ab} \Lambda(Z^A) \delta_{cd} E^c I^d & para \ G^{II} \end{cases}$$

mientras que para  $G^{III}$ ,  $h_{ab}$  resulta ser una matriz diagonal cuyos elementos están dados por

$$h_{aa} = \Lambda(Z^A)(E_a I_a)^{2k+1} \quad para \quad G^{III}.$$
(2.10)

Imponemos que bajo el mapeo  $\chi_{\mathcal{T}}$ , la métrica (2.9) se transforma a

$$\bar{ds}^2 = \bar{\theta}^2 + \delta_{ab} dX^a dY^b,$$

$$= (f_0 dF - \delta_{ab} (f'Y)^a dX^b)^2 + \delta_{ab} dX^a dY^b.$$

$$(2.11)$$

Consideremos ahora la variedad de estados de equilibrio correspondiente  $\mathcal{E}$ , dado por el mapeo  $\bar{\varphi}: \mathcal{E} \to \mathcal{T}$  definido mediante la condición  $\bar{\varphi}^*(dF - \delta_{ab}Y^a dX^b) = 0$ . Entonces, la métrica termodinámica  $\bar{g} = \bar{\varphi}^*(\bar{G})$  inducida sobre  $\mathcal{E}$  puede ser expresada como

$$\bar{g} = \left[ (f_0 - f'^a)(f_0 - f'^b) \left(\frac{\partial F}{\partial X^a}\right) \left(\frac{\partial F}{\partial X^b}\right) + \frac{\partial F}{\partial^2 X^a \partial X^b} \right] dX^a dX^b.$$
(2.12)

Observamos que esta métrica contiene derivadas de primer y segundo orden de la nueva coordenada  $F(X^a)$ , además de que depende de las n + 1 funciones arbitrarias  $f_0$  y  $f'^a$ . Al igual que en la métrica inducida sobre  $\mathcal{E}$  (1.13) o (1.14), una vez especificada la función  $F(X^a)$ , la métrica puede ser calculada explícitamente. Esto implica que  $F(X^a)$  juega el papel de la ecuación fundamental en la nuevas coordenadas  $\overline{Z}^A$ .

Recordemos que, en la sección (2.1), para poder escribir a la entropía total del universo,

 $S_o(u, V)$ , como una expansión de Taylor alrededor del estado de equilibrio de A, fue necesario establecer condiciones de equilibrio térmico, conservación de energía y aditividad de energía. Para ser precisos, la condición de equilibrio térmico y conservación de energía permitieron cancelar los términos de primer orden en potencias de  $\Delta u$  y  $\Delta u_r$  en la expansión de  $S_o(u, V)$ .

Equilibrio térmico	$s'(u^*) = s'(u^*_r)  \rightarrow  u* = u^*_r$
Conservación de enegía	$V\Delta u = -V_r\Delta u_r$
Aditividad de enegía	$Vu^* + V_r u_r^* = V_o u_o  \rightarrow  u^* = u_r^* = u_o$

La tabla anterior nos muestra que

$$\frac{\partial S_o(U_o, V_o)}{\partial u_o} \Delta u_o = V \frac{\partial s(u^*)}{\partial u^*} \Delta u + V_r \frac{\partial s(u_r^*)}{\partial u_r^*} \Delta u_r = \frac{\partial S_o(u, V)}{\partial u^*} \Delta u = 0.$$
(2.13)

De modo que esto es equivalente a exigir que  $\partial S_o(u, V)/\partial u^* = 0$ , donde  $S_o$  corresponde a la entropía total del sistema  $A_o$  (universo) y  $u^*$  es la energía del estado de equilibrio del subsistema A. Dicho de otro modo, la condición  $\partial S_o(u, V)/\partial u^* = 0$  es equivalente a exigir que el sistema esté en equilibrio térmico y que se satisfaga la conservación de energía. Al igual que en la sección de teoría de fluctuaciones (2.1), es posible hacer un análisis del sistema  $A_o$  (universo) en términos del nuevo potencial termodinámico  $F(X^a)$ , así exigir que  $\partial F(X^a)/\partial X^b = 0$  nos lleva a dos aseveraciones; la primera es que en este caso  $F(X^a)$  representa el potencial termodinámico del subsistema A, y la segunda es que esta condición asegura la existencia de estados de equilibrio termodinámico representa  $\partial F(X^a)/\partial X^b = 0$ , es una cuestión que aún no queda del todo clara. Sin embargo, si exigimos que  $\partial F(X^a)/\partial X^b = 0$ , en todos los puntos de la variedad de estados de equilibrio la métrica  $\bar{q}$  se reduce a

$$\bar{g} = \frac{\partial^2 F}{\partial X^a \partial X^b} dX^a dX^b.$$
(2.14)

Si por otro lado, consideramos las fluctuaciones infinitesimales  $dX^a$  del potencial F alrededor de un estado de equilibrio  $X^a$ , obtenemos

$$F(X^{a} + dX^{a}) = F(X^{a}) + \frac{1}{2} \frac{\partial^{2} F}{\partial X^{a} \partial X^{b}} dX^{a} dX^{b}.$$
(2.15)

Así, podemos decir que las componentes de las métricas de la GTD en el espacio de estados de equilibrio pueden ser intepretadas como el segundo momento de las fluctuaciones del nuevo potencial termodinámico F.

Cómo mencionamos anteriormente, exigir la que la transformación  $Z^A \mapsto \overline{Z}^A$  sea un contactomorfismo implica una serie de ecuaciones diferenciales en principio muy complicadas de resolver. De modo que se propuso que esta transformación deforme la 1-forma de contacto  $\theta \to f_0 dF - \delta_{ab} (f'Y)^a dX^b$ , donde las funciones  $f_0$  y  $f'^a$  son no nulas y suaves que dependen de todas las coordenadas  $\{F, X^a, Y^a\}$ . Por otro lado, en general las ecuaciones que describen un difeomorfismo resultan ser ecuaciones diferenciales parciales de segundo orden acopladas bastante complicadas de resolver. De modo que para simplificar nuestro problema propondremos que el difeomorfismo  $\chi_{\mathcal{T}}$ , que nos lleva de la métrica (2.9) a la (2.11), cumpla con las siguientes condiciones

$$\chi^*_{\mathcal{T}}(\delta_{ab}dX^a dY^b) = h_{ab}(Z^A)dE^a dI^b$$
(2.16)

$$\chi_{\mathcal{T}}^*(\bar{\theta}) = \theta. \tag{2.17}$$

Tenemos que la condición (2.17) es una condición de la 1-forma de contacto sobre la variedad de fase termodinámica. De manera más explícita, esta expresión se escribe como

$$\theta = \chi_{\mathcal{T}}^*(\bar{\theta})$$
$$= \chi_{\mathcal{T}}^*(\theta_{\bar{A}} d\bar{Z}^A)$$
$$= \theta_{\bar{A}} \frac{\partial \bar{Z}^A}{\partial Z^A} dZ^A$$
$$= \theta_A dZ^A.$$

Así, usando la forma explícita de las 1-formas en las coordenadas  $\{Z^A\}$  y  $\{\bar{Z}^A\}$ , (1.2) y (2.8), respectivamente, tenemos que de la condición (2.17) se desprenden 2n + 1 ecuaciones para F,

$$\frac{\partial F}{\partial I^a} = \delta_{bc} (f'Y)^b (Z^A) \frac{\partial X^c}{\partial I^a}, \qquad (2.18)$$

$$\frac{\partial F}{\partial E^a} = \delta_{bc} (f'Y)^b (Z^A) \frac{\partial X^c}{\partial E^a} - \frac{I_a}{f_o(\bar{Z}^A(Z^A))}, \qquad (2.19)$$

$$\frac{\partial F}{\partial \Phi} = \frac{1}{f_o(\bar{Z}^A(Z^A))} + \delta_{ab}(f'Y)^a(Z^A)\frac{\partial X^b}{\partial \Phi}.$$
(2.20)

Es claro que si conocemos la transformación de  $X^a$  y  $Y^a$ , las parciales del lado derecho pasarían a ser funciones de  $\{Z^A\}$ . De este modo es posible tomar a las ecuaciones (2.18), (2.19) y (2.20) como resultante de tomar a dF como una diferencial exacta, i.e., una forma diferencial Pfaffiana. Teniendo esto en cuenta, es posible extraer las relaciones de Schwartz [54] o condiciones de *integrabilidad* de la función  $F = F(Z^A)$ ,

$$\frac{\partial^2 F}{\partial \Phi \partial I^a} = \frac{\partial^2 F}{\partial I^a \partial \Phi}, \qquad (2.21)$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial \Phi \partial E^a} = \frac{\partial^2 F}{\partial E^a \partial \Phi}, \qquad (2.22)$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial E^a \partial I^b} = \frac{\partial^2 F}{\partial I^b \partial E^a}.$$
(2.23)

$$\frac{\partial^2 F}{\partial E^a \partial E^b} = \frac{\partial^2 F}{\partial E^b \partial E^a}.$$
(2.24)
$$\frac{\partial^2 F}{\partial E^a \partial T^b} = \frac{\partial^2 F}{\partial F^a \partial T^a}.$$
(2.25)

$$\frac{\partial T}{\partial I^a \partial I^b} = \frac{\partial T}{\partial I^b \partial I^a}.$$
(2.25)

Así, usando las ecuaciones (2.18), (2.19) y (2.20) en (2.21)-(2.25) se obtienen las condiciones de integrabilidad de la función  $F = F(Z^A)$  o ecuaciones del contactomorfismo:

$$\delta_{ab} \frac{f^a}{f_0} \{X^a, Y^b\}_{\Phi E^c} = \delta_{ab} Y^a \left\{ \frac{f^a}{f_0}, Y^b \right\}_{\Phi E^c} - \left( \frac{\partial}{\partial E^a} + \delta_{ac} I^a \frac{\partial}{\partial \Phi} \right) \left( \frac{1}{f_o} \right), \qquad (2.26)$$

$$\delta_{ab} \frac{f^a}{f_0} \{X^b, Y^b\}_{\Phi I^c} = \delta_{ab} Y^a \left\{ \frac{f^a}{f_0}, Y^b \right\}_{\Phi I^c} - \frac{\partial}{\partial I^a} \left( \frac{1}{f_o} \right), \tag{2.27}$$

$$\delta_{ab} \frac{f^a}{f_0} \{X^a, Y^d\}_{E^c I^d} = \delta_{ab} Y^a \left\{ \frac{f^a}{f_0}, Y^b \right\}_{E^c I^d} + \frac{\delta_{c,d}}{f_o} + \delta_{ec} I^e \frac{\partial}{\partial I^d} \left( \frac{1}{f_o} \right), \tag{2.28}$$

$$\delta_{ab} \frac{f^a}{f_0} \{X^a, Y^d\}_{E^c E^d} = \delta_{ab} Y^a \left\{ \frac{f^a}{f_0}, Y^b \right\}_{E^c E^d} + \left( \delta_{ec} I^e \frac{\partial}{\partial E^d} - \delta_{ed} I^e \frac{\partial}{\partial E^c} \right) \left( \frac{1}{f_o} \right) (2.29)$$

$$\delta_{ab} \frac{f^{a}}{f_{0}} \{X^{a}, Y^{b}\}_{I^{a}I^{b}} = \delta_{ab} Y^{a} \left\{ \frac{f^{a}}{f_{0}}, Y^{b} \right\}_{I^{c}I^{d}}$$
(2.30)

Donde estamos usando la notación  $\{\bar{Z}^A, \bar{Z}^B\}_{Z^A, Z^B} = \frac{\partial \bar{Z}^A}{\partial Z^A} \frac{\partial Z^B}{Z^B} - \frac{\partial \bar{Z}^A}{\partial Z^B} \frac{\partial \bar{Z}^A}{Z^B}$ . Es claro que a éste nivel, observando las ecuaciones (2.26)-(2.30), aún no tenemos condiciones explícitas para  $F = F(\Phi, E^a, I^a)$  de modo que es preciso complementar esta información con las ecuaciones (2.18)-(2.20).

Así podemos escribir la condición (2.16) de manera más explícita, y comparando coeficientes de  $dZ^A$  se pueden escribir las siguientes constricciones

$$[X^c, Y_c]_{\Phi\Phi} = 0, (2.31)$$

$$[X^c, Y_c]_{E^a E^b} = 0, (2.32)$$

$$[X^c, Y_c]_{I^a I^b} = 0, (2.33)$$

$$[X^c, Y_c]_{\Phi E^a} = 0, (2.34)$$

$$[X^c, Y_c]_{\Phi I^a} = 0, (2.35)$$

$$[X^{c}, Y_{c}]_{E^{a}I^{b}} = h_{ab}(Z^{A}), (2.36)$$

donde  $[X^c, Y_c]_{Z^A Z^B} = \frac{\partial X^c}{\partial Z^A} \frac{\partial Y_c}{Z^B} + \frac{\partial X^c}{\partial Z^B} \frac{\partial Y_c}{\partial Z^A}$ . Es importante notar que los corchetes dados por las ecuaciones (2.26)-(2.30) son ecuaciones antisimétricas en sus dos entradas, i.e., cumplen con:

 $\{X^c, Y_c\}_{Z^A Z^B} = -\{X^c, Y_c\}_{Z^B Z^A} = -\{Y_c, X^c\}_{Z^A Z^B} = \{Y_c, X^c\}_{Z^B Z^A}.$ 

Mientras que los corchetes cuadrados dados por (2.31)-(2.36), son simétricos:

$$[X^{c}, Y_{c}]_{Z^{A}Z^{B}} = [X^{c}, Y_{c}]_{Z^{B}Z^{A}} = [Y_{c}, X^{c}]_{Z^{A}Z^{B}} = [Y_{c}, X^{c}]_{Z^{B}Z^{A}}.$$

Es claro que ahora las condiciones (2.16) y (2.17) se han traducido a las ecuaciones (2.26)-(2.36). De modo que son ahora éstas once ecuaciones que nos determinan completamente el difeomorfismo.

### **2.3.1.** Solución para $G^{III}$ en dos dimensiones

Recordemos que la forma de  $h_{ab}$  para el caso de la métrica  $G^{III}$  esta dada como  $h_{aa} = (E_a I_a)^{2k+1}$ . Dada la forma de esta matriz las ecuaciones (2.31)-(2.36) se desacoplan. Resolviendo así, primero (2.31)-(2.36) para determinar la transformación de  $X^a$  y  $Y^a$  y después introduciendo esto en (2.26)-(2.30) para obtener  $f_0$  y $f^a$ , obtenemos las herramientas necesarias para integrar completamente (2.18)-(2.20). Así, la transformación está dada como:

$$F = \Phi,$$

$$X^{a} = \frac{(E^{a})^{2k+2}}{2k+2},$$

$$Y^{a} = \frac{(I^{a})^{2k+2}}{2k+2},$$

$$f_{0} = 1,$$

$$f^{a} = (2k+2)^{-\frac{k}{k+1}} (X^{a}Y^{a})^{-\frac{2k+1}{2k+2}}.$$
(2.37)

Donde notamos rápidamente que en este caso F corresponde idénticamente con el potencial termodinámico, mientras que las coordenadas  $X^a$  son proporcionales potencias de las variables extensivas y las coordenadas  $Y^a$  son proporcionales a potencias de las variables intensivas.

#### 2.3.2. Gas Ideal

Como mencionamos antes, es posible imponer una transformación de coordenadas tal que podamos transformar las métricas obtenidas en GTD a métricas (2.11), que bajo el encaje adecuado en la variedad de estados de equilibrio, se interpretan como el segundo momento de las fluctuaciones de un nuevo potencial termodinámico F. Dicha transformación dependerá fuertemente de la función coordenada  $h_{ab}$ . Esta función parametriza las clases de métricas invariantes de Legendre. En [36] se estudió con detalle la termodinámica del gas ideal desde el punto de vista de la GTD. Se mostró que la geometría que describe el sistema es trivial, i.e., la curvatura del espacio de estados de equilibrio es nula en toda la variedad. Esto nos indica que en el gas ideal no hay interacciones termodinámicas, como es de esperarse. Para dicho análisis se recurrió a la tercera clase de métricas en GTD,  $G^{III}$ , (1.3). A continuación presentaremos una breve descripción de la termodinámica del gas ideal vista desde la GTD.

Para éste sistema tenemos que su termodinámica está descrita por la primera ley de la termodinámica, en las coordenadas  $\{Z^A\}$ ,

$$dS = \frac{dU}{T} + \frac{PdV}{T}.$$
(2.38)

Donde reconocemos las coordenadas  $\{Z^A\}$ 

$$\phi = S,$$

$$E_1 = U,$$

$$E_2 = V,$$

$$I_1 = \frac{1}{T},$$

$$I_2 = \frac{P}{T}.$$

$$(2.39)$$

Así, tenemos que sobre la variedad de fase termodinámica,  $G^{III}$  para el gas ideal, con las

coordenadas  $\{Z^A\}$ , se ve como,

$$G_{IG}^{III} = \left(dS - \frac{dU}{T} - \frac{PdV}{T}\right)^2 + \left(\frac{U}{T}\right)^{2k+1} dUd\left(\frac{1}{T}\right) + \left(\frac{VP}{T}\right)^{2k+1} dVd\left(\frac{P}{T}\right).$$
(2.40)

Así mediante el encaje  $\varphi^*(\theta) = 0$  construimos la subvariedad de estados de equilibrio junto con su métrica inducida

$$g_{IG} = \left(U\frac{\partial S}{\partial U}\right)^{2k+1} \frac{\partial^2 S}{\partial U^2} dU^2 + \left(V\frac{\partial S}{\partial V}\right)^{2k+1} \frac{\partial^2 S}{\partial V^2} dV^2 + \left[\left(U\frac{\partial S}{\partial U}\right)^{2k+1} + \left(V\frac{\partial S}{\partial V}\right)^{2k+1}\right] \frac{\partial^2 S}{\partial U \partial V} dU dV$$

$$(2.41)$$

Recordemos que la métrica (2.41) está totalmente determinada siempre y cuando esté dada la ecuación fundamental del gas ideal. La cual está dada como

$$S(U,V) = S_0 + Nk_B c_v \ln\left(\frac{U}{U_0}\right) + Nk_B \ln\left(\frac{V}{V_0}\right).$$
(2.42)

Así, tenemos que la métrica sobre  $\mathcal{E}$  se escribe como

$$g_{IG} = -(Nk_B)^{2k+2} \left[ c_v^{2k+2} \frac{dU^2}{U^2} + \frac{dV^2}{V^2} \right].$$
(2.43)

Así, es claro que bajo el cambio de coordenadas  $\gamma = \gamma_0 + (Nk_Bc_v)^{k+1} \ln Uy \zeta = \zeta_0 + (Nk_B)^{k+1} \ln V$  obtenemos una métrica plana

$$-g_{IG} = ds^2 = d\gamma^2 + d\zeta^2.$$
 (2.44)

Para realizar la conexión entre este sistema termodinámico y teoría de fluctuaciones, se determinó la transformación coordenada entre la métrica (1.3) y (2.11). Se obtuvo que el difeomorfismo (2.37) realiza correctamente la transformación y cuyo Jacobiano es diferente de cero en todo punto.

 $f^a$ 

$$F = S,$$

$$X^{1} = \frac{U^{2k+2}}{2k+2},$$

$$X^{2} = \frac{V^{2k+2}}{2k+2},$$

$$Y^{1} = \frac{T^{-(2k+2)}}{2k+2},$$

$$Y^{1} = \left(\frac{P}{T}\right)^{2k+2} \frac{1}{2k+2},$$

$$f_{0} = 1,$$

$$= (2k+2)^{-\frac{k}{k+1}} (X^{a}Y^{a})^{-\frac{2k+1}{2k+2}}.$$

Entonces, usando a la entropía como ecuación fundamental, nuestra transformación de coordenadas  $\{S, U, V, 1/T, -P/T\} \rightarrow \{F, X_1, X_2, Y_1, Y_2\}$  nos permite definir el nuevo potencial termodinámico,

$$F = F_0 + \frac{Nk_B c_v}{2(k+1)} \ln\left(\frac{X_1}{X_0^1}\right) + \frac{Nk_B}{2(k+1)} \ln\left(\frac{X_2}{X_0^2}\right).$$
(2.45)

Es claro que este potencial contiene la misma información termodinámica que S(U, V), i.e., estamos heredando la termodinámica mediante el difeomorfismo. Así, tenemos que sobre variedad de estados de equilibrio  $\mathcal{E}$ , definida mediante el mapeo  $\bar{\varphi} : \mathcal{E} \to \mathcal{T}$  tal que  $\bar{\varphi}^*(dF - \delta_{ab}X^a dY^b) = 0$ , podemos inducir la métrica termodinámica  $\bar{g} = \bar{\varphi}(\bar{G})$  dada en general por (2.12). En este caso, dada la transformación (2.37) y la ecuación fundamental F(X), esta métrica inducida toma la forma

$$\bar{g} = \begin{pmatrix} \frac{A'^2 - \alpha}{X_1^2} & \frac{A'B'}{X_1X_2} \\ \frac{A'B'}{X_1X_2} & \frac{B'^2 - \beta}{X_2^2} \end{pmatrix}$$

Donde  $A', B', \alpha \neq \beta$  son constantes que dependen de  $N, c_V \neq k$ . Calculamos el escalar de curvatura y obtenemos que éste es, en general, diferente de cero. Sin embargo a éste nivel, aun no le damos a  $F(X^a)$  el carácter de potencial termodinámico. Es importante exigir el equilibrio termodinámico que otorga la condición  $\partial F/\partial X = 0$ . De éste modo, en todos los puntos de equilibrio  $\bar{g}$  se reduce  $\mathbf{a}$ 

$$\bar{g} = -\frac{Nk_B}{2(k+1)} \left[ c_v \frac{dX_1^2}{X_1^2} + \frac{dX_2^2}{X_2^2} \right].$$
(2.46)

Cuyo escalar de curvatura se anula al igual que lo hace el de la métrica sobre  $\mathcal{E}$  en las coordenadas  $\{Z^A\} = \{S, V, U, 1/T, -P/T\}$ . Como hemos mencionado, en GTD la ausencia de curvatura está dada como una manifestación de la ausencia de interacciones termodinámicas. De este modo, podemos decir que la información termodinámica contenida en (2.43) es la misma que (2.46). Además, hemos logrado nuestro cometido, logramos un cambio coordenado que nos permite interpretar la métrica de la GTD en términos del segundo momento de las fluctuaciones del potencial termodinámico  $F(X^a)$ . Dado que la curvatura de la métrica (2.46) se anula, deben existir coordenadas en las que tome su forma euclidiana. Así, usando las coordenadas

$$\xi = \xi_0 + \sqrt{\frac{Nk_B c_v}{2(k+1)}} \ln X_1, \qquad \eta = \eta_0 + \sqrt{\frac{Nk_B}{2(k+1)}} \ln X_2, \tag{2.47}$$

obtenemos,

$$ds^2 = d\xi^2 + d\eta^2. (2.48)$$

De modo que, haciendo la elección adecuada de constantes de integración tenemos que  $\xi > 0$ y  $\eta > 0$ . Esto implica que el espacio de estados de equilibrio del gas ideal puede ser representado como el cuadrante positivo de un plano cartesiano.

### 2.4. Solución para $G^{II}$ en dos dimensiones

Mediante un análisis de integrabilidad de las ecuaciones (2.31)-(2.36), con ayuda del software Maple v18.02 (Maplesoft 1981-2014), se mostró que para el caso 2-dimensional con  $h_{ab}$  correspondiente a  $G^{II}$  el sistema se vuelve inconsistente. Dicho de otro modo, no existe solución a las ecuaciones del difeomorfismo para la métrica  $G^{II}$  en el caso 2-dimensional.

Decidimos generalizar las métricas correspondientes a  $G^{I}$ ,  $G^{II}$  y  $G^{III}$ , para el caso de dos dimensiones, de la siguiente manera

$$h_{11} = a E_1 I_1 + b E_2 I_1,$$

$$h_{22} = c E_1 I_1 + d E_2 I_1.$$
(2.49)

Donde es claro que para el caso de a = b = c = d = 1 recuperamos la métrica  $G^{I}$ , para a = b = -1 y c = d = 1 recuperamos la métrica  $G^{II}$  y para a = d = 1 y b = c = 0 recuperamos la métrica  $G^{III}$ . De modo que a, b, c, d son constantes arbitrarias. La pregunta que se hizo fue, ¿Existe una selección de estos parámetros constantes tales que las ecuaciones de integrabilidad para (2.31)-(2.36) se vuelva consistente? De nuevo, con ayuda del software Maple, se mostró que para el caso 2-dimensional, con  $h_{11}$  y  $h_{22}$  como se mustra enteriormente correspondiente a  $G^{II}$  y  $G^{I}$ , el sistema se vuelve inconsistente, independientemente de la selección de a, b, c, d.

Para confirmar lo anterior, se hizo un análisis mucho más sencillo. Construimos una variedad, que llamaremos variedad simpléctica, 2n dimensional. Sobre ésta colocaremos una estructura métrica dada por  $\mathcal{G} = h_{ab} dE^a dI^b$ , con  $h_{ab}$  las funciones correspondientes a las métricas  $G^I$  y  $G^{II}$ . Se procedió a obtener su escalar de curvatura, para n = 2,

$$R = -\frac{6(E_1I_1 - E_2I_2)}{(E_1I_1 + E_2I_2)^3}.$$
(2.50)

Esto nos dice que la geometría que representa la métrica  $\mathcal{G}$  no es trivial. Por otro lado, si definimos sobre nuestra variedad simpléctica la estructura métrica  $\mathcal{G}' = \delta_{ab} dX^a dY^b$ , es claro que su curvatura se anula sobre todos los puntos de la variedad. Como es bien sabido, el escalar de Ricci es el invariante de curvatura más simple de una variedad Riemanniana; éste asigna un número real a cada punto de la variedad, el cual está determinado por la geometría intrínseca de la variedad cerca de ese punto. Dicho de otro modo, éste es un escalar y no puede depender de nuestra selección de coordenadas. De modo que ahora resulta evidente, que para el caso de  $G^I$  y  $G^{II}$  la condición (2.17) resulta inconsistente. Bajo este mismo análisis, generalizamos la métrica sobre la variedad simpléctica. De la misma manera que se hizo anteriormente, haremos uso de las dos ecuaciones para  $h_{11}$  y  $h_{22}$  dadas por (2.49). Tomaremos de nuevo la métrica sobre la variedad simpléctica como,  $\mathcal{G}'' = h_{ab} dE^a dI^b$  donde  $h_{ab}$ , para el caso 2-dim, está dado por (2.49). Se procedió a obtener su escalar de curvatura. En este caso, la expresión es una función larga y complicada que depende de los parámetros a, b, c, d. Nos hacemos ahora la pregunta: ¿Existe una solución a los parámetros a, b, c, d tales que la curvatura de  $\mathcal{G}''$  se anule?, recordemos que anular esta curvatura sería la manera de exigir que exista consistencia en la condición (2.17) (dado que la curvatura de  $\delta_{ab} dX^a dY^b$  es nula ). Se encontraron siete soluciones para los parámetros a, b, c, d donde solo una corresponde a parámetros constantes: la reducción a  $G^{III}$  con  $a \ge d$ constantes arbitrarias, mientras que b = c = 0. Las otras seis soluciones resultan ser funciones de las coordenadas  $\{E^a, I^a\}$ , las cuales descartamos porque alterarían la naturaleza geométricatermodinámica de las métricas  $G^I \ge G^{II}$ .

De lo anterior podemos concluir que nuestro método de difeomorfismos en la variedad de fase a partir de las condiciones (2.16) y (2.17), para el caso de la métrica  $G^{I}$  y  $G^{I}I$  lleva a un sistema de ecuaciones cuyas soluciones o se reducen al caso de la métrica de GIII o cambian la naturaleza invariable de Legendre de las métricas de la GTD. De modo que si insistimos en tratar de proponer un difeomorfismo en la VFT que nos lleve a una métrica Hessiana en la VEE será necesario regresar a un difeomorfismo general, en lugar de recurrir a nuestro caso particular definido por las ecuaciones (2.16) y (2.17).

### 2.4.1. Existencia de potenciales difeomórficos para $G^{I}$ y $G^{II}$

Según los resultados presentados en la última sección, las métricas de la GTD,  $G^{I}$  y  $G^{II}$ , que son invariables con respecto a las transformaciones totales de Legendre, no pueden inducir una métrica de Hessiana en  $\mathcal{E}$ , segun las condiciones (2.16) y (2.17), independientemente del sistema de coordenadas elegido en la VFT. Nuestra pregunta entonces es la siguiente, dada la familia de métricas (1.13),

$$g^{I/II} = \beta_{\Phi} \Phi(\chi_a^b \Phi_{,bc}) dE^a \otimes dE^c \quad con \quad \Phi_{bc} = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial E^b \partial E^c}, \tag{2.51}$$

; existe una transformación de coordenadas  $E^a \to X^a = X^a(E^b)$  tal que la métrica anterior se vuelva una métrica Hessiana, i.e., se tranforme a

$$g^{I/II} = \frac{\partial F^{I/II}}{\partial X^a \partial X^b} dX^a dX^b, \qquad (2.52)$$

donde  $F^{I/II}$  es un potencial termodinámico? Para responder a esta pregunta, es necesario invocar la teoría de las conexiones afines y las conexiones duales en la VEE  $\mathcal{E}$ . Resulta que una respuesta simple es no, porque depende de la dimensión de  $\mathcal{E}$ . Es posible ver esto apartir de los siguientes teoremas [55],

#### (a) **Teorema I:** Todas las métricas analíticas 2-dimensionales son Hessianas.

Si el sistema en consideración se caracteriza por dos grados de libertad termodinámicos (n = 2), y la ecuación fundamental  $\Phi = \Phi(E^1, E^2)$  es una función analítica, la condición del teorema se cumple y, consecuentemente, existe existe un nuevo potencial  $F^{I/II} = F^{I/II}(X^1, X^2)$ , con  $X^1 = X^1(E^1, E^2)$  y  $X^2 = X^2(E^1, E^2)$  en el que la métrica se convierte en Hessiana (2.52).

(b) Teorema II: En 3 dimensiones, todos los posibles tensores de curvatura de Riemann resultan equivalentes a un tensor de curvatura de una métrica Hessiana.

En el caso de un sistema con tres grados de libertad termodinámicos (n = 3), este teorema muestra que la curvatura de la métrica termodinámica correspondiente es equivalente a la curvatura de una métrica Hessiana. Sin embargo, no implica la existencia del potencial Hessiano. En tal caso es necesario considerar la forma explícita de la curvatura Hessiana y utilizar las condiciones de integrabilidad para determinar el potencial Hessiano utilizando.

(c) Teorema 3: En 4 y dimensiones superiores, para que una métrica dada sea hessiana, es necesario que su tensor de curvatura de Riemann satisfaga las condiciones

$$\alpha \left( R_{ija}^{\ \ b} R_{klb}^{\ \ a} \right) = 0, \tag{2.53}$$

$$\alpha \left( R_{iajb} R_k^{\ b}{}_{cd} R_l^{\ dac} - 2R_{iajb} R_{kc}^{\ a}{}_{d} R_l^{\ dbc} \right) = 0, \tag{2.54}$$

donde el operador  $\alpha$  denota antisimetrización en los índices  $i,\,j,\,k$  y l.

Las condiciones anteriores son equivalentes a exigir que las formas de Pontryagin, asociadas con la clase característica de Pontryagin, se anulen en una variedad Hessiana [55]. Esto se debe al hecho de que las variedades Hessianas poseen un conjunto muy particular de conexiones afines que aniquilan la clase característica de Pontryagin. Si el número de grados de libertad termodinámicos del sistema es  $n \ge 4$ , el cumplimiento de las condiciones anteriores puede considerarse como una indicación de la existencia de un potencial Hessiano.

Los teoremas anteriores se pueden usar para encontrar el potencial Hessiano  $F^{I/II}$  para  $g^{I/II}$ . Solo en el caso de n = 2, es posible demostrar la existencia del potencial Hessiano en general. En los casos restantes, deben cumplirse condiciones adicionales que pueden corroborarse solo si la ecuación fundamental  $\Phi = \Phi(E^a)$  se da explícitamente. Esto significa que, en principio, podría haber sistemas con  $n \ge 3$  para los cuales no existe potencial Hessiano. Esto debe probarse para cada sistema por separado. Si, además, el potencial Hessiano se caracteriza por alcanzar un extremo en el equilibrio, puede interpretarse también como un potencial termodinámico y, en consecuencia, las componentes de las métricas de GTD para la VEE pueden interpretarse como el segundo momento de fluctuación del potencial Hessiano.

### Capítulo 3

# Modelo de reparametrizaciones en el espacio fase termodinámico

En esta sección abordaremos la cuestión de una manera distinta. Introduciremos un conjunto de coordenadas en VFT con un significado estadístico claro. A este conjunto de coordenadas la llamaremos reparametrización, por su implicación experimental directa. Esta reparametrización permite la construcción de estructuras Riemmanianas en VFT que, con el mapeo que genera la primera ley de la termodinámica en VEE, ésta induce métricas conformalmente Hessianas en VEE. Proponemos este como el primer paso a una construcción estadística para las métricas de la GTD (1.5-1.3).

Investigaremos las consecuencias de la reparametrización en la descripción geométrica de la termodinámica analizando los efecto en la VFT. Sabemos que la estructura de contacto y Riemanniana en la VFT está relacionada con termodinámica en equilibrio y las fluctuaciones estadísticas en la mecánica estadística de BG [48]. Mrugala et al. [48] sugirieron una forma de combinar la termodinámica geométrica y la mecánica estadística en equilibrio, de modo que la distribución de probabilidad juega un papel relevante. En el trabajo de Mrugala et al. [48]., una ecuación equivalente a la primera ley de la termodinámica se usa como una restricción para colocar estados de equilibrio en una variedad de contacto. La motivación física para este

## CAPÍTULO 3. MODELO DE REPARAMETRIZACIONES EN EL ESPACIO FASE TERMODINÁMICO

análisis yace en la posibilidad de tener, en vez de un control directo de los parámetros intensivos que determinan el estado físico correspondiente del reservorio en el que está contenido nuestro sistema, el control de un conjunto diferenciable de funciones de las variables originales. Así mismo, consideramos un conjunto de funciones diferenciables de las variables extensivas tomando en cuenta la posibilidad de no tener acceso directo a las variables originales. Encontramos que los efectos de la reparametrización en la VFT pueden ser codificados, en términos geométricos, en su estructura de contacto y Riemanniana. En particular, se construye un tensor de rango 2-0 que forma parte de la definición de la métrica en VFT, la cual contiene la información geométrica de las reparametrizaciones. Notamos que aunque estas estructuras geométricas son modificadas por las reparametrizaciones, la estructura Riemanniana en VEE se preserva.

#### 3.1. Reparametrización estadística

En [48], una aproximación estadística a la termodinámica geométrica fue explorada mediante la construcción de una variedad de contacto asociada a una familia de distribuciones exponenciales. Dicho trabajo fue inspirado por la perspectiva de Jaynes [56] sobre su interpretación de la mecánica estadística como una teoría de inferencia máxima de entropía, que establece que la estructura de contacto determina la termodinámica en equilibrio y que la estructura métrica está relacionada con fluctuaciones estadísticas.

Una teoría geométrica de la termodinámica en la VFT, en términos de una estructura Riemanniana, naturalmente conlleva la idea de una descripción invariante bajo reparametrizaciones de las variables intensivas y/o extensivas utilizadas para describir el sistema. De modo que nos interesa analizar cómo se pueden describir tales reparametrizaciones en el VFT desde un punto de vista geométrico. Para este fin, consideramos que las reparametrizaciones están determinadas por un mapeo que son funciones  $C^{\infty}$  de sus parámetros correspondientes. La motivación física para considerar este tipo de situación surge de la posibilidad de que en ocasiones no es posible se puedan controlar las variables intensivas de un sistema termodinámico en contacto con algunos reservorios, o por no tener acceso directo a las variables extensivas por cuestiones de dificultad de medida, pero si funciones generales de las variables originales. En esta sección, comenzamos con una revisión del principio de máxima entropía utilizando el método de multiplicadores de Lagrange (MML) para encontrar la distribución de BG. Luego, introducimos una primera noción de reparametrización para el espacio de equilibrio termodinámico y presentamos algunos resultados en términos de la matriz de Hessiana y la matriz de Fisher[11] que serán útiles en las siguientes secciones. El MML fue utilizado en el trabajo de Mrugala et al. [48], donde se estableció un vínculo entre la mecánica estadística y una descripción geométrica de la termodinámica en términos de una variedad de contacto Riemanniana. La idea subyacente es la interpretación propuesta por Jaynes de ver la mecánica estadística como una teoría de la inferencia de máxima entropía [56]. Desde un punto de vista matemático, esta interpretación hace que la inferencia estadística sea casi indistinguible de la mecánica estadística . Este punto de vista permite intercambiar suposiciones físicas por inferencia estadística en función de la entrada de información menos sesgada. Este enfoque se retomó [48] para establecer un vínculo entre la estadística y las estructuras geométricas de la termodinámica.

Revisaremos brevemente el procedimiento dado por Mrugala et al [48]. Consideremos el espacio fase mecánico  $\Gamma$  junto con el conjunto de *n* funciones  $H_a : \Gamma \to \mathbb{R}$  donde a = 1, ..., n. Dado el conjunto de medias estadísticas { $\langle H_a \rangle$ }, la tarea es encontrar la distribución de probabilidad  $\rho : \Gamma \to \mathbb{R}^+$  la cual maximiza la entropía de Boltzmann

$$S[\rho] = -\int \rho \,\ln\rho \,\mathrm{d}x\,, \qquad (3.1)$$

sujeta al conjunto de n + 1 constricciones,

$$1 = \int \rho \, \mathrm{d}x \,,$$
$$E_a = \langle H_a \rangle = \frac{\int H_a \rho \, \mathrm{d}x}{\int \rho \, \mathrm{d}x} \,, \tag{3.2}$$

donde cada  $E_a$  está asociada a la medía del ensamble estadístico de la función microscópica  $H_a(x)$  y  $x \in \Gamma$ . El MML nos permite maximizar el funcional de entropía (3.1) sujeto al conjunto (3.2) de n + 1 constructiones. Consideremos el siguiente funcional:

$$\mathcal{I}[\rho] = -\int \rho \ln \rho \, \mathrm{d}x - \Phi \left[ \int \rho \, \mathrm{d}x - 1 \right] + I^a \left[ \int H_a \rho \, \mathrm{d}x - E_a \right], \qquad (3.3)$$

donde  $\Phi$  es el multiplicador de Lagrange asociado a la primera constricción, mejor conocida como la condición de normalización, el cual después se identificará como el potencial total de Massieu, y { $I^a$ } es el conjunto de *n* multiplicadores asociados a las otras *n* constricciones las cuales serán usadas eventualmente para parametrizar la VFT.

El resultado de extremizar el funcional (3.3) es la distribución exponencial dada por

$$\rho\left(\Gamma; \Phi, I_1, \dots, I_n\right) = \exp\left(-\Phi + I^a H_a\right), \qquad (3.4)$$

donde la suma sobre a en  $I^a H_a$  está implícita. A lo largo de esta sección adoptaremos la convención de que cualquier conjunto de índices repetidos indican una suma sobre sus valores, a menos que sea dicho lo contrario.

Aplicando el mismo procedimiento usando el conjunto de m funciones  $H_{\mu} : \Gamma \to \mathbb{R}$ , tal que  $\{H_{\mu}\} \subset \{H_{a}\}$  donde m < n, se obtiene una distribución exponencial diferente caracterizada por m parámetros  $\{I^{\tilde{\mu}}\} \ge \tilde{\phi}$ , y donde  $E^{\tilde{\mu}} = \langle H_{\mu} \rangle$  con respecto a

$$\tilde{\rho} = \exp(-\tilde{\Phi} + I_{\tilde{\mu}}H_{\mu}).$$
(3.5)

Las distribuciones  $\rho$  y  $\tilde{\rho}$  son diferentes y por lo tanto también sus medias estadísticas  $E_a$  y  $\tilde{E}^{\mu}$ correspondientes. En el contexto de geometría de la información hay una noción similar donde la estimación estadística está elaborada sobre las subvariedades de las variedades estadísticas que representan una familia de distribuciones de exponenciales curvadas [57].

El parámetro  $\Phi$  puede ser obtenido como una función de los parámetros  $\{I^a\}$  imponiendo la primera condición en ec. (3.2),

$$\Phi(I) = \ln \int \exp(I^a H_a) \, \mathrm{d}x = \ln Z(I) \,, \tag{3.6}$$

donde

$$Z \equiv \int \exp(I^a H_a) \, \mathrm{d}x \tag{3.7}$$

es la función de partición del sistema, la cual es una función de los parámetros  $\{I^a\}$ . Identificamos a los parámetros  $\{I^a\}$  con el conjunto de variables termodinámicas intensivas y  $\Phi(I)$  el potencial total de Massieu; por lo tanto las variables extensivas están dadas por

$$\langle H_a \rangle(I) = E_a(I) = \frac{\partial \Phi}{\partial I^a}.$$
 (3.8)

Entonces, a continuación podemos introducir la primera noción de reparametrización. Considere otro conjunto de parámetros  $\{I^{\tilde{a}}\}$  relacionada, por un mapeo invertible, con la variables intensivas  $\{I^{a}\}$ , de modo que  $\{I^{\tilde{a}}\} = \{I^{\tilde{a}}(I^{a})\}$ , y la matriz de tranformación

$$\Lambda^{\tilde{a}}{}_{a} = \frac{\partial I^{\tilde{a}}}{\partial I^{a}} \tag{3.9}$$

cuyo determinante no se anula. Además , nos limitaremos a un conjunto particular de reparametrizaciones

$$I^{\tilde{a}} = I^{\tilde{a}}(I^{a}) , \qquad (3.10)$$

donde cada nueva variable depende solamente de una de las variables intensivas. Por ejemplo, si identificamos a una de las variables intensivas como la temperatura T, una reparametrización podría estar dada como  $\tilde{T} = \tilde{T}(T)$ , e.g.  $\tilde{T}(T) = T^2$ . Claramente, en este caso la media estadística puede ser expresada (para valores fijos de a) como

$$\langle H_{\tilde{a}} \rangle = E_{\tilde{a}} = \Lambda^a{}_{\tilde{a}} \frac{\partial \Phi}{\partial I^a} \,.$$

$$(3.11)$$

no hay suma explícita y hemos hecho la dependencia de los nuevos parámetros  $\{I^{\tilde{a}}\}$  sobre  $\langle H_a \rangle$  explícito. Observamos que mientras  $\Phi$  y  $\rho$  se comportan como funciones escalares bajo la reparametrización introducida (3.10), los promedios estadísticos se transforman como componentes de una uno-forma, como se puede notar en (3.11); por lo tanto, eliminaremos la notación de tilde

## CAPÍTULO 3. MODELO DE REPARAMETRIZACIONES EN EL ESPACIO FASE TERMODINÁMICO

de  $\rho$  y  $\Phi$ . En las siguientes secciones, analizaremos estas propiedades de transformación desde un punto de vista geométrico e introduciremos otra noción de reparametrización relacionada con  $\{E_a\}$  perteneciente a un espacio de dimensión superior.

Cerramos esta apartado centrando la idea de las reparametrizaciones aquí consideradas desde un punto de vista geométrico, esto con referencia al contenido de las siguientes secciones. Para este fin, considere la VFT de un sistema físico como una variedad diferencial *n*-dimensional  $\mathcal{E}$  parametrizada por un conjunto de variables termodinámicas que pueden ser extensivas o intensivas dependiendo del potencial termodinámico elegido. Para ser precisos, hemos elegido el conjunto de parámetros *n* que sirven como coordenadas para  $\mathcal{E}$ , variables intensivas  $I^a$ . Se observó en [12] en el contexto de la teoría de la información que (3.23) se puede usar para definir una métrica en una variedad estadística. En el contexto de la termodinámica, el Hessiano de la entropía se ha utilizado como componentes para una métrica definida en la VEE,  $\mathcal{E}$  [8, 48]. Las reparametrizaciones aquí introducidas se considerarán, desde un punto de vista geométrico, como un cambio de coordenadas en la variedad termodinámica  $\mathcal{E}$ .

### 3.2. La geometría de las fluctuaciones

En esta sección revisamos el vínculo que existe entre las fluctuaciones de una cantidad llamada entropía microscópica y la geometría de la termodinámica [48]. Simultáneamente, también verificamos que las reparametrizaciones introducidas en la sección anterior realmente se comportan como una transformación de coordenadas en la variedad  $\mathcal{T}$ .

En la sección anterior, se consideró un principio de máxima entropía para encontrar una distribución de probabilidad; en ese caso, la cantidad relevante desde un punto de vista físico y estadístico fue la entropía de Boltzmann dada por la ecuación (3.1). La funcional S puede entenderse como el promedio con respecto a la distribución correspondiente de la entropía microscópica,

$$s = -\ln\rho, \qquad (3.12)$$

lo que implica

$$S = \langle s \rangle = -\int \rho \ln \rho \, \mathrm{d}x \,. \tag{3.13}$$

Si la constricción de normalización no es impuesta en la distribución, la entropía microscópica puede ser considerada como función del conjunto de n + 1 parámetros  $s = s(x; \Phi, I^a)$  sobre  $\Gamma$ , cuya expresión explícita es

$$s = \Phi - I^a H_a(x) \,. \tag{3.14}$$

Podemos ver que la entropía microscópica  $s(x; I^a)$  se comporta como una función escalar con respecto a los parámetros intensivos  $\{I^a\}$ . Por lo tanto, considerando la reparametrización introducida en la sección previa observamos que

$$s = \Phi - I^a H_a(x) \tag{3.15}$$

describe la misma información física microscópica. Si consideramos a s como una función sobre un espacio (n + 1)-dimensional, su diferencial está dado por

$$\mathrm{d}s = \mathrm{d}\Phi - H_a(x) \,\mathrm{d}I^a \,, \tag{3.16}$$

la cual puede ser expresada en términos de las coordenadas  $\{I^{\tilde{a}}\}$  como

$$\mathrm{d}s = \mathrm{d}\Phi - \Lambda^{\tilde{a}}{}_{a}H_{\tilde{a}}\mathrm{d}I^{a}\,.\tag{3.17}$$

Estamos interesados en el promedio y la varianza de la diferencial de la entropía microscópica ds con respecto a  $\rho$ , ya que están relacionados con la estructura de contacto y Riemanniana de la VFT introducidas en la siguiente sección. El valor medio del diferencial de la entropía microscópica considerando la reparametrización es

$$\langle \mathrm{d}s \rangle = \mathrm{d}\Phi - \langle H_{\tilde{a}} \rangle \Lambda^{\tilde{a}}{}_{a} \mathrm{d}I^{a} \,, \tag{3.18}$$

# CAPÍTULO 3. MODELO DE REPARAMETRIZACIONES EN EL ESPACIO FASE TERMODINÁMICO

mientras que su varianza  $\langle (d\tilde{s} - \langle d\tilde{s} \rangle)^2 \rangle$  puede ser usada para definir una métrica g sobre VEE

$$g = \langle (\mathrm{d}s - \langle \mathrm{d}s \rangle)^2 \rangle = \Lambda^{\tilde{a}}{}_a \Lambda^{\tilde{b}}{}_b \langle (H_{\tilde{a}} - \langle H_{\tilde{a}} \rangle)(H_{\tilde{b}} - \langle H_{\tilde{b}} \rangle) \rangle \, \mathrm{d}I^a \otimes \mathrm{d}I^b \,. \tag{3.19}$$

que se puede expresar en términos de las coordenadas  $I^{\tilde{a}}$  como,

$$g = \langle (H_{\tilde{a}} - \langle H_{\tilde{a}} \rangle) (H_{\tilde{b}} - \langle H_{\tilde{b}} \rangle) \rangle \ dI^{\tilde{a}} \otimes dI^{b} \,. \tag{3.20}$$

En términos de las variables intensivas originales, se recuperan los resultados en Ref. [48],

$$\langle \mathrm{d}s \rangle = \mathrm{d}\Phi - \langle H_a \rangle \,\mathrm{d}I^a \,, \tag{3.21}$$

con la varianza y la métrica como

$$g = \langle (\mathrm{d}s - \langle \mathrm{d}s \rangle)^2 \rangle = \langle (H_a - \langle H_a \rangle) (H^b - \langle H^b \rangle) \rangle \, \mathrm{d}I^a \otimes \mathrm{d}I^b \,. \tag{3.22}$$

Reconocemos los componentes en la Ec. (3.22) como la matriz de varianza-covariancia para  $\{H_a\}$ [42], y de (3.19) notamos como se transforma la métrica bajo la reparametrización. Por lo tanto, esta métrica contiene la información sobre las fluctuaciones estadísticas para la distribución de BG. Esta métrica puede ser usada para definir una variedad Riemannian ( $\mathcal{E}, g$ ) donde  $\mathcal{E}$  es la VEE.

Los componentes de la métrica (3.22) también se pueden reconocer como la matriz de información de Fisher en el contexto de la geometría de la información definida como

$$g_{ab} = \left\langle \frac{\partial \ln \rho}{\partial I^{a}} \frac{\partial \ln \rho}{\partial I^{b}} \right\rangle$$
$$= \Lambda^{\tilde{a}}{}_{a}\Lambda^{\tilde{b}}{}_{b} \left\langle \frac{\partial \ln \rho}{\partial I^{\tilde{a}}} \frac{\partial \ln \rho}{\partial I^{\tilde{b}}} \right\rangle$$
$$= \Lambda^{\tilde{a}}{}_{a}\Lambda^{\tilde{b}}{}_{b} g_{\tilde{a}\tilde{b}}, \qquad (3.23)$$

Adicionalmente, se puede mostrar que en este sistema coordenado  $\{I^a\}$ , las componentes de la métrica g pueden ser expresadas en términos del potencial Hessiano  $\Phi$ ,

$$g^{ab}(I) = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial I^a \partial I^b} \,. \tag{3.24}$$

Sin embargo, como queda claro en la última ecuación, esta definición de las componentes de la métrica no es una expresión covariante, ya que se escribe como la segunda derivada parcial de una función escalar; esto también se puede ver en la ecuación (??). Sin embargo, esta es la expresión más común que se encuentra en la literatura de termodinámica geométrica, ya que generalmente el VEE,  $\mathcal{E}$ , está cubierto con una carta.

### 3.3. Estructura Riemanniana en el espacio fase termodinámco

En las secciones anteriores, se demostró que las reparametrizaciones estadísticas de la forma  $I^a \to I^{\tilde{a}}(I)$  pueden considerarse transformaciones de coordenadas en la VEE  $\mathcal{E}$ . En la descripción de este espacio, las variables dependientes  $\phi(I)$  y  $E_a(I)$  también juegan un papel importante. En esta sección, consideramos todo el conjunto { $\phi, E_a, I^a$ } como variables independientes y las usamos como coordenadas para la VFT. También presentamos una segunda noción de reparametrización perteneciente a la VFT y analizaremos sus estructuras de contacto Riemanniana extendiendo la reparametrización introducida previamente en  $\mathcal{E}$  a este espacio. También seleccionamos un campo tensorial que contiene la información sobre estas reparametrizaciones en la VFT.

Así, definimos la VFT como una variedad de contacto (2n + 1)-dimensional  $(\mathcal{T}, \tilde{\eta}, \tilde{G})$  con la uno-forma de contacto  $\tilde{\eta}$  y una estructura Riemanniana a partir de la cual la métrica (3.19) puede ser obtenida como el pulback inducido por el mapeo  $\tilde{\varphi} : \mathcal{E} \to \mathcal{T}$ , donde  $\mathcal{E}$  es la VEE. En este punto, nos gustaría introducir una segunda noción de reparametrización. Recordemos que bajo el cambio de coordenadas  $I^{\tilde{a}} = I^{\tilde{a}}(I^{a})$ , los promedios estadísticos de ensamble  $\langle H_{a} \rangle = E_{a}$ 

### CAPÍTULO 3. MODELO DE REPARAMETRIZACIONES EN EL ESPACIO FASE TERMODINÁMICO

se comportan como componentes de la uno-forma d $\Phi$ . En la VFT, { $\Phi, E_a, I^a$ } son consideradas coordenadas, entonces no hay relación entre los parámetros { $I^a$ } y { $E_a$ }. Una vez determinado un encaje particular, se encuentra la relación entre las variables de estado termodinámicas (3.8), i.e., los parámetros en el VFT adquieren el significado físico como variables termodinámicas intensivas { $I^a$ }, las extensivas { $E_a$ } y el potencial termodinámico  $\Phi(I)$ , donde reconocemos a (3.8) como la ecuación de estado. Por lo tanto, es en la VFT donde podemos introducir la noción de reparametrización para las variables { $E_a$ }. Nos restringiremos a las reparametrizaciones dadas por { $E_{\tilde{a}}$ } = { $E_{\tilde{a}}(E)$ } es decir, cada nueva variable depende solo las variables { $E_a$ }. Además, extenderemos la noción de reparametrización de la subsección anterior, { $I^{\tilde{a}}$ } = { $I^{\tilde{a}}(I)$ } a la VFT, así en este espacio entenderemos como reparametrización al difeomorfismo  $\Psi : \mathcal{T} \to \mathcal{T}$ dado por { $\Phi, E_{\tilde{a}}(E), I^{\tilde{a}}(I)$ }.

Como resultado de la aplicación del difeomorfismo  $\Psi$ , para describir la VFT tenemos dos diferentes conjuntos de coordenados, { $\phi$ ,  $E_a$ ,  $I^a$ } y { $\phi$ ,  $E_{\tilde{a}}$ ,  $I^{tildea}$ }. De acuerdo con el teorema de Darboux, las uno-formas

$$\eta_1 = d\phi - E_a dI^a , \quad \eta_2 = d\phi - E_{\tilde{a}} dI^{\tilde{a}}$$
(3.25)

se pueden usar para introducir una estructura de contacto en  $\mathcal{T}$ . Dado que el difeomorfismo  $\Psi$  no es un contactomorfismo, se sigue que  $\eta_1$  y  $\eta_2$  no son equivalentes. Además, podemos introducir dos campos tensoriales simétricos bilineales diferentes,

$$t_1 = dE_a \otimes dI^a , \quad t_2 = dE_{\tilde{a}} \otimes dI^{\tilde{a}} . \tag{3.26}$$

Las ec. (3.36) no se puede considerar como métricas para  $\mathcal{T}$ , ya que son campos tensoriales simétricos degenerados en el espacio (2n+1) dimensional. Sin embargo, es posible, como se hizo en Ref.[48], remediar esto agregando el producto tensorial de  $\eta_1$  and  $\eta_2$  a  $t_1$  y  $t_2$  respectibamente para obtener

$$G_1 = \eta_1 \otimes \eta_1 + t_1 \quad G_2 = \eta_2 \otimes \eta_2 + t_2 .$$
 (3.27)

Estas métrica puede ser escrita también en términos de las coordenadas locales  $\{\Phi, E_a, I^a\}$  como

$$G_1 = (d\phi - E_a \ dI^a) \otimes (d\phi - E_b dI^b) + dE_a \otimes dI^a \,. \tag{3.28}$$

$$G_2 = \left(d\phi - E_{\tilde{a}}\frac{\partial I^{\tilde{a}}}{\partial I^a}dI^a\right) \otimes \left(d\phi - E_{\tilde{b}}\frac{\partial I^{\tilde{b}}}{\partial I^b}dI^b\right) + \frac{\partial I^{\tilde{a}}}{\partial I^a}\frac{\partial E_{\tilde{a}}}{\partial E_b}dE_b \otimes dI^a.$$
(3.29)

La VEE determinada por el encaje  $\varphi : \mathcal{E} \to \mathcal{T}$  y la condición  $\varphi^*(\eta_1) = 0$ , la cual describe geométricamente la primera ley de la termodinámica y las ecuaciones de estado expresadas por el potencial total de Massieu  $\Phi$ . En términos de las coordenadas { $\phi, E_a, I^a$ }, este encaje produce las ecuaciones

$$d\Phi = E_a dI^a \quad y \quad E_a = \frac{\partial \Phi}{\partial I^a} \,. \tag{3.30}$$

Por otro lado, en las coordenadas locales  $\{\phi, E_{\tilde{a}}, I^{\tilde{a}}\}$ , el encaje que preserva la primera ley de la termodinámica está determinada por la condición  $\tilde{\varphi}^*(\eta_2) = 0$ , es decir

$$d\phi = E_{\tilde{a}}dI^{\tilde{a}} = E_{\tilde{a}}\frac{\partial I^{\tilde{a}}}{\partial I^{a}}dI^{a} , \quad E_{\tilde{a}} = \frac{\partial \phi}{\partial I^{a}}\frac{\partial I^{a}}{\partial I^{\tilde{a}}} .$$

$$(3.31)$$

El pullback  $g = \varphi^*(G_1)$  inducido por  $\varphi$  produce la métrica (3.22) (o en términos del sistema de coordenadas  $\{I^a\}$  como componentes de la métrica Hessiana (3.24)) en  $\mathcal{E}$ , cf. Eq. (16) en la Ref. [?] y la ecuación (25) en la Ref. [58]. A partir del pullback de la métrica (3.29) inducida por el mapeon  $\tilde{\varphi} : \mathcal{E} \to \mathcal{T}$  obtenemos Eq. (3.19) (o Eq. (3.23) en términos del sistema de coordenadas  $\{I^a\}$ ), es decir, la misma métrica  $g_{ab}$  en  $\mathcal{E}$ , escrito en las variables reparametrizadas. De hecho, usando (3.31) obtenemos

$$\begin{split} \tilde{\varphi}^{*}(G_{2}) &= \frac{\partial^{2} \phi}{\partial I^{\tilde{a}} \partial I^{\tilde{b}}} dI^{\tilde{a}} \otimes dI^{\tilde{b}} \\ &= \langle (H_{\tilde{a}} - \langle H_{\tilde{a}} \rangle) (H_{\tilde{b}} - \langle H_{\tilde{b}} \rangle) \rangle dI^{\tilde{a}} \otimes dI^{\tilde{b}} \\ &= \Lambda^{a}{}_{\tilde{a}} \Lambda^{b}{}_{\tilde{b}} \langle (H_{a} - \langle H_{a} \rangle) (H_{b} - \langle H_{b} \rangle) \rangle dI^{\tilde{a}} \otimes dI^{\tilde{b}} \\ &= \langle (H_{a} - \langle H_{a} \rangle) (H_{b} - \langle H_{b} \rangle) \rangle dI^{a} \otimes dI^{b} \\ &= \varphi^{*}(G_{1}), \end{split}$$
(3.32)

donde (3.19) y (3.23) se consideraron para llegar al último resultado. Por lo tanto, hemos obtenido la misma métrica inducida (3.22) para  $\mathcal{E}$  a partir del pullback de una estructura riemanniana diferente en  $\mathcal{T}$ .

Finalmente, consideremos un conjunto particular de reparametrizaciones,  $I^{\tilde{a}}(I) = I^{\tilde{a}}(I^{a})$  y  $E_{\tilde{a}}(E) = E_{\tilde{a}}(E_{a})$ , es decir,  $\frac{\partial I^{\tilde{a}}}{\partial I^{a}} = 0$ , a menos que  $\tilde{a} = a$  y de manera similar para  $E_{\tilde{a}}$ . Por ejemplo, si para las variables intensivas consideramos la temperatura y la presión,  $I^{a} = \{T, p\}$ una reparametrización de este tipo sería  $\{\tilde{T} = f^{1}(T), \tilde{p} = f^{2}(p)\}$  donde  $f^{1}$  y  $f^{2}$  son funciones suaves. En este caso, la métrica en la VFT es

$$\tilde{G} = \left( d\phi - \sum_{a,\tilde{a}} E_{\tilde{a}} \frac{dI^{\tilde{a}}}{dI^{a}} dI^{a} \right) \otimes \left( d\phi - \sum_{b,\tilde{b}} E_{\tilde{b}} \frac{\partial I^{\tilde{b}}}{\partial I^{b}} dI^{b} \right) + \sum_{a,\tilde{a}} \frac{dI^{\tilde{a}}}{dI^{a}} \frac{dE_{\tilde{a}}}{dE_{a}} dE_{a} \otimes dI^{a}, \quad (3.33)$$

donde hemos escrito explícitamente las sumas sobre los índices para evitar cualquier confusión que surja de la notación.

Resumamos los resultados que hemos encontrado en esta sección y destacaremos algunas de sus consecuencias. Comenzamos con la variedad Riemannian ( $\mathcal{E}, g$ ) con la métrica g dada por (3.22). Esta es una variedad encajada en una variedad de dimensión superior que posee una estructura de contacto y una métrica ( $\mathcal{T}, \eta, G$ ). En términos físicos, estos corresponden al VEE y al VFT, respectivamente. En la Ref. [48] se muestra que bajo una transformación total de Legendre, la métrica (3.28) da lugar, después del pullback, a la métrica de Ruppeiner [8] en el espacio de estados de equilibrio  $\mathcal{E}$ .

Hemos visto que bajo la reparametrización  $I^{\tilde{a}} = I^{\tilde{a}}(I)$  podemos describir la variedad  $(\mathcal{E}, g)$ en términos de una VFT diferente  $(\mathcal{T}, \tilde{\eta}, \tilde{G})$ . Identificamos a este como una VFT diferente por que la forma de contacto (??) no está relacionada con (??) via una transformación de contacto. Sin embargo, la descripción termodinámica sobre  $\mathcal{E}$  es la misma, dado que la primera ley (3.30) si se satisface a partir de la condición  $\tilde{\varphi}^*(\tilde{\eta}) = 0$  (3.31) y (??). Además, la métrica en la VEE, la cual está relacionada con las fluctuaciones estadísticas, es obtenida como  $g = \tilde{\varphi}^*(\tilde{G})$ .

Finalmente, se encontró que el pullback de dos diferentes métricas en la VFT puede ser expresado todo en términos de los tensores (3.36) y (??), esto es  $g = \tilde{\varphi}^*(\tilde{t})$  y  $g = \varphi^*(t)$ ,

respectivamente. En Ref.[48] se discute que la estructura de contacto describe la termodinámica en equilibrio, de modo que la estructura métrica describe las fluctuaciones termodinámicas. Como hemos visto, ambas formas de contacto,  $\eta \neq \tilde{\eta}$ , llevan a la primera ley de la termodinámica en  $\mathcal{E}$  y los dos tensores  $t \neq \tilde{t}$  proporciona la misma descripción geométrica de las fluctuaciones termodinámicas en  $\mathcal{E}$  a través de la métrica g. Por lo tanto, a pesar de tener diferentes VFT a través de estas reparametrizaciones particulares de las variables termodinámicas intensivas y extensivas, las estructuras geométricas en la VEE permanecen invariantes. Esto indica que es posible caracterizar geométricamente las reparametrizaciones introducidas aquí en la VFT mediante la modificación correspondiente de las estructuras de contacto y Riemanniana.

### 3.4. Origen estadístico de las metricas invariantes de Legendre

Como se mostró en Ref.[48], la estructura geométrica determinada por la métrica Hessiana (2.52) puede ser entendida como emergente de una aproximación estadística asociada a la familia de distribuciones canónicas de BG,  $\rho$ . En el mismo trabajo, se muestra que las estructuras geométricas en la VFT están relacionadas con las descripciones de equilibrio y fluctuaciones microscópica sobre la VEE, y las consecuencias físicas de la aproximación estadística para la métrica de Ruppeiner [59] son exploradas.

Las métricas invariantes de Legendre han sido introducidas en GTD para tomar en cuenta el hecho que, desde la perspectiva *geométrica*, las propiedades termodinámicas de nuestro sistema físico no dependen de la selección de potencial termodinámico. En esta sección mostraremos que, estas métricas también tienen un origen estadístico el cual puede ser rexpresado en términos de la media y la varianza del diferencial de la entropía microscópica se Boltzmann-Gibbs. Para mostrar eso, usaremos una reparametrización particular de las coordenadas de la VFT correspondiente, como las discutidas en la sección (3).

En la sección anterior (3), describimos las reparametrizaciones de las variables termodinámicas y se propuso una descripción geométrica en el VFT. Se encontró, además, que las reparametrizaciones de las variables termodinámicas pueden ser descritas geométricamente en la VFT a través de un tensor de segundo orden, cuyo pullback a la VEE genera una métrica, la cual en principio está relacionada a las fluctuaciones termodinámicas. En esta sección, basados en los resultados de la sección anterior (3), usaremos el ya mencionado tensor de segundo orden para encontrar una forma general para las métricas invariantes ante transformaciones de Legendre, de esta manera estableciendo un camino al origen estadístico de las métricas (1.5-1.3) en el formalismo de la GTD.

# 3.5. Función de distribucion generalizada y variedad de contacto Riemanniana

Las reparametrizaciones de las variables termodinámicas extensivas e intensivas se pueden describir geométricamente en la VFT [20]. De hecho, están representadas por distintas VFT que tienen diferentes estructuras de contacto y Riemannianas, mientras que dejan invariante la estructura geométrica del espacio de estados de equilibrio. De hecho, como se mencionó anteriormente, la VFT es una variedad de contacto (2n + 1)- dimensional caracterizada por la forma fundamental de Gibbs (1.2). Además, la VEE,  $\mathcal{E}$  está definida por el mapeo suave  $\varphi: \mathcal{E} \to \mathcal{T}$  el cual define las condiciones (1.8).

Es solo en  $\mathcal{E}$  que las variables  $\Phi$ ,  $E_a$  y  $I^a$  adquieren un significado termodinámico, es decir, el potencial termodinámico y las variables extensivas e intensivas, respectivamente. Por lo tanto, las expresiones en (1.8) corresponden a la primera ley y las ecuaciones de estado para un sistema termodinámico descrito por la relación fundamental  $\Phi(I^a)$ , donde  $\Phi$  es el potencial termodinámico. Con respecto a la estructura Riemanniana, se puede definir una métrica para el VFT como (??), que en coordenadas locales  $\eta$  está dado por (1.2) y t es un tensor de segundo orden que toma la forma (??). Así el pullback de G induce una métrica  $g = \varphi^*(G)$  sobre la VEE,  $\mathcal{E}$ , que en coordenadas locales se reduce al Hessiano de  $\Phi$ ,

$$g = \varphi^*(G) = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial I^a \partial I^b} dI^a \otimes dI^b.$$
(3.34)

En [48], se demostró que bajo una transformación total de Legendre, la métrica inducida g en  $\mathcal{E}$  coincide con la métrica de Ruppeiner, es decir, una métrica cuyos componentes pueden expresarse en coordenadas locales como Hessiano negativo de la entropía.

El origen estadístico de la uno-forma de Gibbs y la métrica G está vinculado a la distribución de BG  $\rho = \exp(-\Phi + I^a H_a)$ , donde  $\{H_a\}$  es un conjunto de n funciones estocásticas en el espacio de fase  $\Gamma$ , por ejemplo, el hamiltoniano de un sistema de partículas. En la expresión para la entropía de BG, (3.13), podemos introducir la noción de entropía microscópica, (3.12). Si la condición de normalización no es impuesta, la entropía microscópica se entiende como una función de las variables  $\{\Phi, I^a\}$ . Si, además, consideramos las variables  $\{\Phi, E_a, I^a\}$  como un conjunto de variables independientes para un espacio de dimensión superior, podemos relacionar los objetos geométricos anteriores con las cantidades estadísticas de la siguiente manera. La uno-forma de Gibbs está relacionada con el promedio estadístico del diferencial de la entropía microscópica, (3.21), mientras que la métrica G está relacionada con su varianza (??).

Centraremos nuestra atención en la descripción de reparametrizaciones en  $\mathcal{E}$ , en [20] se demostró que se pueden usar diferentes estructuras geométricas en la VFT para determinar los efectos de tales reparametrizaciones. En particular, se puede elegir una uno-forma de contacto  $\tilde{\eta}$  que no esté relacionada por un contactomorfismo con (??) y se puede definir un nuevo tensor  $\tilde{t}$  (3.36) para tener en cuenta las reparametrizaciones a nivel de la estructura Riemanniana. A pesar de tener una VFT diferente, cuando se realiza el pullback de estas nuevas estructuras a la VEE, la variedad Riemanniana ( $\mathcal{E}, g$ ) se mantiene inalterada.

Si restringimos la reparametrización a la forma  $\tilde{\Phi} = \Phi$ ,  $I^{\tilde{a}} = I^{\tilde{a}}(I^{a})$  y  $E_{\tilde{a}} = E_{\tilde{a}}(E_{a})$ , lo que implica que el Jacobino de la transformación es diagonal, la nueva uno-forma de Gibbs se puede expresar en términos de las variables originales como

$$\tilde{\theta} = \langle \mathrm{d}\tilde{s} \rangle_{\tilde{I}} = \mathrm{d}\Phi - E_{\tilde{a}}(E_a) \frac{dI^{\tilde{a}}}{dI^a} \mathrm{d}I^a \,, \tag{3.35}$$

donde  $\tilde{s} = \Phi - I^{\tilde{a}}H_a$  es la entropía microscópica en términos de las nuevas variables. El tensor  $\tilde{t}$ , que codifica geométricamente la información sobre las fluctuaciones estadísticas y las repara-

## CAPÍTULO 3. MODELO DE REPARAMETRIZACIONES EN EL ESPACIO FASE TERMODINÁMICO

metrizaciones en  $\mathcal{T}$ , se puede expresar en términos de las variables originales como

$$\tilde{t} = \frac{dI^{\tilde{a}}}{dI^{a}} dE_{\tilde{a}} \overset{s}{\otimes} dI^{a} = \frac{dI^{\tilde{a}}}{dI^{a}} \frac{dE_{\tilde{a}}}{dE_{a}} dE_{a} \overset{s}{\otimes} dI^{a}.$$
(3.36)

Por lo tanto, tenemos dos estructuras de contacto diferentes (1.2) y (3.35), así como dos estructuras Riemannianas diferentes (3.27) y (??) en la VFT. La característica importante es que estas diferentes estructuras afectan la descripción geométrica en el espacio de los estados de equilibrio: cuando se proyectan a  $\mathcal{E}$ , dan como resultado la misma subvariedad de Legendre.

En esta sección, nos interesa el papel que el tensor  $\tilde{t}$  podría desempeñar en la descripción geométrica de las fluctuaciones estadísticas. Para este propósito, proponemos dotar a la VFT con una estructura Riemanniana diferente construida como  $(\mathcal{T}, \theta, \mathcal{G})$ , donde la métrica  $\mathcal{G}$  se define como

$$\mathcal{G} = \theta \otimes \theta + \tilde{t} \,, \tag{3.37}$$

que en coordenadas locales  $\{\Phi, E_a, I^a\}$  toma la forma

$$\mathcal{G} = (\mathrm{d}\Phi - E_a \mathrm{d}I^a) \otimes (\mathrm{d}\Phi - E^b \mathrm{d}I_b) + \frac{dI^{\tilde{a}}}{dI^a} \frac{dE_{\tilde{a}}}{dE_a} \mathrm{d}E_a \overset{s}{\otimes} \mathrm{d}I^a \,. \tag{3.38}$$

Esta estructura Riemanniana, cuando se proyecta en el espacio de estados de equilibrio  $\mathfrak{g} = \varphi^*(\mathcal{G})$ , proporcionará a  $\mathcal{E}$  con una estructura Riemanniana diferente, en particular, diferente a la familia de métricas de Hessianas, ampliamente utilizada en la termodinámica geometrica. Vale la pena enfatizar que, dado que estamos usando la uno-forma fundamental de Gibbs (??), la primera ley de la termodinámica se expresará en su forma regular en términos de las variables canónicas  $\{E_a, I^a\}$ , es decir, como lo indica (1.8). Sin embargo, la información sobre las fluctuaciones contenidas en las métricas  $\mathcal{G}$  y  $\mathfrak{g}$  difiere de la información en la estructura Riemanniana original en  $\mathcal{T}$ .

#### 3.6. Métricas invariantes de Legendre

La invariancia de la uno-forma de contacto bajo una transformación de Legendre incorpora el hecho bien conocido de que la información termodinámica de cualquier sistema físico descrita por una relación fundamental se conserva bajo cualquiera de estas transformaciones. En términos geométricos, esto corresponde a la invariancia de la uno-forma de Gibbs en la VFT bajo tal transformación. Dicho de otro modo, la descripción del equilibrio termodinámico es invariante ante transformaciones de Legendre por construcción. Por el contrario, la métrica (??) no es invariante sobre  $\mathcal{T}$ , en el sentido de que no preserva su forma funcional bajo la accion de una transformación de Legendre, una propiedad que es heredada por la métrica Hessiana de  $\Phi$ . Por lo tanto, concluimos que la descripción geométrica de las fluctuaciones en  $\mathcal{E}$  no es invariante ante transformaciones de Legendre. De hecho, sabemos que las métricas Hessianas en la termodinámica geométrica obtenida a partir de potenciales diferentes (relacionados por una transformación de Legendre) describen diferentes comportamientos para los diferentes ensembles [60, 61].

La descripción geométrica de la familia de métricas (3.37) será ahora analizada con respecto a una transformación general de Legendre, para así poder determinar los requerimientos que debe cumplir  $\mathcal{G}$  para permanecer invariante ante tal transformación. Esta familia de métricas tiene un grado de libertad sobre la elección de las funciones { $I^{\tilde{a}} = I^{\tilde{a}}(I^{a}), E_{\tilde{a}} = E_{\tilde{a}}(E_{a})$ } y por el contrario de (??), aquí hay la posibilidad de encontrar una métrica invariante ante transformaciones de Legendre. Podemos decir que esos requerimientos motivan a preguntarnos por una descripción geométrica invariante para las fluctuaciones en términos de estructuras Riemannianas sobre las variedades  $\mathcal{T}$  y  $\mathcal{E}$ 

Una transformación parcial de Legendre  $\{\Phi, E'_i, I'^i\}$  para el conjunto de coordenadas  $\{\Phi, I^a, E_a\}$ está dada por (95). La métrica generalizada  $\mathcal{G}$  se transforma a unas nuevas coordenadas como

$$\mathcal{G} = \Theta \otimes \Theta + \frac{dI_{\tilde{i}}(E'_{i})}{dE'_{i}} \frac{dE^{\tilde{i}}(-I'^{i})}{dI'^{i}} dE'_{i} \overset{s}{\otimes} dI'^{i} + \frac{dI_{\tilde{j}}(I'^{j})}{dI'^{j}} \frac{dE_{\tilde{j}}(E'_{j})}{dE'_{j}} dE'_{j} \overset{s}{\otimes} dI'^{j}, \qquad (3.39)$$

con  $\Theta = d\Phi' - I'^a dE'_a$ . Es fácil mostrar que esta métrica no es invariante bajo una trans-

## CAPÍTULO 3. MODELO DE REPARAMETRIZACIONES EN EL ESPACIO FASE TERMODINÁMICO

formación general de Legendre. El que se satisfaga esta propiedad dependerá de las funciones  $I^{\tilde{a}}(I^a)$  y  $E_{\tilde{a}}(E_a)$ . Para obtener una forma de  $\mathcal{G}$  tal que sea covariante bajo un conjunto completo de transformaciones de Legendre, el conjunto de funciones  $\{I^{\tilde{a}}, E_{\tilde{a}}\}$  deben satisfacer dos condiciones: (i) todas las funciones  $I^{\tilde{a}}$  y  $E_{\tilde{a}}$  tienen que tener la misma forma funcional, y (ii)  $I^{\tilde{a}}$ y  $E_{\tilde{a}}$  tienen que ser funciones pares, i.e.,  $E_{\tilde{a}}(-E_a) = E_{\tilde{a}}(E_a)$  y  $I^{\tilde{a}}(-I^a) = I^{\tilde{a}}(I^a)$ . Una selección particular del conjunto de funciones, que satisfacen ambas condiciones, es

$$I^{\tilde{a}}(I^{a}) = \frac{(I^{a})^{2K+2}}{2K+2}, \quad y \quad E_{\tilde{a}}(E_{a}) = \frac{(E_{a})^{2K+2}}{2K+2},$$
(3.40)

con K un entero. Esta selección para  $I^{\tilde{a}}$  y  $E_{\tilde{a}}$  arrojan la siguiente métrica para la VFT,  $\mathcal{T}$ 

$$\mathcal{G} = \Theta \otimes \Theta + (I^a E_a)^{2K+1} dE_a \overset{s}{\otimes} dI^a \,. \tag{3.41}$$

Esta métrica corresponde a  $G^{III}$  y fue propuesta dentro del formalismo de la GTD; cuya propiedad principal es ser invariante bajo cualquier transformación de Legendre. La métrica inducida correspondiente sobre la VEE,  $\mathcal{E}$ , después de una transformación total de Legendre, es entonces

$$\mathfrak{g} = \varphi^*(\mathcal{G}) = \left(E_a \frac{\partial \Phi}{\partial E_a}\right)^{2K+1} \frac{\partial^2}{\partial E_a \partial E_b} \, \mathrm{d}E_a \otimes \mathrm{d}E_b \,. \tag{3.42}$$

Esta es la misma métrica que la que es inducida via el pullback  $g^{III} = \varphi^*(G^{III})$ , dada por ec. (1.14). Esta provee una noción de distancia entre los estados termodinámicos sobre la subvariedad  $\mathcal{E}$ , la cual es diferente de las métricas Hessianas termodinámicas. Sin embargo, cada componente de la métrica anterior es proporcional a la segunda derivada del potencial termodinámico con respecto a sus correspondientes variables, introduciendo una conexión entre distancia en  $\mathcal{E}$  y fluctuaciones termodinámicas, de la misma manera entre singularidades de curvatura y transiciones de fase; no obstante, estas relaciones entre geometría y termodinámica no está completamente entendidas aún. Sin embargo, hay suficientes evidencias y un gran número de resultados respaldan esto [62, 63, 64, 65].

Para desarrollar una descripción geométrica de la termodinámica de equilibrio, se han apli-

cado dos clases diferentes de métricas Riemannianas, métricas Hessianas y métricas invariantes de Legendre. La primera clase se creó mediante la introducción de métricas en el espacio de equilibrio, cuyos componentes coinciden con la matriz Hessiana de potenciales termodinámicos específicos. En particular, se ha demostrado que la métrica Hessiana, como las derivadas de la entropía (la métrica de Ruppeiner) tiene una interpretación muy interesante en términos de cantidades estadísticas derivadas de la entropía BG.

La clase de métricas invariantes de Legendre se introdujo en el formalismo de GTD con el objetivo de tener en cuenta la propiedad bien conocida de que, en termodinámica en equilibrio, las propiedades físicas de un sistema no dependen del potencial termodinámico utilizado para describir el sistema. Esta clase de métricas se ha introducido utilizando un enfoque puramente geométrico en el que el espacio de la fase termodinámico se define como una variedad de contacto de Riemanniana.

La aproximación presentada aquí puede ser aplicada no solo a métricas invariantes de Legendre, sino también para cualquier métrica sobre la VFT; i.e., cualquier métrica sobre la VFT puede ser obtenida por una reparametrización particular, la cual involucra solo variables extensivas e intensivas, por separado. Sería interesante analizar las propiedades de esta nueva clase de métricas y explorar sus posibles aplicaciones en el contexto de la descripción de la termodinámica geométrica.
### Capítulo 4

# Divergencias conformes como origen estadístico de $G^I$ y $G^{II}$

En las secciones anteriores se mostró como las reparametrizaciones pueden generar estructuras de contacto y Riemannianas en la VFT que caracterizan a la VEE con una estructura métrica asociadas a las fluctuaciones termodinámicas. Por la forma funcional del factor conforme en las métricas (1.13), este tratamiento no es posible para el caso de  $g^I$  y  $g^{II}$ . En esta sección introducirémos un desarrollo basado en herramientas utilizadas en geometría de la información, con el fin de darle un caracter estadistico más fundamental a las métricas (1.13),

$$g^{I/II} = \beta_{\Phi} \Phi(\chi_a^b \Phi_{,bc}) dE^a dE^c \quad con \quad \Phi_{bc} = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial E^b \partial E^c}$$
(4.1)

En geometría de la información, es común introducir el concepto de divergencias para construir una distancia en una variedad estadística, que codifique en qué medida se parecen dos distribuciones caracterizadas por distintos valores de sus parámetros, es decir, qué tan diferente es la información que puede extraerse de ambas distribuciones [66]. Entonces, una divergencia es una distancia suave, potencialmente asimétrica que satisface las siguientes propiedades,

$$D[\theta, \theta^*] \geq 0, \quad \forall \; \theta, \theta^* \in \Theta \text{ donde la igualdad se sostiene si y solo si } \theta = \theta^*$$

$$\frac{\partial D[\theta, \theta^*]}{\partial \theta_i} \Big|_{\theta = \theta^*} = \frac{\partial D[\theta, \theta^*]}{\partial \theta_j} \Big|_{\theta = \theta^*} = 0 \quad \forall \; i, j \in D$$

$$-\frac{\partial^2 D[\theta, \theta^*]}{\partial \theta_i \partial \theta_j} \Big|_{\theta = \theta^*} \geq 0.$$

$$(4.2)$$

La propiedad de codificar una regla de medición para una variedad estadística, permitió promover la divergencia de Bregmann,

$$D[\theta; \theta^*] = \psi(\theta^*) - \psi(\theta) - \nabla \psi(\theta) \cdot (\theta^* - \theta)$$
(4.3)

para distribuciones particulares, como una distancia métrica; donde  $\psi$  es una función suave estrictamente convexa llamada función potencial, con  $\theta \in \Theta$  donde  $\Theta$  es un dominio convexo abierto [66]. En el caso particular donde la función de distribución corresponde a la distribución de BG, la ecuación de arriba es la divergencia de Kullback-Lieber. Por lo tanto, hay una correspondencia entre la divergencia de Kullback-Lieber y una matriz Hessiana de  $\psi$  en el límite para distribuciones infinitamente cercanas.

Si queremos promover una variedad Riemanniana  $(\mathcal{E}, g)$  como una variedad estadística y parametrizar cada punto  $p \in \mathcal{E}$  con una función de distribución  $\rho(\theta)$  podemos definir una divergencia que, en el límite de distribuciones infinitamente cercanas, corresponde a la métrica g. Supongamos que la métrica en  $\mathcal{E}$  es conformalmente Hessiana,

$$g_{ab} = \mathfrak{F}(\theta) \frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta_a \partial \theta_b},\tag{4.4}$$

donde  $\mathfrak{F}(\theta)$  es una función suave en  $\mathcal{E}$ . Por otra parte, podemos definir una divergencia  $\mathfrak{D}[\theta; \theta^*]$ que satisface las propiedades (4.2). Así, si promovemos  $\mathcal{E}$  como una variedad estadística y cada punto está parametrizado por el parámetro  $\theta$  que también parametriza la función de distribución  $\rho(\theta)$ , entonces nuestra divergencia debe contener información de cuan diferente es la data que se puede extraer de dos distribuciones asociadas a dos puntos diferentes,  $\theta$  y  $\theta^*$ . Dicho lo anterior, definimos la divergencia conforme [22] como,

$$\mathfrak{D}[\theta;\theta^*] = \mathfrak{F}(\theta)D[\theta;\theta^*] \tag{4.5}$$

donde si  $\mathfrak{F}(\theta)$  es una función suave y bien comportada, entonces  $\mathfrak{D}[\theta; \theta^*]$  satisface las propiedades de una divergencia (4.2). Si elegimos parametrizar la variedad estadística  $\mathcal{E}$  con la distribución de BG,

$$\rho(x;\theta) = e^{\theta \cdot x - \psi(\theta)},\tag{4.6}$$

podemos reescribir la divergencia de Bregmann (4.3) en (4.5) usando

$$\frac{\partial \psi}{\partial \theta} = \frac{\int x^a \rho(x;\theta) \, dx}{\int \rho(x;\theta) \, dx} \tag{4.7}$$

como la divergencia de the Kullback-Liebler,

$$\mathfrak{D}[\theta;\theta^*] = \mathfrak{F}(\theta) \left( \frac{\int \rho(\theta) \ln \frac{\rho(\theta^*)}{\rho(\theta)} \, dx}{\int \rho(\theta) \, dx} \right)$$
$$= \mathfrak{F}(\theta) D_{KL}[\theta;\theta^*].$$

Está claro que la divergencia de Kullback-Liebler es un caso espacial de la divergencia de Bregmann. Si consideramos que los puntos parametrizados por  $\theta y \theta^*$  están Infinitesimalmente cerca, es decir,  $\theta^* = \theta + d\theta$ , entonces usando una expansión Taylor alrededor de  $d\theta = 0$ ,

$$\mathfrak{D}[\theta;\theta^*] = -\frac{\mathfrak{F}(\theta)}{\int \rho(\theta) dx} \left\{ \int \rho(\theta) \left[ \ln \rho(\theta) - \left( \ln \rho(\theta^*) \right) \right]_{\theta=\theta^*} + \frac{1}{\rho(\theta^*)} \frac{\partial \rho(\theta^*)}{\partial \theta_a} \Big|_{\theta=\theta^*} d\theta_a + \frac{1}{\rho(\theta^*)} \frac{\partial^2 \rho(\theta^*)}{\partial \theta_a \partial \theta_b} \Big|_{\theta=\theta^*} d\theta_a d\theta_b - \frac{1}{(\rho(\theta^*))^2} \frac{\partial \rho(\theta^*)}{\partial \theta_a} \frac{\partial \rho(\theta^*)}{\partial \theta_b} \Big|_{\theta=\theta^*} d\theta_a d\theta_b + \dots \right\} dx \right\}.$$

$$(4.8)$$

Dadas las condiciones de regularidad,

$$\int \frac{\partial \rho}{\partial \theta_a} dx = 0, \qquad (4.9)$$

$$\int \frac{\partial^2 \rho}{\partial \theta_a \partial \theta_b} dx = 0, \qquad (4.10)$$

la primera y la segunda derivada de  $\rho$  con respecto a  $\theta$  son cero. Por lo tanto, para distribuciones infinitamente cercanas, la divergencia de Kullback-Liebler es la matriz de información de Fisher (3.23) [11] para el segundo orden de  $d\theta$ , y la divergencia conforme se convierte en

$$\mathfrak{D}[\theta;\theta^*] = \mathfrak{F}(\theta) \left\langle \frac{\partial \ln \rho(x;\theta)}{\partial \theta_a} \frac{\partial \ln \rho(x;\theta)}{\partial \theta_b} \right\rangle d\theta_a d\theta_b,$$
  
=  $\mathfrak{F}(\theta) g^F$  (4.11)

donde  $\langle \cdot \rangle$  es el valor medio, definido por (4.7). Los resultados de la ecuación (4.8) a (4.11) son generales. En nuestro caso particular, donde elegimos parametrizar cada punto con una distribución exponencial (4.6), la matriz de información de Fisher es equivalente a la matriz de covariancia,

$$\mathfrak{D}[\theta;\theta^*] = \mathfrak{F}(\theta)Cov(x^a, x^b)d\theta_a d\theta_b, \qquad (4.12)$$

donde  $cov(x^a, x^b) = \langle (x^a - \langle x^a \rangle)(x^b - \langle x^b \rangle) \rangle$ . Finalmente, a partir de la condición del valor medio de una variable aleatoria  $x^a$ , (4.7), es sencillo ver que

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta_a \partial \theta_b} = Cov(x^a, x^b). \tag{4.13}$$

Así, para una variedad estadística parametrizada por la función de distribución de BG (4.6), la divergencia conforme se escribe como

$$\mathfrak{D}[\theta;\theta^*] = \mathfrak{F}(\theta) \frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta_a \partial \theta_b} d\theta_a d\theta_b, \tag{4.14}$$

donde podemos identificar la ecuación anterior con la métrica (4.4). Es bien sabido que las métricas Hessianas han sido muy útiles en el estudio de la geometría termodinámica [7, 8]. Sin

embargo, hay sistemas exóticos, como pueden ser los sistemas gravitacionales, que no pueden analizarse con este tipo de métricas termodinámicas. Sin embargo, el formalismo de la GTD se introdujo para incluir este tipo de sistemas termodinámicos (1). En el marco de GTD, las métricas termodinámicas son conformalmente Hessianas del potencial termodinámico. Por lo tanto, la interacción termodinámica que no logra ser detectadas por el término Hessiano se recupera por el factor conforme en el escalar de curvatura.

Entonces, podemos elegir un factor conforme muy particular  $\mathfrak{F}(\theta)$  en (4.4), que codifica la interacción termodinámica, vista a través de las transiciones fases, que las métricas Hessianas no pueden detectar, en el mismo sentido que en GTD. Por lo tanto, elegimos

$$\mathfrak{F}(\theta) = \delta_a^{\ b} \langle x^a \rangle \frac{\partial \psi}{\partial \theta_b}.$$
(4.15)

Así, para una variedad estadística parametrizada por la función de distribución de BG (4.6), la divergencia conforme se escribe como

$$\mathfrak{D}[\theta;\theta^*] = \left(\delta_a^{\ b} \langle x^a \rangle \frac{\partial \psi}{\partial \theta_b}\right) \frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta_c \partial \theta_d} d\theta_c d\theta_d, \tag{4.16}$$

que corresponde a  $g^I$  en el marco de GTD (1.13). De igual manera es posible elegir elegir el factor conforme  $\mathfrak{F}(\theta)$  como

$$\mathfrak{F}(\theta) = \eta_a^{\ b} \langle x^a \rangle \frac{\partial \psi}{\partial \theta_b}.$$
(4.17)

Así, con esta selección partícular la divergencia conforme se puede escribir como

$$\mathfrak{D}[\theta;\theta^*] = \left(\eta_a^{\ b} \langle x^a \rangle \frac{\partial \psi}{\partial \theta_b}\right) \frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta_c \partial \theta_d} d\theta_c d\theta_d, \tag{4.18}$$

que corresponde a  $g^{II}$  en el marco de la GTD (1.13).

Como mostramos, la generalidad de las propiedades (4.2) nos permiten construir de manera arbitraria divergencias conformes. Es claro que si la función  $\mathfrak{F}(\theta)$  es una función bien comportada,  $\mathfrak{D}[\theta, \theta^*]$ , al igual que  $D[\theta, \theta^*]$ , inducen una estructura (de conexión) dual libre de torsión y, en su forma infinitesimal a primer orden, una estructura métrica [10, 67]. Esta libertad nos permitió asociar una propiedad de emergencia a las métricas de la GTD (1.13) relacionada con la definición de una divergencia conforme (4.5). Si promovemos a (1.13) como métricas emergentes de (4.5), resulta natural propugnar a la VEE como una variedad estadística parametrizada punto a punto por una estadística tipo BG (4.6). Este análisis permite establecer una primera aproximación a un origen estadístico, desde la perspectiva de las herramientas de geometría de la información, a las métricas de la GTD.

En términos generales, hemos visto que los factores conformes de las métricas de la GTD dan lugar a proponer una generalización de las divergencias, heredando así el carácter conforme en teoría de la información. Así, es claro que este tipo de divergencias parece indicar la presencia de un nuevo tipo de propiedades geométricas a nivel de las variedades usadas en teoría de la información. Esperamos poder investigar estas nuevas propiedades en futuros trabajos. Hasta el punto de conclusion de esta tesis, el trabajo de una descripción más profunda que la presentada aquí y la construcción de estructuras geométricas, asociadas a las divergencias conformes (4.16) y (4.18) se encuentra en presente desarrollo en el artículo [22].

## Capítulo 5

# Termodinámica geométrica No aditiva

La mecánica estadística se basa en la distribución de BG para microestados, que forma una familia exponencial de distribuciones de probabilidad muy conocidas en el area de la estadística. Importantes cantidades macroscópicas tales como energía, entropía, energía libre, etc. están conectadas con dicha distribución. Sin embargo, estudios recientes muestran que hay sistemas complejos no estándar que están sujetos a la ley de potencias en lugar de la ley exponencial asociadas a las distribuciones de tipo BG [68, 69, 70, 71]. En la presente sección exploraremos la perspectiva geométrica, a nivel de la VFT y la VEE, para la distribución de Tsallis; una estadística introducida para el estudio de sistemas cuya entropía resulta ser no aditiva. Generaremos una métrica alternativa que surge de manera natural generalizando la métrica de Fisher, en el rango de no aditividad dédil. Además utilizaremos dicha estadística para el análisis de gas autogravitante desde la perspéctiva de la mecánica estadística.

### 5.1. La geometría de la estadística de Tsallis

La estadística de Tsallis se introdujo por primera vez en la década de los 90's y finales de los 2000's (ver, por ejemplo, [14, 72, 15, 73]) siguiendo la idea de que para sistemas con interacciones de largo alcance como la gravedad, pero también sistemas complejos con interacciones de corto alcance como sistemas con disipación, se debe utilizar un marco estadístico alternativo a las estadística de BG. En general, la estadística de BG funciona muy bien para sistemas con interacciones de corto alcance, procesos de Markov y sistemas ergódicos, con igual probabilidad de cada microestado en el sistema. Para ciertos sistemas sin embargo, como por ejemplo las fuerzas de largo alcance, la ergodicidad no está garantizada y, estrictamente hablando, la estadística de BG y su forma de contar los microestados considerando la capacidad de control de todos los estados no se aplican.

Tsallis [14] definió la q-entropía para dilucidar varios fenómenos físicos, cuya dinámica induce que estén sujetos a la ley de potencia en lugar de la ley exponencial de las distribuciones de tipo BG. La mecánica estadística generalizada propuesta por Tsallis [14, 72, 15, 73] se introdujo para tener en cuenta los sistemas con comportamiento termodinámico no aditivo. Esta generalización de la estadística de BG usa, entre otras cosas, la noción de entropía modificando la forma de contar los microestados. A partir de la introducción de una regla no aditiva para la entropía a nivel termodinámico,

$$S_q(A+B) = S_q(A) + S_q(B) + (1-q)S_q(A)S_q(B), \qquad (5.1)$$

es posible generalizar la forma de la entropía del sistema cuando este es no aditivo, en términos de la distribución como

$$S_q = -\int_{\Omega} \rho(x;\theta)^q \ln_q \rho(x;\theta) dx, \qquad (5.2)$$

una generalización clara de la entropía de Shannon (3.1). Esto se hace mediante la introducción

de funciones exponenciales y logarítmicas generalizadas

$$\ln_q x = \frac{x^{1-q} - 1}{1-q}, \qquad (5.3)$$

$$\exp_q(x) = \left[1 + (1-q)x\right]^{\frac{1}{1-q}}.$$
 (5.4)

La definición y propiedades que serán de utilidad a lo largo de esta sección se encuentran en el apéndice (C). Así, el concepto de la distribución q-Gibbs o la familia q-exponencial de distribuciones de probabilidad se induce naturalmente desde este marco.

Tal como se hizo en la sección (3.1), es posible aplicar el MML para encontrar a la qdistribución que maximiza la entropía (5.2) bajo constricciones estadísticas particulares. Tsallis [15], propone las siguientes constricciones de normalización y para el valor de expectación de una variable aleatoria  $x^i$ ,

$$\int \rho(x;\theta) \, dx = 1, \tag{5.5}$$

$$\frac{\int x^i \rho(x;\theta)^q \, dx}{h_q(\theta)} = \langle x^i \rangle_q \tag{5.6}$$

donde  $h_q(\theta) = \int \rho(x; \theta)^q dx$  es la distribución llamada escort [15]. Bajo estas constricciones, la distribución que maximiza la q-entropía (5.2) está dada por

$$\rho_T(x;\theta) = \frac{e_q^{\tilde{\theta}_a x^a}}{\mathcal{Z}_q(\omega)},\tag{5.7}$$

donde  $Z_q(\omega_q) = \frac{e_q^{\omega_q}}{q^{1/1-q}}$  y  $\tilde{\theta_a} = \frac{\theta_a}{h_q}$ . Nótese que  $\omega_q$  y  $\theta_a$  corresponden a los multiplicadores de Lagrange canónicos asociados a la constricción de normalización y el valor de expectación, respectivamente, provenientes del MML. Dadas las constricciones (5.5), la función de partición y el q-potencial  $\omega_q$  están dados como

$$\omega_q = \ln_q \left( q^{\frac{1}{1-q}} \mathcal{Z}_q \right) \tag{5.8}$$

$$\mathcal{Z}_q \equiv \int e_q^{\tilde{\theta}_a x^a} dx \tag{5.9}$$

Dado que dichos multiplicadores están asociados a una microentropía (5.2) y constricciones (5.5) diferentes a las de la estadística de BG (3.1)-(3.2) es claro que parecen definiciones análogas a (3.6)-(3.7). Sin embargo, es importante recordar que estas expresiones están dadas en términos de las funciones-q (5.3). Es posible reparametrizar esta distribución (5.7) en una forma aún más familiar a la distribución de BG [74, 75]

$$\rho_A = e_q^{\Theta_a x^a - \psi_q},\tag{5.10}$$

donde  $\Theta_a = \tilde{\theta_a} \mathcal{Z}_q$  y  $\psi_q = \frac{\omega_q + 1}{(e_q^{\omega_q})^{1-q}}$ . Es fácil mostrar que el Jacobiano de transformación para este reparametrización es diferente de cero, de modo que puede ser considerado como un difeomorfismo entre variedades estadísticas. De este modo es claro que esta reparametrización, desde la perspectiva geométrica, contiene la misma información estadística que (5.7). La reparametrización (5.10) fue utilizada por Amari [16] para construir, desde la perspectiva de geometría de la información, una métrica Hessiana en la variedad de estados de equilibrio que estuviera asociada a una estadística no extensiva.

En la siguiente sección construiremos la VFT y la VEE asociadas a la distribución (5.10). Mostraremos que la métrica en la VEE, además de ser Hessiana, corresponde a una métrica conforme a la matriz de información de Fisher [11], al igual que el resultado obtenido por Amari [16].

#### 5.1.1. Variedad de fase y de equilibrio para la estadística de Tsallis

En termodinámica geométrica, al igual que en el formalismo de GTD, es usual definir una variedad de contacto Riemanniana ( $\mathcal{T}, \eta, G$ ) de  $dim(\mathcal{T}) = 2n+1$ , donde  $\eta$  y G son la uno-forma de contacto y la métrica Riemanniana, respectivamente,

$$G = \eta \otimes \eta + d\theta_a \otimes dx^a.$$

A nivel termodinámico, este espacio contiene todos los posibles estados del sistema, incluyendo los fuera del equilibrio. De modo que bajo el encaje, dado por  $\varphi^*(\eta) = 0$ , se define una subvariedad de Legendre  $\mathcal{E}$ , n-dimensional, tal que todos los puntos  $p \in \mathcal{E}$  corresponden a puntos de equilibrio. Esto es debido a que la definición del encaje proyecta sobre  $\mathcal{E}$  la primera ley de la termodinámica, el igual que (1.8). Dicho encaje, a su vez, induce una estructura métrica sobre  $\mathcal{E}$ ,  $g = \varphi^*(G)$  que resulta ser una métrica Hessiana del potencial termodinámico, utilizada por diverzas formulaciones de la termodinámica geométrica [7, 47].

Para establecer la conexión con mecánica estadística, tenemos que hacer uso de herramientas de geometría de la información. Para ello se define una variedad estadística parametrizada por una familia de distribuciones exponenciales tipo BG,

$$\rho = e^{\theta_i x^i - \omega}.\tag{5.11}$$

Sobre dicha variedad la estructura Riemanniana estará definida por la matriz de información de Fisher-Rao,

$$g^{FR} = \frac{\int \rho \,\frac{\partial \ln \rho}{\partial \theta_a} \frac{\partial \ln \rho}{\partial \theta_b} dx}{\int \rho dx} d\theta_a d\theta_b.$$
(5.12)

De modo que si la variedad estadística está paramétrizada por la distribución de BG entonces la métrica de Fisher corresponde a la covariancia de las variables aleatorias. Por otro lado a partir de las condiciones de regularidad (4.9), se obtiene que para la distribución exponencial, la matriz de covariancia corresponde a una matriz Hessiana del multiplicador de Lagrange asociado a la constricción de normalización de  $\rho$ ,  $\omega$ . De este modo, es claro que la variedad estadística  $(\mathcal{M}, g^{FR}, \rho)$  corresponde a la variedad de estados de equilibrio termodinámico. Seguiremos esta idea para la construcción de una variedad de fase termodinámica y una variedad de estados de equilibrio asociadas a la distribución (5.10).

Como la métrica propuesta por Amari [16] en la variedad de estados de equilibrio es Hessiana, proponemos a la estructura Riemanniana

$$G_q = \eta_q \otimes \eta_q + d\Theta_a \otimes dx^a, \tag{5.13}$$

donde

$$\eta_q = d\omega_q - \langle x^a \rangle_q d\Theta_a, \tag{5.14}$$

como la métrica en la VFT, ( $\mathcal{T}_q$ ,  $\eta_q$ ,  $G_q$ ). Así, el encaje  $\varphi^*(\eta_q) = 0$  genera una subvariedad de Legendre  $\mathcal{E}_q$  bajo las condiciones,

$$d\omega_q = \langle x^a \rangle d\Theta_a,$$
  
$$\langle x^a \rangle_q = \frac{\partial \omega_q}{\partial \Theta_a}$$
(5.15)

que se satisfacen en cada punto  $p \in \mathcal{E}_q$ . Algo importante que mencionar es que, desde la perspectiva termodinámica, la ecuación (5.15) corresponde a las variables duales de la variable intensiva  $\Theta_a$ . Mientras que desde la perspectiva de geometría de la información, corresponde a la relación entre el valor de expectación de la variable aleatoria  $x^a$  y el parámetro  $\omega_q$  obtenida a partir de la condición de regularidad (4.9), para la distribución (5.10), dada por (3.2). Así, la métrica inducida,  $g = \varphi^*(G_q)$ , en la subvariedad de Legendre,  $(\mathcal{E}_q, g_q)$ , es

$$g_{q} = \frac{\partial \langle x^{a} \rangle_{q}}{\partial \Theta_{b}} d\Theta_{b} d\Theta_{a},$$
  
$$= \frac{\partial^{2} \omega_{q}}{\partial \Theta_{a} \partial \Theta_{b}} d\Theta_{a} d\Theta_{b}.$$
 (5.16)

Así, para encontrar la relación de esta métrica Hessiana con la matriz de información de Fisher, recurrimos a construir una variedad estadística ( $\mathcal{M}, g^{FR}, \rho_A$ ), donde  $g^{FR}$  y  $\rho_A$  son la métrica de Fisher-Rao (5.12) y la distribución de Tsallis (5.10). De modo que la forma explícita de la matriz de Fisher-Rao, para la distribución (5.10), es

$$g_q^{FR} = \int \rho_A^{2q-1} (x^a - \frac{\partial \omega_q}{\partial \Theta_a}) (x^b - \frac{\partial \omega_q}{\partial \Theta_b}) dx.$$
 (5.17)

Por otro lado, a partir de la segunda condición de regularidad (4.9) para la distribución (5.10), obtenemos la siguiente relación para la matriz Hessiana del q-potencial  $\psi_q$ ,

$$\frac{\partial^2 \omega_q}{\partial \Theta_a \partial \Theta_b} = \frac{q}{h_q(\Theta)} \int \rho_A^{2q-1} (x^a - \frac{\partial \omega_q}{\partial \Theta_a}) (x^b - \frac{\partial \omega_q}{\partial \Theta_b}) dx.$$
(5.18)

Así, es claro que en la estadística de Tsallis, la relación entre la matriz Hessiana del potencial

 $\omega_q$  y la mátriz de información de Fisher es

$$\frac{\partial^2 \omega_q}{\partial \Theta_a \partial \Theta_b} = \frac{q}{h_q(\Theta)} g^{FR} \Big|_{\rho_A}, \tag{5.19}$$

Que resulta ser la misma expresión obtenida por Amari [16]. Notamos que la diferencia entre caso de BG es que hay un factor  $q/h_q$ , el cual se anula cuando  $q \rightarrow 1$ , recuperando la relación

$$\frac{\partial^2 \omega}{\partial \theta_a \partial \theta_b} = g^{FR} \Big|_{\rho}, \tag{5.20}$$

cuando  $q \to 1$  asociada a la distribución de BG (5.11). Así la variedad de fase termodinámica asociada a distribución de Tsallis (5.10) está dada por la terna ( $\mathcal{T}_q$ ,  $\eta_q$ ,  $G_q$ ) donde  $\eta_q$  y  $G_q$  están dadas por (5.14) y (5.13), respectivamente. Mientras que la variedad de estados de equilibrio está dada por el par ( $\mathcal{E}_q$ ,  $g_q$ ) donde  $g_q$  está dada por (5.16) y su relación con la métrica de Fisher para la distribución (5.10), es (5.19).

Hasta aquí, nuestra construcción para las métricas en la VFT y la VEE fue bajo el supuesto que la métrica en VEE es una métrica Hessiana del potencial  $\omega_q$  (5.10). De la definición de la matriz de Fisher (5.12) es claro que parece estar construida bajo el supuesto de un valor de expectación asociado a la distribución de BG (3.2) y la entropía de Shannon (3.1). En general podríamos trabajar de manera un poco más arbitraría pero natural desde la perspectiva de las funciones q (5.3). Dicho de otra forma, propondremos una forma generalizada de la matriz de Fisher para el caso de una distribución tipo Tsallis (5.7), que sea consistente con la entropía de Tsallis (5.2) y el valor de expectación q (5.5). Llamaremos a esta generalización, *Matriz q-Fisher Generalizada*, [23]

$$g_q^{FR} = \frac{1}{h_q(\tilde{\theta})} \int dx \ \rho_T(x;\tilde{\theta})^q \left( \frac{\partial \ln_q \rho_T(x;\tilde{\theta})}{\partial \tilde{\theta}_a} \frac{\partial \ln_q \rho_T(x;\tilde{\theta})}{\partial \tilde{\theta}_b} \right) \ d\tilde{\theta}_a d\tilde{\theta}_b.$$
(5.21)

Para la distribución de Tsallis (5.7), la forma explícita de esta métrica está dada como

$$g_{q}^{FR} = \frac{q^{2}}{h_{q}(\tilde{\theta})} \int dx \left( q^{\frac{1}{1-q}} \frac{e_{q}^{\tilde{\theta}_{a}x^{a}}}{e_{q}^{\omega_{q}}} \right)^{q} \left[ x^{a}x^{b} \left( e_{q}^{\omega_{q}} \right)^{2(q-1)} - \left( x^{a} \frac{\partial\omega_{q}}{\partial\tilde{\theta}_{b}} + x^{b} \frac{\partial\omega_{q}}{\partial\tilde{\theta}_{a}} \right) \left( e_{q}^{\omega_{q}} \right)^{3(q-1)} \left( e_{q}^{\tilde{\theta}_{a}x^{a}} \right)^{1-q} + \frac{\partial\omega_{q}}{\partial\tilde{\theta}_{a}} \frac{\partial\omega_{q}}{\partial\tilde{\theta}_{b}} \left( e_{q}^{\omega_{q}} \right)^{4(q-1)} \left( e_{q}^{\tilde{\theta}_{a}x^{a}} \right)^{2(1-q)} \right] d\tilde{\theta}_{a} d\tilde{\theta}_{b}.$$

Como se muestra, esta métrica tiene una forma complicada y difícil de analizar. Sin embargo, toma una forma más manejable cuando  $q \rightarrow 1$ . Para esto, es necesario tomar en cuenta que para la distribución de Tsallis (5.7), la primera condición de regularidad (4.9)

$$\frac{\partial \omega_q}{\partial \tilde{\theta}_a} = q h_q(\tilde{\theta}) \langle x^a \rangle_q.$$

Para ver el comportamiento de (5.21) en el límite  $q \to 1$  es necesario tener cuidado con todas las funciones que tienen dependencia en q ( $h_q$ ,  $w_q$ ,  $\langle x^a \rangle_q$  y  $e_q^{\tilde{\theta}_a x^a}$ ). Así, la métrica (5.21) en potencias de (1-q) toma la forma [23]

$$g_q^{FR} = \frac{1}{e} \left\{ Cov(x^a, x^b) - (1-q)\mathcal{A}^{ab} + \mathcal{O}((1-q)^2)^{ab} \right\} d\theta_a d\theta_b$$
(5.22)

donde la funcion  $\mathcal{A}$  está dada como

$$\mathcal{A}^{ab} = \langle x^a \rangle \left( 2 \langle x^b(\theta_c x^c) \rangle + \frac{7}{4} \langle x^b(\theta_c x^c)^2 \rangle \right) + \langle x^b \rangle \left( 2 \langle x^a(\theta_c x^c) \rangle + \frac{7}{4} \langle x^a(\theta_c x^c)^2 \rangle \right) \\ + \langle x^a x^b \rangle \left( 2 + 3\omega - \langle \theta_c x^c \rangle - \frac{1}{4} \langle (\theta_c x^c)^2 \rangle \right) + \langle x^a \rangle \langle x^b \rangle \left( 6 + 9\omega - \frac{5}{2} \langle (\theta_c x^c)^2 \rangle - 2 \langle \theta_c x^c \rangle \right) \\ + \frac{1}{4} \langle x^a x^b(\theta_c x^c)^2 \rangle + \langle x^a x^b(\theta_c x^c) \rangle.$$
(5.23)

Notamos que los valores medios están referidos a la distribución tipo BG (5.11) al igual que el potencial termodinámico  $\omega$ . Así, con esto logramos poner todos los momentos y parámetros estadísticos en términos de la distribución de BG (5.11). Notamos tambien que en la métrica (5.22), a orden cero en potencias de (1 - q) se obtiene la matriz de covariancia, que como se mencionó antes corresponde a la métrica de Fisher (5.12); a primer orden en potencias de (1-q) se logro extraer la dependencia en q de  $\mathcal{A}^{ab}$ , de modo que este término corresponde a la perturbación debido a la interacción proveniente de la no extensividad del sistema. Además es importante notar que la métrica (5.22), hasta este punto, es una construcción puramente estadística, i.e., todos los términos que acompañan a potencias de (1-q) dependen de valores de expectación, con respecto a la distribución (5.11), de diversas potencias de las variables aleatorias, también llamados momentos estadísticos.

En general los momentos estadísticos son funciones de los parámetros  $\{\theta\}$  en la variedad estadística. Estas funciones se pueden escribir como derivadas del parámetro asociado a la normalización de la distribución de BG (5.11),  $\omega$ . Usando la condición de normalización (3.2) es posible determinar el parámetro  $\omega$  en función de los otros n parámetros  $\{\theta\}$ , funcionalmente idéntica a la eq. (3.6),

$$\omega(\theta) = \ln \int e^{\theta_a x^a} \, dx.$$

Así, es posible mostrar que la ecuación anterior funciona como función generadora de momentos centrales tipo  $\langle (x^a - \langle x^a \rangle)^k \rangle$ , de acuerdo con la regla:

$$\langle (x^a - \langle x^a \rangle)^k \rangle = \frac{\partial^k \omega}{\partial \theta_a^{\ k}}.$$
 (5.24)

Así con la ecuación (5.24) es posible reescribir la métrica (5.22) en función de derivadas de  $\omega$ De este modo, notamos que la métrica q-Fisher generalizada puede reescribirse como

$$g_q^{FR} = \frac{1}{e} \left[ \frac{\partial^2 \omega}{\partial \theta_a \partial \theta_b} - (1-q)\mathcal{A}^{ab} + \vartheta((1-q)^2)^{ab} \right] d\theta_a d\theta_b$$
(5.25)

 $\operatorname{donde}$ 

$$\mathcal{A}^{ab} = \left\{ \frac{1}{4} \left( \omega,^{abcd} - \omega,^{ab} \omega,^{cd} \right) + \omega,^{a} \omega,^{b} \omega,^{c} \omega,^{d} + 12\omega,^{(a} \omega,^{b} \omega,^{cd)} \right. \\ \left. - 2\omega,^{c} \omega,^{d} \omega,^{ab} - \omega,^{a} \omega,^{b} \omega,^{cd} + \omega,^{(a} \omega,^{bcd)} + \frac{3}{4} \left( \omega,^{a} \omega,^{bcd} + \omega,^{b} \omega,^{acd} \right) \right\} \theta_{c} \theta_{d} \\ \left. + \left( 2\omega,^{a} \omega,^{b} \omega,^{c} + \omega,^{abc} + 9\omega,^{(a} \omega,^{bc)} - 3\omega,^{c} \omega,^{ab} \right) \theta_{c} \right. \\ \left. + \left( 12\omega + 8 \right) \omega,^{a} \omega,^{b} + (3\omega + 2)\omega,^{ab}, \right.$$
(5.26)

y usamos la coma para indicar derivada parcial con respecto a  $\theta$ . Dado que  $A^{ab}$  depende a lo más de de cuartos momentos  $\langle x^a x^b x^c x^d \rangle$ , basta con calcular hasta ese momento, tambien conocido como coeficiente de curtosis. De modo que en (5.25) es ahora una función de derivadas de hasta cuarto orden de  $\omega$ .

Notamos así que la interacción debido a la no aditividad está codificada como una serie de perturbaciones de una métrica Hessiana. Además logramos extraer toda la información proveniente de la distribución de Tsallis (5.7) en forma de factores (1 - q), así los coeficientes de dichas potencias dependen totalmente de los parámetros de la distribución de BG (5.11). Esto nos permite trabajar con parámetros termodinámicos completamente medibles, caso contrario al que pasa cuando trabajamos con las variables físicas de Tsallis ( $\tilde{\theta}_a \ge \omega_q$ ) [76, 77]. En Ref. [78, 79, 80] se encontró que hay dos temperaturas fisicas de Tsallis que pueden describir el mismo estado-q de equilibrio cosa que no es deseable, desde la perspectiva estadistica, para definir un estado de equilibrio. Además se concluye que son las variables canonicas, asociadas a la distribución de BG las que son medibles en el laboratorio. Con esto, la conexión con la termodinámica es directa. Basta con reconocer que  $\omega$  juega el papel de nuestro potencial termodinámico y  $\omega(\theta)$ resulta ser la tranformada total de Legendre de la entropía o conocido como potencial total de Massieu. Dicho lo anterior basta con determinar la ecuación fundamental  $\omega(\theta)$  de nuestro sistema termodinámico para encontrar la forma de la perturbación debida a la no aditividad del sistema.

Por simplicidad estudiaremos los efectos perturbativos correspondientes a la no aditividad del sistema para el gas ideal. En general es bien sabido que desde el marco de la termodinámica geométrica, el gas ideal está representado por una VEE plana, lo que indica una ausencia de interacción termodinámica [81, 28, 62, 82]. Como ilustramos a lo largo de todo el capítulo ??, desde la perspéctiva estadística, esto equivale a un análisis geométrico derivado de una estadística BG. Sin embargo, como mostramos en este capítulo, es posible introducir otra estadística en virtud de la no aditividad de una variable extensiva. Para el caso de la estadística, en términos de las ecuaciones de han hecho con el fin de ilustrar las diferencias explícitas, en términos de las ecuaciones de estado, entre ambas estadísticas para el caso del gas ideal [83, 76, 84]. A continuación construiremos la métrica (5.25) sobre la VEE e ilustraremos de manera explícita las diferencias, en términos de la VEE, entre un análisis estadístico de Tsallis y uno de BG para el gas ideal.

Para el gas ideal, las coordenadas sobre VEE (o los parámetros  $\{\theta\}$ ) estan dados por  $\{\theta_1 = \frac{1}{T}, \ \theta_2 = \frac{P}{T}\}$ , que corresponden a las variables intensivas del sistema. De modo que el potencial total de Massieu está dado por,

$$\Xi = Nk_B \left[ -\ln(\theta_1) - \ln(\theta_2) + \alpha \right]. \tag{5.27}$$

Donde  $\alpha = \ln\left(\left(\frac{4\pi m k_B}{2h^2}\right)^{3/2} \sqrt{\frac{e}{N}} k_B e^{-5/2}\right)$ , *m* es la masa de una partícula de las que compone el ags ideal, *N* es el número de partículas y  $k_B$  es la constante de Boltzmann. Usando este potencial termodinámico, la métrica dada por (5.25) se reescribe como,

$$g_{q}^{FR} = \begin{bmatrix} \frac{3Nk_{B}}{2\theta_{1}^{2}} & 0\\ 0 & \frac{Nk_{B}}{\theta_{2}^{2}} \end{bmatrix} - (1-q) \begin{bmatrix} \frac{Nk_{B}A(3\ln\theta_{1}+2\ln\theta_{2})}{\theta_{1}^{2}} & \frac{N^{2}k_{B}^{2}B(3\ln\theta_{1}+2\ln\theta_{2})}{\theta_{1}\theta_{2}} \\ \frac{N^{2}k_{B}^{2}B(3\ln\theta_{1}+2\ln\theta_{2})}{\theta_{1}\theta_{2}} & \frac{Nk_{B}C(3\ln\theta_{1}+2\ln\theta_{2})}{\theta_{2}^{2}} \end{bmatrix} + \mathcal{O}((1-q)^{2}).$$

donde  $A, B ext{ y } C$  son constantes negativas que dependen de  $\alpha$ . Un análisis de la curvatura muestra que el primer término, asociado a la parte Hessiana, tiene curvatura nula, como era de esperarse, mientras que el segundo término, asociado a la primera perturbación debido a la no aditividad tiene curvatura diferente de cero. De hecho las divergencias presentes en  $R(\mathcal{A}^{ab})$  están dadas  $\operatorname{por}$ 

$$\begin{aligned} \theta_1 &= \mathfrak{a} \ \theta_2^{-2/3}, \\ \theta_1 &= \mathfrak{b} \ \theta_2^{-2/3}, \end{aligned}$$

 $\operatorname{donde}$ 

$$\mathfrak{a} = \exp\left(\frac{125N^3k_B^3 + 960N^2k_B^2\alpha + 250N^2k_B^2 + 96Nk_B\alpha - 575Nk_B + 44}{144Nk_B(10Nk_B + 1)}\right),$$
  
$$\mathfrak{b} = \exp\left(\frac{96Nk_B\alpha + 15Nk_B + 44}{144Nk_B}\right).$$

Lo que indica que la perturbación a primer orden de (1 - q) en (5.25) quita la trivialidad en la VEE del gas ideal. Por otro lado existe una región donde, a primer orden, la interacción termodinámica debido a la no aditividad se anula, i.e.,  $R(\mathcal{A}^{ab}) = 0$ ,

$$\theta_1 = \mathfrak{c} \; \theta_2^{-2/3}$$

 $\operatorname{con}$ 

$$\mathfrak{c} = \exp\left(\frac{125N^3k_B^3 + 1920N^2k_B^2\alpha + 400N^2k_B^2 + 192Nk_B\alpha + 1030Nk_B + 88}{288Nk_B(10Nk_B + 1)}\right).$$

Dicho de otro modo, existe una región en la VEE donde, al menos a primer orden, resulta ser plana, i.e., en esa región no hay interacción termodinámica efectiva como resultado del análisis estadístico no aditivo de Tsallis. Además, podemos notar que, en términos de nuestras variables termodinámicas originales, la naturaleza del escalar de curvatura R en sus regiones asintóticas, tanto para las divergencias como para la región donde se anula, se caracteriza funcionalmente por

$$P \propto T^{5/2}$$

donde la constante de proporcionalidad es  $\mathfrak{a}$  o  $\mathfrak{b}$  si queremos analizar transiciones de fase efectivas debido a la no aditividad y  $\mathfrak{c}$  si queremos analizar la ausencia de interacción termodinámica efectiva.

Para realizar un análisis más detallado de la curvatura de  $g_q^{FR}$ , tomamos un gas ideal de Helio.



Figura 5.1: Escalar de Ricci de  $\mathcal{A}^{ab}d\theta_a d\theta_b$ , para un gas ideal, en función de P para valores de la temperatura  $T_a = 0^{\circ}C$  y  $T_b = 200^{\circ}C$ . Los valores  $a = 2,6 \times 10^{-2}P_a$  y  $b = 0,1P_a$  son los puntos donde R = 0 para  $T_a$  y  $T_b$  respectivamente. Mientras que  $a1 = 4,8 \times 10^{-2}P_a$ ,  $a2 = 1,4 \times 10^{-2}P_a$ ,  $b1 = 0,19P_a$  y  $b2 = 0,58P_a$  son los puntos donde  $R \to \infty$  para  $T_a$  y  $T_b$  respectivamente.

Computamos el comportamiento del escalar de curvatura de  $\mathcal{A}^{ab}d\theta_a d\theta_b$  para  $T = 273^{\circ}K$ y  $T = 473^{\circ}K$ . Notamos que para cada temperatura hay dos divergencias y en un valor entre dichas divergencias se encuentra el punto donde se anula la interacción termodinámica efectiva debido a la no aditividad. Lo anterior muestra claramente que es posible rastrear interacción termodinámica asociada a la no aditividad incluso a primer orden de (1 - q) para el gas ideal, i.e., el tratamiento del gas ideal bajo una estadística no extensiva genera interacciones termodinámicas efectivas, codificadas en curvaturas no triviales de los coeficientes de las potencias de (1 - q) en (5.25).

### Capítulo 6

# Mecánica estadística de un gas autogravitante Newtoniando en el marco de Tsallis

La mecánica estadística para sistemas de muchos cuerpos y la conexión con los principios y nociones de la termodinámica han sido durante mucho tiempo una herramienta poderosa en la física, y se han establecido como un marco muy sólido que se mantiene incluso ante grandes revoluciones teóricas y cambios de paradigma. Sin embargo, los sistemas donde la gravedad es la interacción dominante siempre han planteado un desafío incluso para la termodinámica, especialmente desde la introducción de la relatividad general. En este contexto relativista, hay ejemplos interesantes que muestran la complejidad asociada al estudio de sistemas gravitacionales desde la perspectiva termodinámica, tales como el efecto Tolman-Enhenfest [85, 86, 87]. Consideramos un objeto compacto compuesto por un fluido perfecto descrito por una métrica esférica simétrica. Resulta que, suponiendo una sistema aislado, se puede lograr un estado estacionario. Sin embargo, termodinámicamente esto no corresponde a un estado de temperatura constante, como se esperaría intuitivamente de un estado en equilibrio. En lugar de una

temperatura constante, a lo largo del objeto, se alcanza un *flujo de temperatura* constante, un gradiente invariante de temperatura soportado por las fuerzas gravitacionales dentro del objeto compacto, siendo las partes internas más caliente que las partes exteriores. Esto se conoce como la catástrofe gravotérmica [88, 89, 90], que ocurre en los sistemas con capacidades térmicas negativas, como es el caso de fluidos bajo fuerzas gravitacionales. Este ejemplo muestra que los sistemas gravitacionales son esencialmente diferentes de los que generalmente se manejan en la termodinámica de equilibrio, la razón principal es que los sistemas auto-gravitantes en realidad no están en equilibrio.

El problema de un gas autogravitante clásico ha sido considerado en la literatura, en el marco de la estadísticas de Boltzmann-Gibbs (BG). Refs. [91, 92] presentan una discusión muy detallada sobre el tema y dan una introducción amplia y bien fundada a los problemas que surgen en el análisis de la termodinámica de los sistemas gravitacionales, acercándose al emitir desde varios ángulos e introducir y evaluar varios posibles avances.

Uno de los problemas de la termodinámica de los sistemas gravitacionales está relacionado con el límite termodinámico, es decir,

$$N \to \infty, V \to \infty$$
, and  $N/V = const.$  (6.1)

En este límite, las funciones termodinámicas como la temperatura o la capacidad calorífica no existen debido a divergencias y, por lo tanto, la termodinámica del sistema no se puede calcular. Una forma posible de resolver el problema con el límite termodinámico es modificarlo. En la ref. [93] se presenta un extenso análisis del gas autogravitante en la estadística de BG, y se muestra que las funciones termodinámicas existen en el llamado límite diluido, donde

$$N \to \infty, V \to \infty$$
, and  $N/V^{1/3} = const.$  (6.2)

En este caso, la dimensión lineal  $L = V^{1/3}$  del sistema se escala con N en lugar de su volumen y, por lo tanto, la forma en que N y V se llevan al infinito con respeto uno al otro es modificada en este límite termodinámico. La presencia de interacciones de largo alcance, como la gravitacional, puede hacer que la energía y la entropía de un sistema no sean aditivas, y que posiblemente no sean extensivas. La aditividad implica extensividad, pero no al revés, y estos dos términos deben usarse con cuidado [35]. La estadística de Tsallis emerge como una generalización de la estadística de BG teniendo en cuenta la no aditividad de las propiedades termodinámicas extensivas al introducir un nuevo parámetro q como medida para la no aditividad del sistema, generalizando así la distribución de probabilidad en base a la cual toda la termodinámica se puede derivar. Los estudios han ilustrado las limitaciones de las estadísticas de BG para calcular la información física de ciertos sistemas termodinámicos que no están en equilibrio; por ejemplo la discrepancia del estado de máxima entropía de fluidos con turbulencia [94]. Estos resultados han motivado la introducción de las estadísticas de Tsallis como un marco más general para estudiar sistemas no aditivos.

En esta sección mostraremos los resultados obtenidos en [24], donde seguimos el trabajo de la ref. [93] traducido al marco estadístico de Tsallis, es decir, estableciendo las distribuciones de probabilidad estadísticas y el recuento correspondiente de estados y funciones de partición, de los cuales extraeremos propiedades termodinámicas. Los resultados se analizan en última instancia en un régimen de gravedad débil, con el fin de poder extraer predicciones cualitativas sobre el comportamiento del sistema. Por supuesto, mediante la introducción de tal aproximación, los resultados no se pueden aplicar a entornos de fuerte gravedad como las configuraciones estelares u objetos compactos, pero el caso límite de un gas diluido debería mostrar una firma definitiva de la presencia de fuerzas de largo alcance.

### 6.1. Gas autogravitante

El gas autogravitante es un sistema de N partículas que interactúan entre sí solo a través de la gravedad newtoniana, como se analiza, por ejemplo. en la ref. [93]. Escribimos el potencial como la superposición de la interacción entre pares de partículas. A distancias cortas, se asume una

interacción de partículas repulsivas. El potencial de interacción entre dos partículas individuales en el sistema se propone como

$$-\frac{1}{|\mathbf{q}_{\mathbf{i}} - \mathbf{q}_{\mathbf{j}}|_{A}} = \begin{cases} -\frac{1}{|\mathbf{q}_{\mathbf{i}} - \mathbf{q}_{\mathbf{j}}|}, & |\mathbf{q}_{\mathbf{i}} - \mathbf{q}_{\mathbf{j}}| \ge A, \\ +1/A, & |\mathbf{q}_{\mathbf{i}} - \mathbf{q}_{\mathbf{j}}| \le A, \end{cases}$$
(6.3)

y  $A \ll L$  es una distancia corta repulsiva límite, pequeña en comparación con el tamaño L del sistema. La presencia de la interacción repulsiva de corto alcance introduce un tamaño finito de las partículas, y evita el caso no físico del colapso del sistema en un punto. Se mostró en los trabajos previos [93] que el parámetro A se puede llevar a cero de forma segura en las cantidades que consideramos.

El Hamiltoniano para este sistema consiste en la suma del termino cinético  $\mathfrak{T}$  de todos sus constituyentes y el potencial de interacción  $\mathfrak{U}$ 

$$\mathcal{H} = \mathfrak{T} + \mathfrak{U} = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m} - Gm^2 u\left(|\mathbf{q_i} - \mathbf{q_j}|\right); \tag{6.4}$$

donde G es la constante gravitacional, y m es la masa de una partícula individual. El potencial  $u(|\mathbf{q_i} - \mathbf{q_j}|)$  ha sido definido como

$$u(|\mathbf{q}_{\mathbf{i}} - \mathbf{q}_{\mathbf{j}}|) = \sum_{1 \le i < j \le N} \frac{1}{|\mathbf{q}_{\mathbf{i}} - \mathbf{q}_{\mathbf{j}}|_{A}}.$$
(6.5)

Por simplicidad, asumiremos que el sistema está contenido en una caja cúbica de longitud lateral L, que eventualmente se tomará en el límite  $L \to \infty$ , o  $V \to \infty$ , respectivamente.

La naturaleza de largo alcance de las interacciones gravitacionales conduce a integrales que no pueden resolverse analíticamente, por lo que aplicaremos métodos aproximados para un campo gravitatorio débil, que nos permitirá obtener los resultados para las propiedades termodinámicas como una combinación de la contribución del gas ideal y pequeñas correcciones gravitacionales.

### 6.2. Variables físicas en la estadística de Tsallis

Además de la entropía generalizada y las funciones exponencial y logaritmo q (5.1)-(5.3), también hay que generalizar otras nociones. Dependiendo del ensamble, diferentes cantidades, como la energía interna, la energía libre, la temperatura o la presión, se obtienen de forma análoga a las estadísticas de Boltmann-Gibbs, pero basadas en las estadísticas de Tsallis y sus respectivas funciones de distribución.

Las nociones cambian solo ligeramente para el ensamble de energía constante [76]. La entropía del sistema se calcula a partir de (111). Después de la maximización de la entropía bajo restricciones habituales tales como energía interna constante E, volumen V y número de partículas N, la distribución de equilibrio resulta ser una constante, es decir, una distribución de equiprobabilidad, y así en analogía con el caso BG la entropía es [15]

$$S_q = k_B \ln_q \Omega \,, \tag{6.6}$$

al igual que en el caso de BG,  $\Omega$  corresponde al número de posibles microestados del sistema. A partir de esta entropía, se calculan las ecuaciones de estado termodinámicas y conducen a la temperatura de Tsallis como

$$T_q \equiv \frac{1}{k_B \beta} = \left(\frac{\partial S_q}{\partial E}\right)_{V,N}^{-1}, \qquad (6.7)$$

y la presión

$$P_q = T_q \, \left(\frac{\partial S_q}{\partial V}\right)_{E,N} \,. \tag{6.8}$$

Aquí,  $\beta$  es la temperatura inversa derivada directamente de la temperatura de Tsallis  $T_q$ . Sin embargo, sobre la base de consideraciones de una noción generalizada de equilibrio (térmica y mecánica), derivada de la regla generalizada de adición (112) para la entropía de Tsallis, las cantidades derivadas anteriormente, llamadas cantidades intensivas de Tsallis se han debatido si corresponden o no las verdaderas cantidades intensivas físicas de sistema. En [76, 77], se argumenta que en lugar de las variables intensivas de Tsallis (6.7) y (6.8) anteriores, las definiciones físicas de las variables intensivas deben interpretarse como las verdaderas cantidades intensivas del sistema, es decir,

$$T^* = \left(1 + \frac{1-q}{k_B}S_q\right) \left(\frac{\partial S_q}{\partial E}\right)_{V,N}^{-1} =: \frac{1}{k_B\beta_q},$$
(6.9)

у

$$P^* = \frac{T^*}{1 + [(1-q)/k_B] S_q} \left(\frac{\partial S_q}{\partial V}\right)_{E,N}.$$
(6.10)

Aquí, la temperatura física inversa se define com<br/>o $\beta_q,$ y el factor de proporcionalidad entre<br/>  $\beta$ y  $\beta_q$ se conoce comúnmente com<br/>oc, es decir,

$$c = 1 + \frac{1-q}{k_B} S_q \,, \tag{6.11}$$

у

$$\beta_q = \frac{\beta}{c} \,. \tag{6.12}$$

Calcularemos estas variables como cantidades físicas termodinámicas en lugar de las variables originales de Tsallis.

En contraste con el ensamble de energía constante, donde todo se deriva de la entropía y solo después se introduce una función de partición, en el ensamble de temperatura constante todo se origina en la función de partición  $Z_q$ . Estas funciones de partición se definen en analogía a sus respectivas funciones de partición en la teoría de ensembles de BG, con ligeras modificaciones, y se introducirán en el desarrollo de las secciones 6.3 y 6.4. En el ensamble de temperatura constante, también se hace referencia a variables extensivas como variables extensivas de Tsallis, por ejemplo, la energía libre  $F_q$ . La entropía está relacionada la función de partición a través de

$$S_q = k_B \ln_q Z_q \,, \tag{6.13}$$

y también las variables extensivas de Tsallis tienen definiciones que involucran a sus equivalentes físicos intensivos, tales como la energía libre física [76, 77],

$$F^* = -k_B T^* \ln Z_q \,. \tag{6.14}$$

De esta definición, la presión física se puede derivar en el caso del ensamble a temperatura constante como

$$P^* = -\left(\frac{\partial F^*}{\partial V}\right)_{T^*},\tag{6.15}$$

es decir, la derivada de la energía libre física con respecto al volumen a temperatura física constante.

Además, el límite termodinámico se modifica en la estadística de Tsallis. En la estadística de BG, las cantidades extensivas se escalan con respecto al número total de partículas según (6.1), y las cantidades intensivas no se escalan en absoluto, pero permanecen constantes en todo el sistema para el límite termodinámico  $N, V \to \infty$ . En la estadística de Tsallis, las nociones de variables extensivas e intensivas se generalizan en tres clases: las variables extensivas deben diferenciarse de las cantidades extensivas reales, como la entropía y el volumen, que de hecho se escalan con el número de partículas en el sistema y las pseudo-extensivas , como la energía interna o la energía libre, que se debe escalar con un factor modificado de  $NN^*$  en el límite termodinámico. Aquí,  $N^* \propto N^{1-\alpha/d}$ , con  $\alpha$  el exponente de interacción del potencial (en el caso gravitacional  $\alpha = 1$ ), y d la dimensión espacial del sistema (en este caso d = 3), y la constante de proporcionalidad es una combinación de  $\alpha$  y d. La escala de las variables pseudo-extensivas toma en cuenta el tipo particular de interacción de largo alcance y otras propiedades del sistema. En el caso del gas autogravitante,  $N^* \propto N^{2/3}$ . Las cantidades intensivas deben considerarse pseudo-intensivas y escalar con el factor  $N^*$ . El límite termodinámico en nuestro caso para un sistema grande con  $N \to \infty$  se llevará a cabo para las extensivas como

$$\lim_{N,V\to\infty}\frac{S}{N}, \frac{V}{N} = const, \qquad (6.16)$$

para las pseudo-extensivas como

$$\lim_{N \to \infty} \frac{F^*}{N N^*} = const \,, \tag{6.17}$$

y para las pseudo-intensivas como

$$\lim_{N \to \infty} \frac{T^*}{N^*}, \frac{P^*}{N^*} = const.$$
(6.18)

Existen trabajos previos en el caso de un gas ideal de partículas analizadas a través de la estadística de Tsallis [95, 96]. En el caso del ensamble de temperatura constante del gas ideal, obtenemos una coincidencia entre sus resultados [95] y el nuestro en el límite de gravedad cero. Sin embargo, en el caso del ensamble de energía constante, diferimos de [96] en la metodología. Para lograr resultados convergentes, [96] promovió el parámetro q a una variable termodinámica, escalando como 1/N en el límite termodinámico. No adoptamos por esta idea, pero conservamos q como un parámetro constante no determinado en la teoría, y por lo tanto no reproducimos los resultados de [96] para el ensamble de energía constante en el límite de gravedad cero.

### 6.3. Ensamble de temperatura constante

Primero consideramos el ensamble de temperatura constante en el análisis de Tsallis del gas autogravitante, y comenzaremos con la función de partición. La generalización de la q-estadística consiste en el uso de la q-exponencial del Hamiltoniano (6.4) en la integral sobre el espacio de coordenadas y momentos,

$$Z_q = \frac{1}{N!h^{3N}} \int d^{3N}q \, d^{3N}p \, \exp_q\left(-\beta_q \mathcal{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q})\right),$$

donde  $\beta_q$ , la temperatura física inversa, se usa como el multiplicador de Lagrange asociado con la restricción de energía en la mecánica estadística de Tsallis [76]. Esta cantidad es funcionalmente diferente de  $\beta$ , el multiplicador de Lagrange asociado con la restricción de energía en la mecánica estadística de BG, y se introdujo en (6.12).

La integral se puede evaluar a través de la introducción de la función  $\Gamma$  en el plano complejo [97],

$$\frac{1}{\Gamma(y)} = \frac{i}{2\pi} x^{1-y} \oint_C (-t)^{-y} e^{-tx} dt , \qquad (6.19)$$

para valores de y no enteros, identificando

$$x = 1 - (1 - q)\beta_q \mathcal{H}$$
 y  $y - 1 = \frac{1}{1 - q}$ . (6.20)

Esta sustitución es válida para q < 1, es decir, entropías superaditivas, como es el caso de un gas autogravitante. La integral sobre  $d^{3N}p$  puede calcularse utilizando las coordenadas polares DN-dimensionales, lo cual lleva a

$$Z_q = \frac{\Gamma\left(\frac{2-q}{1-q}\right)}{N! h^{3N}} \left(\frac{2\pi m}{(1-q)\beta_q}\right)^{3N/2} \frac{i}{2\pi} \oint_C dt (-t)^{-\frac{2-q}{1-q}-\frac{3N}{2}} e^{-t} \int d^{3N} q \, e^{t(1-q)\beta_q \mathfrak{U}}, \tag{6.21}$$

donde  $\mathfrak{U}$  se ha definido en (6.4). Para simplificar la integral sobre las coordenadas  $\mathbf{q}_i$ , se vuelven a escalar de manera que los límites de la integración no dependen del tamaño de la caja, es decir,  $\mathbf{q}_i = L\mathbf{r}_i$ . Así, la integral se convierte en

$$d^3 q_i = L^3 d^3 r_i \,. \tag{6.22}$$

Además, introduciremos una nueva variable adimensional  $\eta$ ,

$$\eta = \frac{Gm^2 N\beta_q}{L} \,, \tag{6.23}$$

que se construye para ser una cantidad verdaderamente intensiva que permanece constante en el límite termodinámico de Tsallis como se define en (6.16) - (6.18). Es la misma variable  $\eta$  que se usa en [93], y bajo su límite termodinámico modificado,  $\eta$  también sigue siendo una constante. Usando lo anterior, la función de partición se puede escribir como

$$Z_q = \frac{V^N \Gamma\left(\frac{2-q}{1-q}\right)}{N! \, h^{3N}} \left(\frac{2\pi m}{(1-q)\beta_q}\right)^{3N/2} \frac{i}{2\pi} \oint_C dt (-t)^{-\frac{2-q}{1-q}-\frac{3N}{2}} e^{-t} \int d^{3N} r \, e^{\eta_q u(|\mathbf{r_i}-\mathbf{r_j}|)} \,, \tag{6.24}$$

donde  $u\left(|{\bf r_i}-{\bf r_j}|\right)$  es el potencial de interacción (6.5) como se definió anteriormente, pero en

términos de la nueva variable  $\mathbf{r}$ , y por brevedad hemos introducido

$$\eta_q = \frac{(-t)(1-q)}{N}\eta\,. \tag{6.25}$$

Para poder seguir trabajando esta expresión, en particular para llevar a cabo las integrales sobre las coordenadas, recurriremos a un enfoque de aproximación, considerando el régimen de gravedad débil, es decir, un gas autogravitante diluido, para expandir el potencial de interacción  $u(|\mathbf{r_i} - \mathbf{r_j}|)$  y el término exponencial.

#### 6.3.1. Regimen diluido

El régimen diluido asume un gas en presencia de la acción de potencial gravitacional débil con baja densidad. La cantidad introducida  $\eta$  permanece constante en los límites termodinámicos de Tsallis (6.16) - (6.18), pero se puede suponer que es pequeña en el régimen diluido, es decir,  $\eta \ll 1$ . En ese caso, se puede llevar a cabo una expansión en serie de Taylor del potencial de interacción, hasta el segundo orden,

$$e^{\eta_q u(|\mathbf{r_i}-\mathbf{r_j}|)} \approx 1 + \eta_q u + \frac{1}{2!} \eta_q^2 u^2$$
. (6.26)

Además, al restringir las interacciones del potencial entre partículas de N a una suma de interacciones idénticas de dos cuerpos, el potencial puede escribirse como

$$u(|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|) = \frac{1}{|\mathbf{r}_{1} - \mathbf{r}_{2}|} [(N-1) + (N-2) + \ldots + 1]$$
  
=  $\frac{1}{|\mathbf{r}_{1} - \mathbf{r}_{2}|} \sum_{k=1}^{N} (N-k).$  (6.27)

En el límite $N \to \infty$  esto resulta en

$$u(|\mathbf{r}_{\mathbf{i}} - \mathbf{r}_{\mathbf{j}}|) = \frac{N(N-1)}{2|\mathbf{r}_{\mathbf{1}} - \mathbf{r}_{\mathbf{2}}|}.$$
(6.28)

El término cuadrático en (6.26) se puede simplificar de manera similar, asumiendo que los términos que contribuyen se derivan de la interacción entre dos partículas independientes, de las interacciones entre una partícula por separado con otras dos, o de las interacciones entre dos pares de partículas con cuatro partículas independientes. Por lo tanto, la interacción a segundo orden en (6.26) se puede escribir como [93]

$$u(|\mathbf{r_{i}} - \mathbf{r_{j}}|))^{2} = \frac{N(N-1)}{2|\mathbf{r_{1}} - \mathbf{r_{2}}|^{2}} + \frac{N(N-1)(N-2)}{|\mathbf{r_{1}} - \mathbf{r_{2}}||\mathbf{r_{1}} - \mathbf{r_{3}}|} + \frac{N(N-1)(N-2)(N-3)}{4|\mathbf{r_{1}} - \mathbf{r_{2}}||\mathbf{r_{3}} - \mathbf{r_{4}}|}.$$
(6.29)

introduciendo todo esto en la integral de coordenadas en (6.24), hasta segundo orden obtenemos

$$e^{\eta_q u(|\mathbf{r_i} - \mathbf{r_j}|))} \approx 1 - tN^2 A + t^2 N^2 B,$$
 (6.30)

donde introducimos

$$A = \frac{\eta(1-q)b_0}{2N} \left(1 - \frac{1}{N}\right), \qquad (6.31)$$
$$B = \frac{\eta^2(1-q)^2}{2N^2} \left[\frac{b_0^2}{4} \left(1 - \frac{1}{N}\right) \left(1 - \frac{2}{N}\right) \left(1 - \frac{3}{N}\right) + \frac{b_2}{2N^2} \left(1 - \frac{1}{N}\right) + \frac{b_1}{N} \left(1 - \frac{1}{N}\right) \left(1 - \frac{2}{N}\right)\right], \qquad (6.32)$$

y además se definió las integrales gravitacionales como

$$b_0 = \int_0^1 d^3 r_1 d^3 r_2 \frac{1}{|\mathbf{r_1} - \mathbf{r_2}|}, \qquad (6.33)$$

$$b_0^2 = \int_0^1 d^3 r_1 d^3 r_2 d^3 r_3 d^3 r_4 \frac{1}{|\mathbf{r_1} - \mathbf{r_2}|} \frac{1}{|\mathbf{r_3} - \mathbf{r_4}|}, \qquad (6.34)$$

$$b_1 = \int_0^1 d^3 r_1 d^3 r_2 d^3 r_3 \frac{1}{|\mathbf{r_1} - \mathbf{r_2}|} \frac{1}{|\mathbf{r_1} - \mathbf{r_3}|}, \qquad (6.35)$$

$$b_2 = \int_0^1 d^{3N} r_1 d^{3N} r_2 \frac{1}{\left|\mathbf{r_1} - \mathbf{r_2}\right|^2} \,. \tag{6.36}$$

Estas expresiones corresponden a los coeficientes de una expansión viral en este régimen

de baja densidad, son expresiones simples que pueden computarse numéricamente y dependen de la simetría de la caja que contiene el sistema. Ya no llevan ninguna dependencia de las variables. Para calcular estos coeficientes debe considerarse distancias lo fucientemente cortas de interacciín, referidas al límite introducido en (6.3), además en [93] se ha demostrado que su influencia en los resultados numéricos se puede ignorar.

Con lo anterior, podemos calcular la integral sobre la variable auxiliar t como en [97], lo que lleva a la función de partición en el régimen diluido hasta el segundo orden como

$$Z_q \simeq \left[\frac{2\pi m}{(1-q)\beta_q}\right]^{3N/2} \frac{V^N}{N! h^{3N}} \frac{\Gamma\left(\frac{2-q}{1-q}\right)}{\Gamma\left(\frac{2-q}{1-q}+\frac{3N}{2}\right)} \cdot \left[1 + AN^2 \frac{\Gamma\left(\frac{2-q}{1-q}+\frac{3N}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{1-q}+\frac{3N}{2}\right)} + BN^2 \frac{\Gamma\left(\frac{2-q}{1-q}+\frac{3N}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{q}{1-q}+\frac{3N}{2}\right)}\right]$$
$$= Z_q^{(IG)} \cdot Z_q^{(grav)}. \tag{6.37}$$

Ya aquí podemos ver que en el límite de  $\eta = 0$ , es decir, en ausencia de interacción gravitacional, A = B = 0, la función de partición recupera el resultado del gas ideal en las estadísticas de Tsallis según [95],

$$Z_q^{(IG)} = \left[\frac{2\pi m}{(1-q)\beta_q}\right]^{3N/2} \frac{V^N}{N! h^{3N}} \frac{\Gamma\left(\frac{2-q}{1-q}\right)}{\Gamma\left(\frac{2-q}{1-q} + \frac{3N}{2}\right)}.$$
(6.38)

Hay que tener en cuenta que el resultado no recupera la función de partición del gas ideal en las estadísticas de BG: hay una fracción adicional de dos funciones  $\Gamma$ . El límite  $q \to 1$  de la expresión anterior (6.38) no reproduce directamente el resultado deseado. Por lo tanto, argumentamos que el límite  $q \to 1$  no se puede tomar en ningún punto de estos cálculos, particularmente porque la introducción de las integrales en el plano complejo, de acuerdo con [97], no es aplicable en el caso q = 1. Nuestro resultado para  $Z_q^{(IG)}$  sin embargo coincide con el resultado en [95] para el gas ideal en la estadística de Tsallis.

Estamos interesados en el límite termodinámico  $N, V \rightarrow \infty$  bajo consideración del límite termodinámico de Tsallis (6.16) - (6.18). Como se mencionó anteriormente, la cantidad  $\eta$  se construyó para permanecer constante en este límite. Teniendo en cuenta los argumentos de las

funciones gamma, identificamos

$$\frac{2-q}{1-q} + \frac{3N}{2} = \frac{1}{1-q} + \frac{3N}{2} + 1 = \frac{q}{1-q} + \frac{3N}{2} + 2.$$
 (6.39)

Para  $N \to \infty$ , es justificado usar

$$\frac{3N}{2} \approx \frac{3N}{2} + 1 \approx \frac{3N}{2} + 2, \qquad (6.40)$$

y así podemos simplificar, ignorando términos de orden superior

$$\ln Z_q^{(grav)} \simeq \ln \left[ 1 + AN^2 + BN^2 \right]. \tag{6.41}$$

Para el regimen diluido, podemos aproximar el logarítmo a segundo orden como

$$\ln(1+x) \approx x - \frac{x^2}{2!} \,. \tag{6.42}$$

Con eso, podemos expresar el limite termodinámico de la expresion  $\ln Z_q^{(grav)}/N$  como

$$\lim_{N \to \infty} \frac{1}{N} \ln Z_q^{(grav)} \simeq \frac{\eta (1-q)b_0}{2} + \eta^2 (1-q)^2 \left(\frac{b_1}{2} - \frac{b_0^2}{2}\right)$$
(6.43)

A continuación, calculamos las cantidades termodinámicamente relevantes, como la ecuación de estado y la capacidad de calor en el régimen diluido.

### 6.3.2. Ecuación de estado y capacidad calorífica

En este ensamble, la temperatura física  $T^*$ , o de manera equivalente, la temperatura física inversa  $\beta_q$ , se fija debido a la restricción de energía e ingresa al cálculo como un multiplicador constante de Lagrange. En contraste, la presión física (6.15) se puede calcular a partir de la energía libre física (6.14), por derivación de la función de partición como se obtiene en el régimen

diluido, (6.37). La presión física dividida por la temperatura física esta dada como

$$\frac{P^*}{k_B T^*} = \left(\frac{\partial \ln Z_q}{\partial V}\right)_{T^*},\tag{6.44}$$

es decir, la derivada del logaritmo de la función de partición, comando a  $\beta_q$  como constante. La derivada del termino correspondiente al gas ideal de la función de partición produce

$$\frac{\partial \ln Z_q^{(IG)}}{\partial V} = \frac{N}{V}, \qquad (6.45)$$

recuperando así el análogo de la ecuación de estado del gas ideal en el límite de cero interacciones gravitacionales, es decir, la ecuación de estado del gas ideal en las estadísticas de Tsallis, utilizando las variables Tsallis  $T^*$  y  $P^*$ . La ecuación de estado del gas autogravitante se puede escribir como

$$\frac{P^*V}{Nk_BT^*} = 1 - \frac{\eta}{3N}\frac{\partial}{\partial\eta}\ln Z_q^{(grav)}.$$
(6.46)

Sustituyendo (6.43) en (6.46), intercambiando el límite termodinámico y la derivada con respecto a  $\eta$ , se puede calcular el límite termodinámico de la ecuación de estado. Este límite se puede tomar sin ningún factor adicional de N en el lado izquierdo, ya que los pesos de  $P^*$  y  $T^*$  se cancelan entre sí. Además, la relación V/N ya representa el límite termodinámico correcto. La ecuación de estado hasta el segundo orden da como resultado

$$\frac{P^*V}{Nk_BT^*} \simeq 1 - \frac{\eta(1-q)b_0}{6} - \frac{\eta^2(1-q)^2}{3} \left(b_1 - b_0^2\right) \,. \tag{6.47}$$

Este resultado es el mismo que se obtuvo en [93], considerando las diferencias en la definición de  $b_i$  y el uso de las variables de Tsallis en lugar de las usadas en la estadística de BG. Además, existe una dependencia explícita del parámetro q.

Si bien la ecuación de estado es útil para estudiar las características particulares de cualquier sistema termodinámico, a menudo aparece información relevante cuando se estudian las segundas derivadas de un potencial termodinámico determinado, las llamadas funciones de respuesta. Por lo tanto, también es instructivo considerar la capacidad calorífica específica a un volumen constante, definido en las estadísticas de Tsallis como [76]

$$(c_V)_q = -\frac{T^*}{N} \left(\frac{\partial^2 F^*}{\partial T^*}\right)_V.$$
(6.48)

Usando la definición (6.14) de la energía libre física, y a su vez, el resultado para la función de partición (6.37) combinado con el límite termodinámico de su parte gravitacional de (6.43), La capacidad calorífica específica de segundo orden resulta como

$$\frac{(c_V)_q}{k_B} \simeq \frac{3}{2} + \eta^2 (1-q)^2 \left(b_1 - b_0^2\right) \,. \tag{6.49}$$

En el caso ausencia de potencial gravitacional,  $\eta = 0$ , el resultado del gas ideal en el marco de Tsallis se reproduce, es decir, para el caso de la temperatura de Tsallis constante. La capacidad calorífica específica para el gas ideal es positiva, y las correcciones gravitacionales muestran que sigue siendo positivo también en presencia de fuerzas gravitacionales. Este es cualitativamente el mismo resultado que se obtuvo en [93], donde la capacidad térmica no se calculó explícitamente, pero se demostró que siempre es positiva para este ensamble.

### 6.4. Ensamble de energía constante

Para tener una perspectiva más completa de la dinámica del gas autogravitante en la mecánica estadística de Tsallis, es deseable explorar otros ensembles para comparar las propiedades termodinámicas obtenidas. Al igual que en la estadística de BG, el ensamble de energía constante es el más fundamental, donde se considera que el sistema está cerrado. La entropía del sistema se da como en (6.6), como el logaritmo q del número de microstates accesibles del sistema,

$$S_q = k_B \ln_q \Omega(E, V, N) , \qquad (6.50)$$

para una energía dada E, volumen V y número de partículas N del gas [15]. Estos microestados están restringidos por las constricciones de energía impuestas por el Hamiltoniano (6.4).

Seguimos el procedimiento estándar para obtener los microestados del sistema. En general,
el número de microestados totales para una restricción de energía específica se da como

$$\omega(E) = \int_{\mathcal{H} \le E} d^{3N} q \ d^{3N} p \,. \tag{6.51}$$

Así, la densidad de microestados con energía  ${\cal E}$ está dado por

$$\Omega(E) = \frac{1}{N!h^{3N}} \frac{\partial \omega(E)}{\partial E} \,. \tag{6.52}$$

Usando el Hamiltoniano (6.4), la integral sobre los momentos se puede calcular como

$$\int_{\mathcal{H} \le E} d^{3N} p = \frac{\pi^{3N/2}}{\Gamma\left(\frac{3N}{2} + 1\right)} \left[ 2m(E - \mathcal{U}) \right]^{3N/2}, \tag{6.53}$$

que es el volumen de una hiperesfera 3N-dimensional con radio 2m(E - U), y  $\mathfrak{U}$  se ha definido en (6.4). El número de microestados para la energía E está dado a partir de (6.53) como

$$\Omega = \frac{(2\pi m)^{3N/2}}{N! \, h^{3N} \Gamma\left(\frac{3N}{2} + 1\right)} \int d^{3N} q \, \left[E - \mathcal{U}\right]^{3N/2 - 1}.$$
(6.54)

Para un gas ideal, es decir, un gas sin interacción entre sus partículas, el número de microestados puede ser obtenido de (6.54) asumiendo que  $\mathfrak{U} = 0$  como

$$\Omega^{(IG)} = \frac{(2\pi m)^{3N/2} V^N}{N! h^{3N} \Gamma\left(\frac{3N}{2} + 1\right)} E^{3N/2 - 1} \,. \tag{6.55}$$

Por lo tanto, es útil separar el número de microestados (6.54) en dos contribuciones diferentes,

$$\Omega = \Omega^{(IG)} \cdot \mathcal{Z}^{(grav)}, \qquad (6.56)$$

uno correspondiente a la dinámica del gas ideal asociada al término cinético  $\Omega^{(IG)}$ , y uno debido a las interacciones gravitacionales,  $\mathcal{Z}^{(grav)}$ . Esta última corresponde a la integral de configuración.

una especie de función de partición de energía constante, dada por

$$\mathcal{Z}^{(grav)} = \frac{1}{V^{N} E^{3N/2-1}} \int d^{3N} q \left[ E - \mathcal{U}(|\mathbf{q_i} - \mathbf{q_j}|) \right]^{3N/2-1} \,.$$
(6.57)

Para llevar a cabo la integral sobre las coordenadas  $\mathbf{q}_i$ , introducimos la misma coordenada reescalada  $\mathbf{r}_i$  como en la sección anterior, c.f. (6.22). Además, introduciremos una nueva variable adimensional  $\chi$ ,

$$\chi = \frac{EL}{Gm^2N^2} \,. \tag{6.58}$$

que es una cantidad intensiva construida de tal manera que permanece constante en el límite termodinámico de Tsallis como lo definen las ecuaciones (6.16) - (6.18). Una vez más, es la misma variable que  $\chi$  en la referencia [93], donde era una constante bajo el límite termodinámico definido en dicha referencia. Con estas sustituciones, la integral de configuración puede reescribirse como

$$\mathcal{Z}^{(grav)} = \chi^{1-3N/2} \int_0^1 \cdots \int_0^1 d^{3N} \mathbf{r}_i \left[ \chi + \frac{1}{N^2} u(|\mathbf{q_i} - \mathbf{q_j}|) \right]^{3N/2-1}, \tag{6.59}$$

que conduce a la entropía de Tsallis

$$S_q = k_B \ln_q \left[ \Omega^{(IG)} \cdot \mathcal{Z}^{(grav)} \right] \,. \tag{6.60}$$

Antes de calcular funciones de estado termodinámico como la ecuación de estado y la capacidad calorífica, volveremos a presentar el caso de la acción de un campo gravitacional débil.

#### 6.4.1. Regimen diluido

Como en la sección anterior, ahora definiremos el régimen de gravedad débil, es decir, el caso de bajas densidades, y luego consideraremos el límite termodinámico. Reescribamos  $\mathcal{Z}^{(grav)}$ 

(6.59) en la forma

$$\mathcal{Z}^{(grav)} = (6.61)$$

$$\int_{0}^{1} \cdots \int_{0}^{1} d^{3N} \mathbf{r}_{i} \left[ 1 + \frac{1}{\chi N^{2}} \sum_{1 \le i < j \le N} \frac{1}{|\mathbf{r}_{i} - \mathbf{r}_{j}|} \right]^{3N/2 - 1}.$$

El límite diluido, donde $\chi\gg 1$ , implica <br/>  $1/\chi\ll 1,$ y así, usando una expansión en serie de Taylor hasta segundo orden

$$(1+x)^{\frac{3N}{2}-1} \approx 1 + \left(\frac{3N}{2}-1\right)x + \left(\frac{3N}{2}-1\right)\left(\frac{3N}{2}-2\right)\frac{x^2}{2!}$$

para el argumento

$$x = \frac{1}{\chi N^2} u(|\mathbf{r_i} - \mathbf{r_j}|).$$
(6.62)

Así, hasta segundo orden

$$\left[1 + \frac{u(\cdot)}{\chi N^2}\right]^{3N/2 - 1} \approx 1 + \left(\frac{3N}{2} - 1\right)\frac{u(\cdot)}{\chi N^2} + \frac{1}{2}\left(\frac{3N}{2} - 1\right)\left(\frac{3N}{2} - 2\right)\frac{u(\cdot)^2}{\chi^2 N^4} \tag{6.63}$$

El potencial  $u(\cdot) = u(|\mathbf{r_i} - \mathbf{r_j}|)$ , como se define en (6.5), puede reducirse en este régimen usando los mismos argumentos de simetría presentados anteriormente en (6.27) a través de (6.29), con el fin de obtener la contribución correspondiente a cada término de la expansión hasta segundo orden en el inverso de  $\chi$ . Por lo tanto, los mismos coeficientes  $b_0, b_0^2, b_1 y b_2$  como se definieron anteriormente aparecen en este ensamble. El logaritmo de  $\mathcal{Z}^{(grav)}$  en el límite  $N \to \infty$  hasta segundo orden en  $1/\chi$  se escribe como

$$\lim_{N \to \infty} \frac{1}{N} \ln \mathcal{Z}^{(grav)} \simeq -\frac{9b_0}{2\chi} + \frac{9}{8\chi^2} (b_1 - 42b_0^2) \,. \tag{6.64}$$

Este resultado se puede usar para simplificar el cálculo de las funciones de estado.

#### 6.4.2. Ecuación de estado y capacidad calorífica

Procedemos a calcular las cantidades termodinámicas a partir de la entropía del sistema según las definiciones de cantidades termodinámicas físicas dadas en la introducción [95, 77] - la temperatura (6.9) y la presión (6.10), y así escribir la ecuación de estado. Primero, calcularemos las ecuaciones de estado en una forma abstracta, antes de aplicar en el régimen diluido para obtener expresiones concretas y así comparar los resultados entre los ensembles. Para poder calcular la temperatura física, es necesario escribir la micro entropía de Tsallis en el ensamble microcanónico  $S_q$  (6.60), dada por

$$\left(\frac{\partial S_q}{\partial E}\right)_{V,N} = k_B \left[\Omega^{(IG)} \cdot \mathcal{Z}^{(grav)}\right]^{1-q} \cdot \left[\frac{\partial}{\partial E} \ln \Omega^{(IG)} + \frac{\chi}{E} \frac{\partial}{\partial \chi} \ln \mathcal{Z}^{(grav)}\right].$$
(6.65)

Debido a las propiedades del q-logaritmo C, el prefactor en estas expresiones se puede identificar como

$$\left[\Omega^{(IG)} \cdot \mathcal{Z}^{(grav)}\right]^{1-q} = 1 + \frac{1-q}{k_B} S_q = c, \qquad (6.66)$$

es decir, el prefactor de la derivación se cancela con el prefactor que debe incluirse en las variables físicas termodinámicas (6.9) y (6.10). Sustituyendo la relación (6.65) en (6.9) y simplificando conduce a

$$\frac{1}{k_B T^*} = \left(\frac{3N}{2} - 1\right) \frac{\chi}{E} \left\langle \frac{1}{\chi + u(\cdot)/N^2} \right\rangle, \qquad (6.67)$$

donde

$$\left\langle \frac{1}{\chi + u(\cdot)/N^2} \right\rangle = \frac{\int_0^1 \cdots \int_0^1 d^{3N} \mathbf{r}_i \left[ \chi + u(\cdot)/N^2 \right]^{3N/2 - 2}}{\int_0^1 \cdots \int_0^1 d^{3N} \mathbf{r}_i \left[ \chi + u(\cdot)/N^2 \right]^{3N/2 - 1}}$$
(6.68)

se puede interpretar como una especie de promedio, el cual aún contiene las integrales sobre las coordenadas, las cuales que se calcularán a continuación. Este resultado coincide con el obtenido en [93] para la temperatura en la estadística de BG en el ensamble de energía constante, es decir, parece que las cantidades físicas en la estadística de Tsallis recuperan los resultados obtenidos en la estadística de BG, pero con diferentes límites termodinámicos. Es importante tener en cuenta que la temperatura física, por lo tanto, contiene implícitamente la información introducida por

la distribución de Tsallis, aunque la expresión resultante no parece diferir del caso original en la estadística de BG. Ya aquí podemos ver que en el límite de gravedad cero, el promedio (6.68) se convierte en

$$\left\langle \frac{1}{\chi + u(\cdot)/N^2} \right\rangle^{(IG)} = \frac{1}{\chi}, \qquad (6.69)$$

y así, el análogo del resultado del gas ideal para la temperatura de Tsallis se recupera en (6.67).

El uso del límite termodinámico para la integral de configuración gravitacional (6.64) en (6.65), y el intercambio de la derivada y el límite termodinámico simplifica significativamente las expresiones, y la temperatura se vuelve, hasta segundo orden,

$$\frac{E}{Nk_BT^*} \simeq \frac{3}{2} - \frac{9b_0}{2\chi} - \frac{9}{4\chi^2}(b_1 - 42b_0^2).$$
(6.70)

En el caso de gravedad cero,  $1/\chi = 0$ , se obtiene el resultado para el caso del gas ideal en la estadística de Tsallis. Hay que tener en cuenta que no es idéntico al gas ideal en la estadística de BG, ya que la temperatura es la definida para la estadística de Tsallis y no la temperatura convencional de la estadística de BG.

Para el cálculo de la presión física, tomaremos la derivada de  ${\cal S}_q$  con respecto al volumen

$$\left(\frac{\partial S_q}{\partial V}\right)_{E,N} = k_B \left[\Omega^{(IG)} \cdot \mathcal{Z}^{(grav)}\right]^{1-q} \cdot \left[\frac{\partial}{\partial V} \ln \Omega^{(IG)} + \frac{\chi}{3V} \frac{\partial}{\partial \chi} \ln \mathcal{Z}^{(grav)}\right].$$

Substituyendo esto y usando la expresión de la temperatura física (6.67) en(6.10), obtenemos

$$\frac{P^*}{k_B T^*} = \frac{1}{3V} \left(\frac{3N}{2} + 1\right) + \frac{\chi}{3V} \left(\frac{3N}{2} - 1\right) \left\langle \frac{1}{\chi + u(\cdot)/N^2} \right\rangle \,,$$

que es el resultado de Tsallis correspondiente al obtenido en la estadística de BG [93]. Nuevamente, no es idéntico al resultado de BG, debido al uso de las variables de Tsallis en lugar de las usadas en la estadística de BG. Usando (6.64) en (6.71) y aplicando el mismo procedimiento que en el caso de la temperatura, se obtiene la ecuación de estado, hasta el segundo orden, como

$$\frac{P^*V}{Nk_BT^*} \simeq 1 - \frac{3b_0}{2\chi} - \frac{3}{4\chi^2}(b_1 - 42b_0^2).$$
(6.71)

GEOMETROTERMODINÁMICA ESTADÍSTICA

También para esta ecuación de estado, el análogo de Tsallis del gas ideal se recupera considerando (6.69), o equivalentemente,  $1/\chi = 0$ . Este resultado reproduce de nuevo el resultado de [93], considerando las diferentes definiciones de  $b_i$  y el uso de las variables de Tsallis en lugar de las de BG.

Además, consideraremos la capacidad calorífica específica definida en (6.48) para el ensamble de temperatura constante, derivada de las cantidades *físicas* tal como se propone en [76]. Es importante remarcar que en el ensamble de energía constante  $(c_V)_q$  puede tomar valores positivos y negativos. En [93] se demostró que si las fluctuaciones en el sistema son lo suficientemente grandes, esta función de respuesta se vuelve negativa, lo que implica la existencia de una transición de fase para el gas autogravitante. En el presente caso, la expresión (6.48) se puede reformular en términos más simples como

$$(c_V)_q = \frac{1}{N} \left(\frac{\partial T^*}{\partial E}\right)_{V,N}^{-1}.$$
(6.72)

Es útil, como se hace en [93], definir una nueva función para calcular la capacidad calorífica específica,

$$g(\chi) = \frac{\chi}{N} \frac{\partial}{\partial \chi} \ln \left[ \chi^{3N/2 - 1} \mathcal{Z}^{(grav)} \right]$$

$$= \frac{\chi}{N} \left( \frac{3N}{2} - 1 \right) \left\langle \frac{1}{\chi + u(\cdot)/N^2} \right\rangle.$$
(6.73)

Substituyendo esto en (6.67), la temepratura física puede ser expresada como

$$T^* = \frac{E}{Nk_B g(\chi)},\tag{6.74}$$

y así

$$\frac{\partial T^*}{\partial E} = \frac{1}{Nk_B} \frac{\partial}{\partial E} \left[ \frac{E}{g(\chi)} \right] = \frac{1}{Nk_B} \left[ \frac{1 - \chi g'(\chi)/g(\chi)}{g(\chi)} \right], \tag{6.75}$$

GEOMETROTERMODINÁMICA ESTADÍSTICA

donde  $g'(\chi) = \partial g(\chi) / \partial \chi$ . Por lo tanto, la capacidad calorífica espesífica está dada por

$$(c_V)_q = \frac{k_B g(\chi)}{1 - \chi g'(\chi)/g(\chi)}, \quad \text{or} \quad \frac{1}{(c_V)_q} = \frac{d}{d\chi} \left[\frac{\chi}{g(\chi)}\right].$$
(6.76)

El factor dentro de la derivada en la parte derecha puede ser escrito como

$$\frac{\chi}{g(\chi)} = \frac{2}{(3-2/N)} \frac{\int_0^1 \cdots \int_0^1 d^{3N} \mathbf{r}_i \left[\chi + u(\cdot)/N^2\right]^{3N/2-1}}{\int_0^1 \cdots \int_0^1 d^{3N} \mathbf{r}_i \left[\chi + u(\cdot)/N^2\right]^{3N/2-2}}.$$
(6.77)

Calculando la derivada con respecto a  $\chi$ , e ignorando términos de orden  $\mathcal{O}(1/N)$ , nos lleva a

$$\frac{1}{(c_V)_q} \simeq \frac{2}{3} - \frac{N\left[\left\langle \left[\frac{1}{\chi + u(\cdot)/N^2}\right]^2 \right\rangle - \left\langle \frac{1}{\chi + u(\cdot)/N^2} \right\rangle^2\right]}{\left\langle \frac{1}{\chi + u(\cdot)/N^2} \right\rangle^2}, \qquad (6.78)$$

que es el resultado análogo para las estadísticas de Tsallis tal como se encontró para el ensamble de energía constante en la estadística de BG en [93]. Esta relación se puede poner en términos de la fluctuación para la inversa de la temperatura física (6.67) usando  $\beta_q$ ,

$$\frac{1}{(c_V)_q} = \frac{2}{3} - \left(\frac{\Delta\beta_q}{\beta_q}\right)^2 \,. \tag{6.79}$$

Si las fluctuaciones son grandes, la capacidad calorífica específica en el ensamble microcanónico de la estadística de Tsallis puede volverse negativa, lo que en principio se permite, como en el caso de la estadística de BG. Sin embargo, este cambio de signo en una función de respuesta es también una indicación de que el sistema está pasando por una transición de fase de primer orden [98], como se mostró en [93] también. Además, las transiciones de fase son un fenómeno termodinámico que no depende del ensamble estadístico elegido, por lo que este resultado implica que también en el ensamble canónico debería existir la transición de fase.

Los sistemas termodinámicos que pasan por una transición de fase de primer orden están constituidos por más de una fase física, es decir, muestran una coexistencia de fase, y el límite entre dos fases está formado por una secuencia de estados metaestables, a lo largo de los cuales el sistema tiene que evolucionar. Este resultado se mantiene en general, es decir, no solo para la gravedad débil, ya que se obtuvo de las expresiones exactas antes de aplicar el régimen diluido.

Una expresión explícita para la capacidad calorífica específica  $c_{qV}$  se puede encontrar en (6.76). Para calcular la función  $g(\chi)$  de (6.73), usamos el límite termodinámico en el régimen diluido de  $\mathcal{Z}^{(grav)}$  dado de (6.64), a segundo orden

$$\lim_{N \to \infty} g(\chi) \simeq \frac{3}{2} + \frac{9b_0}{2\chi} - \frac{9}{4\chi^2} (b_1 - 42b_0^2) \,. \tag{6.80}$$

El calor específico se obtiene de (6.76) por derivación con respecto a  $\chi$ , lo que resulta en

$$\frac{(c_V)_q}{k_B} = \frac{3}{2} \frac{\left[1 + 6b_0\chi^{-1} - 3/2\chi^{-2}(b_1 - 48b_0^2)\right]}{\left[1 + 6b_0\chi^{-1} - 9/2\chi^{-2}(b_1 - 42b_0^2))\right]}.$$
(6.81)

También aquí vemos que en el límite de gravedad cero, es decir,  $1/\chi = 0$ , el calor específico también recupera el análogo del caso del gas ideal en la estadística de Tsallis. A partir de este resultado, parece que la capacidad calorífica aquí no se vuelve negativa para ningún valor de  $\chi$ . Sin embargo, esta expresión solo se mantiene en el régimen gravitacional débil, y por lo tanto no puede capturar los efectos que ocurren en presencia de fuerzas gravitacionales fuertes, donde las fluctuaciones pueden ser grandes, como lo indica (6.79).

Por lo tanto, llegamos a la misma conclusión que la ref. [93] - de (6.79) sabemos que son posibles grandes fluctuaciones en el régimen de campo fuerte, y que el calor específico podría volverse negativo allí; pero el resultado de una capacidad calorífica positiva para el límite de campo débil es confiable dentro de su rango de aplicabilidad. En general, sin embargo, la capacidad calorífica en principio puede volverse negativa y, por lo tanto, el sistema podría sufrir una transición de fase en algún momento.

#### 6.5. Discusión

Teniendo en cuenta los resultados pertinentes de la ecuación de estado en nuestros cálculos con la estadística de Tsallis, resulta que existe una cierta equivalencia, hasta un factor de (1 - q), entre los ensembles de energía constante y temperatura constante. En [93], se mostró una equivalencia entre las dos variables  $\chi y \eta$  de los dos ensembles, y argumentamos que nuestros resultados son iguales a los de [93], al menos en su dependencia de  $\chi y \eta$ . Por lo tanto, alcanzamos la equivalencia para la ecuación de estado entre los dos ensembles, hasta el factor adicional (1-q)que está presente en el resultado para el ensamble de temperatura constante. Sin embargo, la presencia de este factor parece ser un defecto de la teoría en sí misma: ambos ensembles producen resultados que son inherentes de la teoría de Tsallis, mediante el uso de *las variables intensivas de Tsallis* en lugar de las correspondientes a la estadística de BG convencionales, pero solo en el ensamble de temperatura constante hay una presencia explícita del parámetro Tsallis.

Sospechamos que una dependencia tan explícita también debería ocurrir en el ensamble de energía constante, y que, por lo tanto, este ensamble debería ser reevaluado. Por ejemplo, la entropía en ese caso se formula únicamente en términos de variables de Tsallis, pero se utiliza una energía convencional E para calcular la suma sobre los posibles microestados.

Desafortunadamente, el ensamble de energía constante es una herramienta rara vez utilizada y algo descuidada para describir sistemas termodinámicos, y más aún en el caso de la estadística de Tsallis. Hay muy pocos ejemplos de la aplicación de la estadística de Tsallis para ensamble de energía constante en la literatura, y por lo tanto, rara vez se ha puesto a prueba en sistemas físicos conocidos. Atribuimos el fallo en el logro de la equivalencia de los ensembles a la no equivalencia integrada en los ensembles en la estadística de Tsallis, y sospechamos que quizás al hacer coincidir todas las variables entre los ensembles, y al ponerlos en la misma base, la equivalencia de ensembles podría ser alcanzada.

Por otro lado está la capacidad calorífica. Reproducimos los resultados de [93] en ambos ensembles, ambos ensembles resultaron no equivalentes hasta un factor de (1 - q) en el caso de temperatura constante, esta equivalencia esta ausente no solo para la dependencia explícita de q, sino también de manera cualitativa. La capacidad calorífica permanece estrictamente positiva en el ensamble de temperatura constante, pero puede volverse negativa para el ensamble de energía constante. Esta diferencia fundamental también se ha obtenido en [93], aun cuando el resultado explícito para dicho cálculo no se haya realizado explícitamente aquí. Esto significa que, al igual que en un análisis de BG, también nuestro resultado produce una no equivalencia entre ensembles, en contraste con la esperanza de que el uso de un marco estadístico alternativo con la no aditividad como una característica explícita pueda haber resuelto este problema.

Otra cuestión es el límite de gravedad cero, es decir, el caso del gas ideal. Hemos obtenido el análogo correcto de la contribución del gas ideal en todas las ecuaciones de estado y funciones de respuesta calculadas para el caso en que la interacción gravitacional se apaga, porque en todas las expresiones las variables son las variables de Tsallis, pero en la forma funcional obedecen las mismas leyes que en el caso de BG del gas ideal. En el ensamble de energía constante, el caso de gravedad cero corresponde a  $1/\chi = 0$ , y todos los resultados para un gas ideal se recuperan de manera análoga para este caso. En el ensamble de temperatura constante, la gravedad cero es matemáticamente equivalente al caso  $\eta = 0$ , por lo que se eliminan todos los términos que contienen  $\eta$ , lo que elimina de forma incidental la mayor parte de la dependencia explícita de q en las funciones termodinámicas, lo que aparentemente da como resultado los resultados exactos del gas ideal en la estadística de BG. Sin embargo, se retiene la dependencia de q, es decir, en las variables intensivas de Tsallis, que se utilizan en lugar de las variables intensivas de la estadística de BG y no exactamente el mismo resultado en esta estadística.

Algo similar ocurre con el calor específico en el ensamble de temperatura constante. El caso de gravedad cero, es decir,  $\eta = 0$ , es matemáticamente equivalente al caso  $q \rightarrow 1$ , pero el resultado en el caso de gravedad cero no es equivalente al gas ideal en la estadística de BG. La diferencia radica en la definición de la temperatura utilizada: nuestro resultado para el calor específico es válido para un ensamble de temperatura constante de Tsallis  $T^*$ , mientras que la

estadística de BG utiliza la noción convencional de temperatura.

En general, es matemáticamente incorrecto tomar el límite  $q \rightarrow 1$  en los resultados de las funciones termodinámicas. El cálculo de las expresiones finales requiere el método de integración descrito por [97], que es válido solo en la región 0 < q < 1, sin incluir el caso q = 1. Por lo tanto, técnicamente no se permite tomar el límite  $q \rightarrow 1$  en los resultados obtenidos después de las transformaciones de las integrales de [97], ya que estos dos pasos algebráicos no conmutan.

En esta sección, hemos presentado ecuaciones de estado termodinámicas para el gas autogravitante Newtoniano considerando la mecánica estadística generalizada de Tsallis en un régimen de baja densidad. La estadística de Tsallis se construye, como se mencionó en la introducción, para resolver algunos de los problemas que ocurren en el tratamiento de sistemas con interacciones de largo alcance, no solo acción gravitacional, sino también en algunos plasmas, sistemas hidrodinámicos bidimensionales o sistemas dipolares, en el contexto del marco estadístico de BG [99]. Lo desarrollado en esta sección y publicado en [24] es un paso más para comprender cómo se puede aplicar la propuesta de Tsallis a un modelo de juguete de un sistema idealizado bajo la acción de un campo gravitacional. Las aplicaciones reales de modelos estadísticos generalizados en sistemas de gravitación en astrofísica se han contemplado en varias formas. Algunos de ellos se han realizado en el marco de las estadísticas de BG con ligeras modificaciones como en la Ref. [93] y su seguimiento [100]. Otros se han llevado a cabo dentro del marco estadístico de Tsallis, como [92, 69, 101, 102, 103, 104, 105], donde las estructuras estelares y las esferas gaseosas se han modelado mediante ecuaciones polítropicas caracterizadas por el parámetro Tsallis.

En resumen, hemos obtenido resultados razonables y físicamente sólidos de la aplicación de la estadística de Tsallis en el caso del gas autogravitante, logrando la convergencia de importantes funciones termodinámicas y ecuaciones de estado bajo el supuesto de un límite termodinámico consistente con el marco estadístico utilizado. Nuestros resultados han demostrado que la estadística de Tsallis es una herramienta viable para la descripción de sistemas con fuerzas de largo alcance, pero que su aplicación debe llevarse a cabo con cuidado y que sus resultados deben entenderse en el contexto del marco estadístico modificado. Creemos que la cuestión de la equivalencia de ensembles merece investigaciones más detalladas, especialmente sobre la formulación exacta y correcta del ensamble de energía constante en las estadísticas de Tsallis.

## Conclusiones

La investigación y desarrollo de la presente tesis doctoral culminó en la elaboración y preparación de seis artículos; cuatro de ellos terminados, de los cuales dos ya fueron publicados y el resto se encuentran en el proceso de redacción;

 "On the Physical Interpretation of geometrothermodynamic metrics " Viridiana Pineda Reyes, Hernando Quevedo, María N. Quevedo, Alberto Sánchez y Edgar Váldes; 2019; International Journal of Geometric Methods in Modern Physics Aceptado

https://arxiv.org/abs/1704.03071

 "Statistical mechanics of the self-gravitating gas in the Tsallis Framework" Lenin F. Escamilla-Herrera, Christine Gruber, Viridiana Pineda Reyes y Hernando Quevedo ; 2019; Physical Review E.

Publicado DOI: 10.1103/PhysRevE.99.022108

• "Modeling reparametrizations in thermodynamic phase space"

Viridiana Pineda Reyes, Lenin F. Escamilla-Herrera, Christine Gruber, Francisco Nettel y Hernando Quevedo; 2019; Journal Advances in Theoretical and Mathematical Physics *Enviado* 

https://arxiv.org/abs/1808.06976

#### CAPÍTULO 6. CONCLUSIONES

#### • "Statistical origin of Legendre invariant metrics

Viridiana Pineda Reyes, Lenin F. Escamilla-Herrera, Christine Gruber, Francisco Nettel y Hernando Quevedo; 2019; Physica A: Statistical Mechanics and its Aplications *Publicado* 

DOI: 10.1016/j.physa.2019.04.003

• "Conformal divergence as statistical origin of geometrothermodynamic metrics"

Viridiana Pineda Reyes, Lenin F. Escamilla-Herrera, Francisco Nettel y Hernando Quevedo; 2019

 $En \ preparación$ 

#### • "Generalized q-Fisher metric on Tsallis statistics"

Viridiana Pineda Reyes, Lenin F. Escamilla-Herrera, Francisco Nettel y Hernando Quevedo; 2019

En preparación

Como se mencionó al inicio de este manuscrito, el propósito principal de la investigación de la presente tesis doctoral fue construir un fundamento microscópico consistente con un formalismo termodinámico geométrico invariante ante transformaciones de Legendre. Así, dichos artículos se articularon en dirección de la construcción de una noción microscópica o mecánico estadística del formalismo de la GTD. En la presente investigación se abordaron principalmente tres aproximaciones; una perspectiva fundamentalmente geométrica, otra desde el campo de geometría de la información y finalmente desde el enfoque de la geometría de la mecánica estadística no extensiva.

La primera tentativa a la construcción de una perspectiva microscópica a la GTD fue desde la geometría de teoría de fluctuaciones [18], desarrollado en la subsección 2. Se mostró que en el caso de la métrica  $G^{III}$ , siempre es posible realizar una transformación de coordenadas al nivel de la variedad de fase de GTD, de manera que la métrica inducida en la variedad de estados de equilibrio se convierte en una métrica Hessiana en términos de un nuevo potencial termodinámico con respecto a unas nuevas coordenadas. El análisis muestra que las componentes de las métricas de GTD, a nivel de la variable de equilibrio, se pueden interpretar como el segundo momento de las fluctuaciones del nuevo potencial termodinámico con respecto a las nuevas coordenadas. Encontramos la forma explícita del nuevo potencial termodinámico y las nuevas coordenadas para una métrica arbitraria  $G^{III}$ , la cual es invariente ante tranformaciones parciales y totales de Legendre.

En el caso de las métricas  $G^{I}$  y  $G^{II}$ , las cuales son invariantes solo ante transformaciones totales, no es posible encontrar la forma explícita del nuevo potencial termodinámico en general. En cambio, para cada sistema termodinámico con una ecuación fundamental dada, los cálculos deben realizarse por separado al nivel de la variedad de estados de equilibrio. Se utilizaron varios teoremas sobre las propiedades de variedades Hessianas para demostrar que para los sistemas con dos grados de libertad, siempre es posible encontrar un potencial Hessiano. En el caso de un mayor número de grados de libertad, la curvatura de Riemann de la variedad de equilibrio debe satisfacer ciertas condiciones para que exista el potencial de Hessiano. Así, si el potencial Hessiano posee un valor extremos en el equilibrio, decimos así que se dicho potencial representa al nuevo potencial termodinámico, el cual determina las propiedades físicas de las componentes de la métrica en GTD.

La invariabilidad ante difeomorfismos de las métricas utilizadas en GTD nos permite introducir un nuevo tipo de potencial termodinámico que depende de unas nuevas coordenadas que no están asociadas con las variables termodinámicas habituales necesariamente. Así, este resultado se puede utilizar para clasificar los potenciales termodinámicos en potenciales fundamentales, de Legendre y de difeomorfos. Los potenciales fundamentales y de Legendre se utilizan en la termodinámica clásica, la cual es invariante con respecto al cambio de potenciales dentro de esta clase. Los potenciales difeomorfos son diferentes porque se obtienen mediante la aplicación de transformaciones de coordenadas arbitrarias en la variedad de fase termodinámica o la de estados de equilibrio. El punto importante es que las componentes de las métricas de GTD corresponden al segundo momento de las fluctuaciones de los potenciales difeomórfos.

GEOMETROTERMODINÁMICA ESTADÍSTICA

Mientras que los potenciales fundamentales y de Legendre tienen un significado físico claro, los potenciales difomórfos se han introducido utilizando las propiedades geométricas de la variedad de fase y la de estados de equilibrio. Por lo tanto, su significado físico no está completamente claro. Sin embargo, en el caso de la métrica  $G^{III}$ , el potencial difeomórfo es solo un potencial fundamental o de Legendre escrito en términos de nuevas coordenadas; de modo que su significado físico está estrechamente relacionado con el de los potenciales conocidos de la termodinámica clásica.

La segunda tentativa a la construcción de una perspectiva microscópica a la GTD fue a partir de un enfoque desde geometría de la información. Este punto de partida nos permitió modelar geométricamente reparametrizaciones de coordenadas termodinámicas en el espacio fase de manera general y arbitraria [20], desarrollado en la subsección 3, mientras que para la selección particular de una familia de reparametrizaciones termodinámicas se muestra que las métricas invariantes de Legendre pueden interpretarse en términos de cantidades estadísticas [21], desarrollado en la subsección 3.4. Se comenzó con una variedad Riemanniana ( $\mathcal{E}, g$ ) con la métrica g dada por (3.22). Esta es una variedad encajada en una variedad de dimensión superior con una estructura de contacto y métrica ( $\mathcal{T}, \eta, G$ ). Las cuales corresponden a la variedad de estados de equilibrio (VEE) y a la variedad de fase termodinámica (VFT), respectivamente. En Ref. [48] se muestra que bajo una transformación total de Legendre la métrica (3.28) lleva, mediante su pullback, a la métrica de Ruppeiner [8] sobre la variedad de estados de equilibrio  $\mathcal{E}$ .

Se mostró que bajo una reparametrización  $\tilde{I}^a = \tilde{I}^a(I^a)$  se puede describir la variedad  $(\mathcal{E}, g)$ en términos de otra VFT  $(\mathcal{T}, \tilde{\eta}, \tilde{G})$ . Identificamos esta como una VFT diferente porque la unoforma de contacto (??),

$$\tilde{\eta} = \langle \mathrm{d}s \rangle = \mathrm{d}\Phi - E_{\tilde{a}} \frac{\partial I^{\tilde{a}}}{\partial I^{a}} \mathrm{d}I^{a} \,, \tag{6.82}$$

no está relacionada con (??),

$$\eta = \mathrm{d}\Phi - E_a \mathrm{d}I^a \,, \tag{6.83}$$

a través de un contacto morfismo. Sin embargo, la descripción termodinámica sobre  $\mathcal{E}$  es la misma, dado que la primera ley (3.30),

$$d\Phi = E_a dI^a \quad y \quad E_a = \frac{\partial \Phi}{\partial I^a}.$$
 (6.84)

es recobrada de la condición  $\tilde{\varphi}^*(\tilde{\eta}) = 0$ , como se puede apreciar de las condiciones de encaje (3.31),

$$\mathrm{d}\phi = E_{\tilde{a}} \frac{\partial I^{\tilde{a}}}{\partial I^{a}} \mathrm{d}I^{a} \,, \tag{6.85}$$

y (??)

$$E_{\tilde{a}} = \frac{\partial I^a}{\partial I^{\tilde{a}}} \frac{\partial \phi}{\partial I^a} \,. \tag{6.86}$$

Además, la métrica de la VEE, que está relacionada con la estadística de fluctuaciones (termodinámicas), se obtiene como  $g = \tilde{\varphi}^*(\tilde{G})$ .

Finalmente, se encontró que los pullback de las dos métricas en la VFT se pueden expresar solo en términos de los tensores (3.36),

$$\tilde{t} = \frac{dI^{\tilde{a}}}{dI^{a}} dE_{\tilde{a}} \overset{s}{\otimes} dI^{a} = \frac{dI^{\tilde{a}}}{dI^{a}} \frac{dE_{\tilde{a}}}{dE_{a}} dE_{a} \overset{s}{\otimes} dI^{a}.$$
(6.87)

y (??),

$$t = \mathrm{d}E_a \overset{s}{\otimes} \mathrm{d}I^a \,, \tag{6.88}$$

 $g = \tilde{\varphi}^*(\tilde{t})$  y  $g = \varphi^*(t)$ , respectivamente. En Ref. [48] se argumenta que la estructura de contacto describe el equilibrio termodinámico, mientras que la estructura métrica describe las fluctuaciones termodinámicas. Como se mostró, ambas estructuras de contacto  $\eta$  y  $\tilde{\eta}$ , llevan a la primera ley de la termodinámica en  $\mathcal{E}$  y los dos tensores t y  $\tilde{t}$  otorgan la misma descripción geométrica de las fluctuaciones termodinámicas sobre  $\mathcal{E}$  a través de la métrica g. Por lo tanto, a pesar de tener diferentes VFT, a través de estas reparametrizaciones particulares de las variables termodinámicas intensivas y extensivas, las estructuras geométricas en el espacio de estados de equilibrio permanecen invariantes. Esto indica que es posible caracterizar geométricamente las reparametrizaciones introducidas aquí en el VFT modificando la estructura de contacto y la de

GEOMETROTERMODINÁMICA ESTADÍSTICA

Riemann.

Así, podemos concluir que el campo tensorial  $\tilde{t}$  comprende geométricamente la información de estas reparametrizaciones particulares de las variables de estado termodinámico en la descripción de las fluctuaciones estadísticas en la VFT. Luego, vemos que, en términos geométricos, las reparametrizaciones propuestas no tienen efecto en la VEE, es decir, el sistema correspondiente permanece en equilibrio. Como se mostró, tenemos cierta arbitrariedad de construir variedades de fase termodinámica, así también se podría intentar construir una VFT con la estructura de contacto  $\eta$  y una métrica resultante de la combinación de la uno-forma canónica con el campo tensorial  $\tilde{t}$ . Dicha construcción fue explorada en Ref. [21], en la sección 3.4.

Así, dicha construcción permitió mostrar que las métricas invariantes de Legendre también pueden interpretarse en términos de cantidades estadísticas, es decir, el promedio y la varianza del diferencial de la entropía microscópica. Con este fin, introducimos una reparametrización particular de las variables extensivas e intensivas, que se utilizan como coordenadas en el espacio de fase termodinámico. Así, para obtener una forma de  $\mathcal{G}$  tal que sea covariante bajo un conjunto completo de transformaciones de Legendre, el conjunto de funciones  $\{I^{\tilde{a}}, E_{\tilde{a}}\}$  deben satisfacer dos condiciones: (i) todas las funciones  $I^{\tilde{a}}$  y  $E_{\tilde{a}}$  tienen que tener la misma forma funcional, y (ii)  $I^{\tilde{a}}$  y  $E_{\tilde{a}}$  tienen que ser funciones pares, i.e.,  $E_{\tilde{a}}(-E_a) = E_{\tilde{a}}(E_a)$  y  $I^{\tilde{a}}(-I^a) = I^{\tilde{a}}(I^a)$ . Dichas reparametrizaciones están dadas de manera explícita en 3.40. Estas reparametrizaciones están codificadas en un tensor de rango dos, que contiene información sobre las fluctuaciones estadísticas del sistema. Concluimos así que las métricas invariantes de Legendre también se pueden interpretar en términos de cantidades estadísticas que están relacionadas con las fluctuaciones termodinámicas del sistema considerado.

Como se ilustro con detalle a lo largo del capitulo (??), tanto la perspectiva desde geometría de teoría de las fluctuaciones (2) como la desarrollada desde reparametrizaciones en la VFT (3) no permitieron la derivación emergente de las métricas  $g^{I}$  ni  $g^{II}$ , (1.13),

$$g^{I/II} = \beta_{\Phi} \Phi(\chi_a^b \Phi_{,bc}) dE^a dE^c \quad con \quad \Phi_{bc} = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial E^b \partial E^c}.$$
 (6.89)

En la sección (4) utilizamos las herramientas de geometría de la información, en particular la

construcción de divergencias como distancias métricas, para promover un carácter estadístico fundamental a las métricas de la GTD, en particular para el caso de  $g^I$  y  $g^{II}$ . Se definió, a partir de la libertad de la definición de divergencia en geometría e la información, una familia de divergencias conformes a la divergencia tipo Bregmann,

$$\mathfrak{D}[\theta;\theta^*] = \mathfrak{F}(\theta)D[\theta;\theta^*]. \tag{6.90}$$

Se mostró que si elegimos parametrizar la VEE con una distribución tipo BG es posible, en su versión infinitesimal, promover a la divergencia conforme como una estructura métrica conformemente Hessiana,

$$\mathfrak{D}[\theta;\theta^*] = \mathfrak{F}(\theta) \frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta_a \partial \theta_b} d\theta_a d\theta_b.$$
(6.91)

Se ilustró que es posible elegir un factor conforme muy particular  $\mathfrak{F}(\theta)$  en (4.4), que codifica la interacción termodinámica (transiciones de fase) que las métricas Hessianas no pueden detectar, en el mismo sentido que en GTD. De modo que se eligió

$$\mathfrak{D}[\theta;\theta^*] = \left(\delta_a^{\ b} \langle x^a \rangle \frac{\partial \psi}{\partial \theta_b}\right) \frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta_c \partial \theta_d} d\theta_c d\theta_d, \tag{6.92}$$

que corresponde a  $g^I$  en el marco de GTD (1.13).

$$\mathfrak{D}[\theta;\theta^*] = \left(\eta_a^{\ b} \langle x^a \rangle \frac{\partial \psi}{\partial \theta_b}\right) \frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta_c \partial \theta_d} d\theta_c d\theta_d, \tag{6.93}$$

que corresponde a  $g^{II}$  en el marco de la GTD (1.13). En términos generales, hemos visto que los factores conformes de las métricas de la GTD dan lugar a proponer una generalización de las divergencias, heredando así el carácter conforme en teoría de la información. Así, es claro que este tipo de divergencias parece indicar la presencia de un nuevo tipo de propiedades geométricas a nivel de las variedades usadas en teoría de la información. Hasta el punto de conclusion de esta tesis, el trabajo de una descripción más profunda que la presentada aquí y la construcción de estructuras geométricas, asociadas a las divergencias conformes (4.16) y (4.18) se encuentra en presente desarrollo en el artículo [22].

#### CAPÍTULO 6. CONCLUSIONES

La tercera y última tentativa a la construcción microscópica de la GTD fue desde la perspéctiva de la geometría de la estadística de Tsallis 5. Dicha aproximación fue a partir de la realizacion de que es posible construir una métrica que sea conforme a la métrica de Fisher-Rao (4.11) si estamos dispuestos a explorar estadisticas más generales que las de Boltzmann-Gibbs (BG). Aunque la construcción de una métrica conformalmente Hessiana se deja como un trabajo a futuro, nos fue posible derivar de manera consistente y desde una perspéctiva puramente estadística, la VFT y la VEE para la distribución de Tsallis 5.1.1. Además, introducimos una métrica q-Fisher generalizada (5.21) que surge de manera natural en análogo de la métrica de información de Fisher para la estadística de Tsallis. Analizamos dicha métrica en el rango de no aditividad débil. Computamos dicha métrica como una serie de perturbaciones, pesadas por potencias de (1-q), a la covariancia de variables aleatorias. Aplicamos dicha métrica a sistema termodinámico del gas ideal. Encontramos que a primer orden, el tratamiento de este sistema mediante una estadística no aditiva, genera interacción termodinámica efectiva. La curvatura de la primera perturbación  $\mathcal{A}^{ab} d\theta_a d\theta_b$  presenta dos divergencias y un punto donde dicha curvatura desaparece. Además, la naturaleza del escalar de curvatura  $R(\mathcal{A}^{ab}d\theta_a d\theta_b)$  en sus regiones asintóticas se caracteriza funcionalmente por  $P \propto T^{5/2}$ . [23]

En la subsección 6 utilizamos la estadística de Tsallis para analizar al sistema de un gas autogravitante, desde la perspéctiva de la mecánica estadística. Se presentaron ecuaciones de estado termodinámicas para el gas autogravitante considerando la mecánica estadística de Tsallis en régimen de baja densidad. En resumen, hemos obtenido resultados físicamente razonables en la aplicación de la estadística de Tsallis para un gas autogravitante, logrando así la convergencia de importantes funciones termodinámicas y ecuaciones de estado bajo el supuesto de un límite termodinámico consistente con el marco estadístico usado. Nuestros resultados han demostrado que la estadística de Tsallis es una herramienta viable para la descripción de sistemas con fuerzas de largo alcance, pero que su aplicación debe llevarse a cabo con cuidado y que sus resultados deben entenderse en el contexto del marco estadístico modificado.

Así, lo desarrollado en la sección 6 es un paso más para comprender cómo se puede aplicar la propuesta de Tsallis a un modelo de juguete de un sistema idealizado de un gas autogravitante.

Las aplicaciones reales de modelos estadísticos generalizados en sistemas auto-gravitantes en sistemas astrofísicos se han contemplado en varias formas anteriormente. Algunos de ellos se han realizado en el marco de la estadística de BG con ligeras modificaciones como en la Ref. [93] y su seguimiento en [100], donde fue considerado como una aplicación el medio interestelar.

# Apéndices

# A. Transformaciones de Legendre como transformación de coordenadas

Las transformaciones de Legendre fueron introducidas por primera vez, como una herramienta para la generación canónica de potenciales termodinámicos, en el contexto de termodinámica por Gibbs [106]. Esto permitió construir la termodinámica clásica como un formalismo que no depende de la selección de potencial termodinámico. De este modo, la invariancia ante transformaciones de Legendre se convierte en una propiedad fundamental de la termodinámica.

Para introducir esta propiedad en el formalismo de la GTD tomamos las transformaciones de Legendre como transformaciones de coordenadas en la VFT:  $\mathfrak{LT} : \mathcal{T} \to \mathcal{T}$ . Una transformación de Legendre está definida como

$$\mathfrak{LT}: Z^A = \{\Phi, E^a, I^a\} \longmapsto \tilde{Z}^A = \left\{\tilde{\Phi}, \tilde{E}^a, \tilde{I}^a\right\}$$
(94)

$$\Phi = \tilde{\Phi} - \delta_{kl} \tilde{E}^k \tilde{I}^l, \qquad E^i = -\tilde{I}^i, \qquad E^j = \tilde{E}^j, \qquad I^i = \tilde{E}^i, \qquad I^j = \tilde{I}^j \tag{95}$$

donde  $i \cup j$  es cualquier descomposición disjunta del set de índices  $\{1, \ldots, n\}$  y  $k, l = 1, \ldots, i$ . En el caso particular, para  $i = \{1, \ldots, n\}$  e  $i = \emptyset$  obtenemos la transformación total de Legendre y la identidad, respectivamente. Este set de transformaciones constituyen transformaciones discretas por lo que no forman un grupo.

Tomaremos el ejemplo de n = 2. Las coordenadas termodinámicas están dadas por {  $\Phi = U$ ,  $E^1 = S, E^2 = V, I^1 = T, I^2 = P$  }. La discomposición disjunta de  $i \cup j$  esta dada como

• Transformación parcial de Legendre: i = 1, j = 2

Para este caso las nuevas coordenadas están dadas como

$$\tilde{\Phi} = \Phi - TS, \quad \tilde{E}^1 = -I^1 = T, \quad \tilde{E}^2 = E^2, \quad \tilde{I}^1 = -E^1 = -S, \quad \tilde{I}^2 = I^2.$$
 (96)

En este ejemplo,  $\tilde{\Phi}$  corresponde al potencial termodinámico llamado energía libre de Helm-

holtz.

• Transformación parcial de Legendre: i = 2, j = 1

Para este caso las nuevas coordenadas están dadas como

$$\tilde{\Phi} = \Phi + PV, \quad \tilde{E}^1 = E^1, \quad \tilde{E}^2 = -I^2 = P, \quad \tilde{I}^1 = I^1, \quad \tilde{I}^2 = E^2 = V.$$
 (97)

En este ejemplo,  $\tilde{\Phi}$  corresponde al potencial termodinámico llamado Entalpía.

• Transformación total de Legendre: i = 1, 2, j = 0 Para este caso las nuevas coordenadas están dadas como

$$\tilde{\Phi} = \Phi - ST + PV, \quad \tilde{E}^1 = -I^1 = T, \quad \tilde{E}^2 = -I^2 = P, \quad \tilde{I}^1 = -E^1 = -S, \quad \tilde{I}^2 = E^2 = V.$$
(98)

En este ejemplo,  $\tilde{\Phi}$  corresponde al potencial termodinámico llamado energía libre de Gibbs.

Algo importante que remarcar es que las transformaciones de Legendre dejan invariante la información termodinámica contenida en la subvariedad de Legendre. Desde la perspectiva geométrica esto implica que la subvariedad de Legendre generada por  $\Upsilon(E^a)$  (1.6),

$$E^{i} = \frac{\partial \Upsilon}{\partial I_{i}} \quad , \quad I_{i} = -\frac{\partial \Upsilon}{\partial E^{i}} \quad , \quad \Phi = \Upsilon - I_{i} \frac{\partial \Upsilon}{\partial I_{i}}, \tag{99}$$

induce una generada por  $\mathcal{LT}(\tilde{I}^a)$ . Decimos asi que, sea  $\Upsilon$  una función suave y convexa de  $E^a$ ,  $\Pi$  una función de  $\tilde{I}^a$  obtenida por una transformación total de Legendre de  $\Upsilon$  con respecto a  $E^a$ . Entonces  $\mathcal{E}$  induce  $\tilde{\mathcal{E}}$  [32].

Algo importante que remarcar es que una subvariedad de Legendre, tal como se definió en (1.2),

La 1-forma,  $\theta$ , en las coordenadas canónicas (1.2) resulta ser una estructura geométrica

invariante ante transformaciones de Legendre  $\mathfrak{LT}(\theta) = \theta$ ,

$$\begin{aligned} \mathfrak{LT}(\theta) &= d(\tilde{\Phi} - \delta_{kl}\tilde{E}^k\tilde{I}^l,) + \delta_{ab}\tilde{E}^a d\tilde{I}^b \\ &= d\tilde{\Phi} - \delta_{ab}\tilde{I}^a d\tilde{E}^b \\ &= \theta. \end{aligned}$$

El encaje  $\varphi : \mathcal{E} \longrightarrow \mathcal{T}$ , mediante la condición  $\varphi^*(\theta) = 0$ , genera la subvariedad de Legendre  $\mathcal{E}$ . Esta condición introduce el cumplimiento de la primera ley sobre cada punto de  $\mathcal{E}$ . El que la 1-forma de contacto,  $\theta$ , sea invariante ante transformaciones de Legendre es una consecuencia directa de que la primera ley es invariante también. Esta propiedad nos permite escribir, de manera local, la 1-forma de contacto en distintas presentaciones

#### • Representación de la energía.

Identificamos ( $\Phi$ ,  $E^a$ ,  $I^a$ ) como

 $(\Phi; E^1, E^2, E^3, \dots; I^1, I^2, I^3, \dots) \Leftrightarrow (U; S, V, N_1, \dots; T, -P, \mu^1, \dots).$ 

Entonces, la 1-forma fundamental de Gibbs en su representación de la energía es

$$\theta^U := dU - TdS + PdV - \delta_{ab}\mu^a dN^b, \tag{100}$$

donde todas las variables de la derecha se asumen independientes. De este modo, la primera ley se cumple cuando  $\theta^U$  se anula.

• Representación de la entropía Identificamos  $(\Phi, E^a, I^a)$  como

$$(\Phi; E^1, E^2, E^3, \dots; I^1, I^2, I^3, \dots) \Leftrightarrow (S; U, V, N_1, \dots; 1/T, -P/T, \mu^1/T, \dots)$$

Entonces, la 1-forma fundamental de Gibbs en su representación de la entropía es

$$\theta^S := dS - \frac{1}{T}dU - \frac{P}{T}dV - \delta_{ab}\frac{\mu^a}{T}dN^b, \qquad (101)$$

GEOMETROTERMODINÁMICA ESTADÍSTICA

donde todas las variables de la derecha se asumen independientes. De este modo, la primera ley se cumple cuando  $\theta^S$  se anula.

### B. Invarianza de Legendre en $G^{I/II/III}$

Es bien sabido que las leyes de la termodinámica clásica pueden ser escritas en términos de diferentes potenciales termodinámicos, sin afectar la información termodinámica extraída del sistema. Esto significa que las propiedades del sistema no dependen de la elección del potencial termodinámico. Por otro lado, los diferentes potenciales termodinámicos están construidos en virtud de transformaciones de Legendre [34]. Así, la termodinámica en equilibrio resulta ser invariante ante transformaciones de Legendre. Uno de los objetivos principales de GTD es introducir esta propiedad en un formalismo geométrico. Para esto usamos la definición de transformación de Legendre en términos de una transformación de coordenadas (A). Como se menciona en (1.2), dado que una transformación de Legendre involucra 2n + 1 coordenadas, esta tiene que actuar en una variedad (2n+1)-dimensional, que corresponde a la VFT. Entonces una métrica definida en  $\mathcal{T}$ , como elemento de linea,

$$ds_{2n+1}^2 = G_{AB}dZ^A dZ^B, aga{102}$$

se dice que es invariante ante transformaciones de Legendre si la dependencia funcional de las componentes  $G_{AB}$  no cambia bajo una transformación de Legendre.Dicho de otro modo, si denotamos por  $\tilde{G} = \tilde{G}(\tilde{Z}^A)$  a la métrica obtenida a partir de una transformación de Legendre (95) de G, y define  $G'(\tilde{Z}^A) = G(Z^A = \tilde{Z}^A)$ , entonces la invariaza de Legendre de G puede ser obtenida demandando que  $\tilde{G}(\tilde{Z}^A) = G'(\tilde{Z}^A)$ . Además, dado que  $g = \varphi^*(G)$  y  $\tilde{\varphi}^*(G')$  con  $\varphi$ definido como (95) con  $Z^A = \tilde{Z}^A$ , entonces se tiene que  $\tilde{g} = \tilde{\varphi}^*(\tilde{G}) = \tilde{\varphi}(G')$ , i.e., es una métrica invariante de Legendre también.

Bajo una transformación total de Legendre,  $Z^A \to \tilde{Z}^A$ , está dada como (95), las componentes de la métrica se transforman como

$$G_{AB} \rightarrow \tilde{G}_{AB} = \frac{\partial Z^C}{\partial \tilde{Z}^A} \frac{\partial Z^D}{\partial \tilde{Z}^B} G_{CD}$$

con a mátriz de transformación

$$\frac{\partial Z^{A}}{\partial \tilde{Z}^{B}} = \begin{bmatrix} 1 & -\tilde{Z}^{n+1} & -\tilde{Z}^{n+1} & \dots & -\tilde{Z}^{2n} & -\tilde{Z}^{1} & -\tilde{Z}^{2} & \dots & -\tilde{Z}^{n} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & -1 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix}$$
(103)

donde los indices  $A ext{ y } B$  representan filas y columnas, respectivamente. Dado que el determinante de esta matriz es igual a uno, la inversa existe, y esta determina el difeomorfismo correspondiente a una transformación total de Legendre. Sea  $\tilde{G}_{AB}(\tilde{Z}^C) = G_{AB}(Z^C \to \tilde{Z}^C)$  representa las componentes de la métrica G obtenidas después de haber realizado una transformación de Legendre (95) de la métrica G, y sean  $G'_{AB}(\tilde{Z}^C) = G_{AB}(Z^C = \tilde{Z}^C)$  las componentes de la métrica G' obtenida reemplazando las coordenadas  $Z^C$  por sus contrapartes  $\tilde{Z}^C$  en la métrica G(ninguna transformación de Legendre es aplicada). Entonces, si demandamos que la condición

$$\tilde{G}_{AB}(\tilde{Z}^C) = G'_{AB}(\tilde{Z}^C)$$

se satisfaga para cada valor de  $A \ge B$ , se garantiza que las métricas G sobre  $\mathcal{T} \ge g$  sobre  $\mathcal{E}$  son invariantes de Legendre.

Las condiciones de invariancia de Legendre llevan a un conjunto de ecuaciones algebraicas sobre las componentes  $G_{AB}$ . Para el caso n = 2, la VFT se define como una variedad 5-dimensional. Entonces, las componentes  $G_{AB}$  de una métrica arbitraria en una VFT 5-dimensional bajo una transformación de Legendre (95), de acuerdo a

$$G_{AB} \to \tilde{G}_{AB} = \frac{\partial Z^C}{\partial \tilde{Z}^A} \frac{\partial Z^D}{\partial \tilde{Z}^B} G_{CD}$$
 (104)

donde la matriz de transformación está dada en (103). Es conveniente construir en general una métrica sobre  $\mathcal{T}$  como  $(I, J, \ldots = 1, \ldots, 4)$ 

$$G = G_{00}dU^2 + 2G_{0I}dUdX^I + G_{I,J}dX^I dX^J$$
(105)

donde las coordenadas sobre VFT están dadas como  $\{U, S, V, T, P\}$  y  $X^I = (S, V, T, P)$ . Usando la representación de la métrica (105), el conjunto de ecuaciones de (104)

Este sistema de ecuaciones algebraicas para las componentes  $G_{AB}$  de satisfacerse, garantiza la invariancia de Legendre. La dependencia explícita, en el sistema de ecuaciones anterior, de las coordenadas termodinámicas sobre VFT apunta a una una solución particular la cual puede ser derivada usando el ansatz donde  $G_{0A}$  depende linealmente de  $Z^A$  y  $G_{IK}$  son funciones cuadráticas de las coordenadas. Así, la métrica

$$\begin{split} \tilde{G}_{00} &= c_1, \\ \tilde{G}_{01} &= c_2 T, \\ \tilde{G}_{02} &= -c_2 P, \\ \tilde{G}_{03} &= -(c_1 + c_2) S, \\ \tilde{G}_{04} &= (c_1 + c_2) V, \\ \tilde{G}_{11} &= c_3 T^2 + c_4, \\ \tilde{G}_{12} &= -c_5 T P + c_6, \\ \tilde{G}_{13} &= -c_7 S T, \\ \tilde{G}_{14} &= -c_8 V T + c_9, \\ \tilde{G}_{22} &= c_{10} P^2 + c_{11}, \\ \tilde{G}_{23} &= -c_8 P S - c_9, \\ \tilde{G}_{24} &= c_{12} V P, \\ \tilde{G}_{33} &= (c_1 + 2c_2 + c_3) S^2 + c_4, \\ \tilde{G}_{34} &= -(c_1 + 2c_2 + c_5) S V - c_6, \\ \tilde{G}_{44} &= (c_1 + 2c_2 + c_{10}) V^2 + c_{11}. \end{split}$$

es completamente invariante ante transformaciones de Legendre. Aquí  $c_1, \ldots c_{12}$  representan contantes reales arbitrarias y en general det  $G_{AB} \neq 0$ . Esta solución particular muestra que existen métricas termodinámicas no triviales que pueden ser usadas para introducir estructuras Riemannianas es VEE. Si pensamos en una VFT más general, es posible resolver un conjunto de ecuaciones similares. Se encontraron tres clases de métricas, para el caso de transformaciones totales de Legendre, (1.5), mientras que para transformaciones totales y parciales (1.3).

#### C. Funciones generalizadas de Tsallis

La mecánica estadística generalizada propuesta por Tsallis [14, 72, 15, 73] se introdujo para tener en cuenta los sistemas con comportamiento termodinámico no aditivo. Esta generalización de la estadística de BG usa, entre otras cosas, la noción de entropía modificando la forma de contar los microestados. Discutamos primero la noción habitual de entropía en el marco de la estadística de BG, y luego mostremos la generalización de la entropía de Tsallis. La entropía en la estadística de BG se define utilizando la fórmula de Shannon como

$$S_{BG} = -k_B \sum_{i=1}^{\Omega} p_i \ln p_i \,, \tag{106}$$

donde  $p_i$  es la probabilidad de que el is *i*-ésimo microestado, y la condición de normalizacion

$$\sum_{i=1}^{\Omega} p_i = 1.$$
 (107)

Asumiendo estados equiprobables, i.e., que cada microestado es igualmente probable ,  $p_i = 1/\Omega$ , la entropía de BG es obtenida,

$$S_{BG} = k_B \ln \Omega. \tag{108}$$

La entropía de BG es, entre otras cosas, aditiva, lo que significa que al sumar las entropías de dos sistemas independientes  $A \ge B$ , el resultado es la suma directa de ambos,

$$S_{BG}(A+B) = S_{BG}(A) + S_{BG}(B).$$
(109)

En la estadística generalizada de Tsallis, la entropía se define a través de una generalización de la función logarítmica, llamada logaritmo-q,

$$\ln_q x = \frac{x^{1-q} - 1}{1-q} \,. \tag{110}$$

Esta función es en realidad una ley potencial de la variable x, que contiene un parámetro libre q, y se reduce al logaritmo natural habitual en el límite  $q \rightarrow 1$ . Usando este q-logaritmo, una

q-entropía generalizada se puede definir como

$$S_q = -k_B \sum_{i=1}^{\Omega} p_i^q \ln_q p_i = \frac{1 - \sum_{i=1}^{\Omega} p_i^q}{1 - q}.$$
 (111)

Esta entropía, en contraste con la entropía de BG, no es aditiva. Al añadir las entropías de dos sistemas independientes  $A \ge B$ , el resultado no es simplemente la suma de las dos entropías, sino que también incluye un término cruzado,

$$S_q(A+B) = S_q(A) + S_q(B) + (1-q)S_q(A)S_q(B).$$
(112)

Este término cruzado se asocia con la interacción entre los dos sistemas, y se multiplica por un factor que contiene el parámetro q de Tsallis, una medida para la no aditividad del sistema. En la literatura, la estadística de Tsallis se conoce comúnmente como no extensivas, y q como el parámetro de no extensividad, pero incluso en la propuesta original, se abordó la desigualdad de la aditividad y la extensividad, ver, por ejemplo, Ref. [15], y la entropía de Tsallis se limitó a decir que no es aditiva.

Especialmente en el caso donde se el sistema está bajo la acción de una potencial gravitacional, este aspecto debe entenderse con reservas, ya que en la actualidad no tenemos una versión aceptada de cómo construir microestados gravitacionales y, por lo tanto, no sabemos cómo contarlos, aún no está claro si la entropía de los sistemas gravitacionales es solo no aditiva, o también no extensiva. Para el propósito de este trabajo, solo deseamos utilizar y aplicar el marco de trabajo de Tsallis tal como se definió en la literatura para el ejemplo concreto a la mano, y así podremos etiquetar al parámetro de Tsallis q. Según el valor del parámetro q, de acuerdo con (112), la q-entropía es superaditiva si q < 1, o subaditiva por q > 1, mientras que si q = 1 se recupera la regla usual de adición de BG. Introducido como un parámetro libre, se le debe asignar un valor específico a q según el sistema a considerar y sus propiedades con respecto al tipo de interacciones entre los constituyentes. En presencia de interacción gravitatoria, se debe esperar q < 1, como se ilustró en el caso de dos escenarios astrofísicos particulares en la Ref. [92]. Como se definió el logaritmo generalizado, también se puede definir una función q-exponencial generalizada [15] como su inverso,

$$\exp_q(x) = \left[1 + (1-q)x\right]^{\frac{1}{1-q}},$$
(113)

que recupera igualmente la función exponencial habitual de  $q \rightarrow 1$ . Los cálculos se vuelven más complicados para estas funciones generalizadas, a medida que cambian algunas de las identidades habituales para las funciones exponencial y logaritmo,

$$x \oplus_q y = x + y + (1 - q)xy \tag{114}$$

у

$$x \otimes_{q} y \equiv [x^{1-q} + y^{1-q} - 1]_{+}^{\frac{1}{1-q}} \equiv \begin{cases} 0 & \text{si } q < 1 \text{ y } x^{1-q} + y^{1-q} < 1, \\ [x^{1-q} + y^{1-q} - 1]^{\frac{1}{1-q}} & \text{si } q < 1 \text{ y } x^{1-q} + y^{1-q} \ge 1, \\ xy & \text{si } q = 1 \text{ y } \forall (x, y), \\ [x^{1-q} + y^{1-q} - 1]^{\frac{1}{1-q}} & \text{si } q > 1 \text{ y } x^{1-q} + y^{1-q} > 1, \end{cases}$$
(115)

usando la definición del q logaritmo (110) y (115),

$$x \otimes_q y = [1 + (1 - q)(\ln_q x + \ln_q y)]^{\frac{1}{1 - q}}.$$
(116)

Así, usando (114) y (115) podemos escribir las siguientes relaciones [107]

GEOMETROTERMODINÁMICA ESTADÍSTICA
$$e_q^{x \oplus_q y} = e_q^x e_q^y, \quad (\forall q), \tag{117}$$

$$e_q^{x+y} = e_q^x \otimes_q e_q^y, \quad (\forall q), \tag{118}$$

$$\ln_q(x \otimes_q y) = \ln_q x + \ln_q y \quad (\forall q), \tag{119}$$

$$\ln_q(xy) = \ln_q x + \ln_q y + (1-q) \ln_q x \ln_q y.$$
(120)

Mientras que sus derivadas

$$\frac{d \,\ln_q f(x)}{dx} = \frac{1}{f(x)^q} \frac{d f(x)}{dx},\tag{121}$$

$$\frac{d \ e_q^{f(x)}}{dx} = (e_q^{f(x)})^q \ \frac{d \ f(x)}{dx}.$$
(122)

Con las siguientes propiedades asintóticas,

$$e_q^x = e_q^x \left\{ 1 - \frac{1}{2}(1-q)x^2 + \frac{1}{3}(1-q)^2x^3(1+\frac{3}{8}x) - \frac{1}{4}(1-q)^3x^4(1+\frac{2}{3}x+\frac{1}{12}x^2) + \dots \right\},$$
  
(q \rightarrow 1; \forall x), (123)

$$e_q^x = 1 + x + \frac{1}{2}x^2q + \frac{1}{6}x^3q(2q-1) + \frac{1}{24}x^4q(2q-1)(3q-2) + \dots, \quad (x \to 0; \forall q), \quad (124)$$

$$\ln_q x = \ln x \left\{ 1 + \frac{1}{2} (1-q) \ln x + \frac{1}{6} (1-q)^2 (\ln x)^2 + \frac{1}{24} (1-q)^3 (\ln x)^3 + \dots \right\},$$
  
(q \rightarrow 1; x > 0), (125)

$$\ln_q(1+x) = x - \frac{1}{2}x^2q + \frac{1}{6}x^3q(1-q) - \frac{1}{24}x^4q(1+q)(2-q) + \dots, \quad (x \to 0; \forall q).$$
(126)

## Bibliografía

- M. Hallett and U. Majer, David Hilbert's Lectures on the Foundations of Geometry 1891– 1902. David Hilbert's Foundational lectures, Springer Berlin Heidelberg, 2004.
- [2] N. L. S. Carnot, *Reflections on the Motive power of Heat*. New York : JOHN WILEY and SONS, 1897.
- [3] W. Thomson, "3. on the dynamical theory of heat, with numerical results deduced from mr joule's equivalent of a thermal unit, and m. regnault's observations on steam," *Proceedings* of the Royal Society of Edinburgh, vol. 3, p. 48–53, 1857.
- [4] J. Gibbs, Graphical Methods in the Thermodynamics of Fluids. Transactions of the Connecticut Academy of Arts and Sciences, Connecticut Academy, 1873.
- [5] I. E. Antoniou, "Caratheodory and the foundations of thermodynamics and statistical physics," *Foundations of Physics*, vol. 32, pp. 627–641, Apr 2002.
- [6] R. Hermann, *Geometry, physics, and systems*. Pure and applied mathematics, M. Dekker, 1973.
- [7] F. Weinhold, Classical and Geometrical Theory of Chemical and Phase Thermodynamics: A Non-Calculus Based Approach. Hoboken, NJ: Wiley, 2009.
- [8] G. Ruppeiner, "Thermodynamics: A Riemannian geometric model," *Phys. Rev. A*, vol. 20, p. 1608, 1979.

- T. Hill, Statistical Mechanics: Principles and Selected Applications. Dover Books on Physics, McGraw-Hill, 1956.
- [10] S. Amari and H. Nagaoka, Methods of Information Geometry. Translations of mathematical monographs, American Mathematical Society, 2007.
- [11] J. W. Pratt, "F.Y. Edgeworth and R.A. Fisher on the efficiency of maximum likelihood estimation," Ann. Stat., vol. 4, no. 3, pp. 501–514, 1976.
- [12] C. R. Rao Bull. Calcutta Math. Soc., vol. 37, pp. 81–91, 1945.
- [13] N. Cencov, Statistical Decision Rules and Optimal Inference. Translations of mathematical monographs, American Mathematical Society, 2000.
- [14] C. Tsallis, "Possible generalization of boltzmann-gibbs statistics," Journal of Statistical Physics, vol. 52, pp. 479–487, July 1988.
- [15] C. Tsallis, Introduction to nonextensive statistical mechanics: approaching a complex world. Springer, New York, 2009.
- [16] S.-i. Amari and A. Ohara, "Geometry of q-exponential family of probability distributions," *Entropy*, vol. 13, no. 6, pp. 1170–1185, 2011.
- [17] H. Quevedo, "Geometrothermodynamics," J. Math. Phys., vol. 48, p. 013506, 2007.
- [18] V. Pineda, H. Quevedo, M. N. Quevedo, A. Sanchez, and E. Valdes, "On the physical significance of geometrothermodynamic metrics," 2017.
- [19] L. Landau and E. Lifshitz, Statistical Physics. No. v. 5, Elsevier Science, 2013.
- [20] V. Pineda-Reyes, L. F. Escamilla-Herrera, C. Gruber, F. Nettel, and H. Quevedo, "Modeling reparametrizations in thermodynamic phase space," arXiv e-prints, p. ar-Xiv:1808.06976, Aug 2018.
- [21] V. Pineda-Reyes, L. Escamilla-Herrera, C. Gruber, F. Nettel, and H. Quevedo, "Statistical origin of legendre invariant metrics," *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 526, p. 120767, 2019.

- [22] V. Pineda-Reyes, L. Escamilla-Herrera, F. Nettel, and H. Quevedo, "Conformal divergence as statistical origin of gtd metrics," *In preparation*, vol.-, 2019.
- [23] V. Pineda-Reyes, L. Escamilla-Herrera, F. Nettel, and H. Quevedo, "Generalized q-fisher metric on tsallis statistics," *In preparation*, vol.-, 2019.
- [24] L. F. Escamilla-Herrera, C. Gruber, V. Pineda-Reyes, and H. Quevedo, "Statistical mechanics of the self-gravitating gas in the tsallis framework," *Phys. Rev. E*, vol. 99, p. 022108, Feb 2019.
- [25] M. N. Q. H. Quevedo and A. Sánchez, "Einstein-maxwell-dilaton phantom black holes: Thermodynamics and geometrothermodynamics," *Phys. Rev. D*, vol. 94, p. 024057, Jul 2016.
- [26] V. I. Arnold, Mathematical methods of classical mechanics. Springer Science & Business Media, 2013.
- [27] H. Quevedo and M. N. Quevedo, "Fundamentals of Geometrothermodynamics," 2011.
- [28] A. T. S. V. A. H Quevedo, Hernando; Sanchez, "Curvature as a measure of thermodynamic interaction," *Journal of the Korean Physical Society*, vol. 57, pp. 646–650, Sep 2010.
- [29] H. Quevedo, M. N. Quevedo, and A. Sánchez, "Homogeneity and thermodynamic identities in geometrothermodynamics," *The European Physical Journal C*, vol. 77, p. 158, Mar 2017.
- [30] J. L. Álvarez, H. Quevedo, and A. Sánchez, "Unified geometric description of black hole thermodynamics," *Phys. Rev. D*, vol. 77, p. 084004, Apr 2008.
- [31] H. Stanley, Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena. International Series of Monogr, Oxford University Press, 1987.
- [32] S.-i. Goto, "Legendre submanifolds in contact manifolds as attractors and geometric nonequilibrium thermodynamics," *Journal of Mathematical Physics*, vol. 56, no. 7, p. 073301, 2015.

- [33] D. Christodoulou and R. Ruffini, "Reversible transformations of a charged black hole," *Phys. Rev. D*, vol. 4, pp. 3552–3555, Dec 1971.
- [34] H. Callen, H. Callen, N. F. R. C. of Australia. Research Division, and W. . Sons, Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics. Wiley, 1985.
- [35] H. Touchette, "When is a quantity additive, and when is it extensive?," Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, vol. 305, no. 1, pp. 84 – 88, 2002. Non Extensive Thermodynamics and Physical applications.
- [36] H. Quevedo, M. N. Quevedo, and A. Sanchez, "Quasi-homogeneous black hole thermodynamics," 2018.
- [37] F. Belgiorno, "Notes on Quasi-Homogeneous Functions in Thermodynamics," arXiv eprints, p. physics/0210031, Oct 2002.
- [38] L. Landau and E. Lifshitz, Statistical Physics. No. v. 5, Elsevier Science, 2013.
- [39] V. V. Raman, "The collected papers of albert einstein. vol. 2. the swiss years: Writings, 19001909," American Journal of Physics, vol. 58, no. 7, pp. 700–701, 1990.
- [40] T. Hill, Statistical Mechanics: Principles and Selected Applications. Dover Books on Physics, McGraw-Hill, 1956.
- [41] G. Ruppeiner, "Thermodynamic curvature measures interactions," American Journal of Physics, vol. 78, no. 11, pp. 1170–1180, 2010.
- [42] G. E. Crooks, "Measuring thermodynamic length," Phys. Rev. Lett., vol. 99, p. 100602, Sep 2007.
- [43] A. van der Schaft and B. Maschke, "Geometry of Thermodynamic Processes," *Entropy*, vol. 20, p. 925, Dec 2018.
- [44] G. Ruppeiner, "Thermodynamic Black Holes," Entropy, vol. 20, no. 6, p. 460, 2018.

- [45] G. Ruppeiner, N. Dyjack, A. McAloon, and J. Stoops, "Solid-like features in dense vapors near the fluid critical point," *Journal of Chemical Physics*, vol. 146, p. 224501, Jun 2017.
- [46] G. Ruppeiner, "Some Early Ideas on the Metric Geometry of Thermodynamics," Journal of Low Temperature Physics, vol. 185, pp. 246–261, Nov 2016.
- [47] G. Ruppeiner, "Thermodynamic curvature and black holes," pp. 179–203, 2014.
- [48] R. Mrugala, J. D. Nulton, J. C. Schön, and P. Salamon, "Statistical approach to the geometric structure of thermodynamics," *Phys. Rev. A*, vol. 41, pp. 3156–3160, Mar 1990.
- [49] G. E. Crooks, "Fisher information and statistical mechanics," *Technical Report*, 2012.
- [50] D. Brody and N. Rivier, "Geometrical aspects of statistical mechanics," Phys. Rev. E, vol. 51, pp. 1006–1011, Feb 1995.
- [51] P. Salamon, J. Nulton, and E. Ihrig, "On the relation between entropy and energy versions of thermodynamic length," *The Journal of Chemical Physics*, vol. 80, no. 1, pp. 436–437, 1984.
- [52] K. Vogtmann, A. Weinstein, and V. Arnol'd, Mathematical Methods of Classical Mechanics. Graduate Texts in Mathematics, Springer New York, 1997.
- [53] V. I. Arnold., "Contact geometry and wave propagation," The Mathematical Gazette, vol. 74, no. 469, p. 333–333, 1990.
- [54] L. Pogliani and M. N. Berberan-Santos, "Constantin carathéodory and the axiomatic thermodynamics," *Journal of Mathematical Chemistry*, vol. 28, pp. 313–324, Dec 2000.
- [55] S. Amari and J. Armstrong, "Curvature of hessian manifolds," Differential Geometry and its Applications, vol. 33, pp. 1 – 12, 2014.
- [56] E. T. Jaynes, "Information theory and statistical mechanics," *Phys. Rev.*, vol. 106, pp. 620– 630, May 1957.

- [57] S.-i. Amari, Information Geometry and Its Applications. Springer Publishing Company, Incorporated, 1st ed., 2016.
- [58] A. Bravetti, C. Lopez-Monsalvo, and F. Nettel, "Contact symmetries and Hamiltonian thermodynamics," Ann. Phys., vol. 361, pp. 377 – 400, 2015.
- [59] G. Ruppeiner, "Riemannian geometry in thermodynamic fluctuation theory," Rev. Mod. Phys., vol. 67, p. 605, 1995.
- [60] H. Liu, H. Lü, M. Luo, and K.-N. Shao, "Thermodynamical metrics and black hole phase transitions," *Journal of High Energy Physics*, vol. 2010, no. 12, p. 54, 2010.
- [61] A. Bravetti and F. Nettel, "Thermodynamic curvature and ensemble nonequivalence," *Phys. Rev. D*, vol. 90, p. 044064, Aug 2014.
- [62] H. Quevedo, A. Sanchez, and A. Vazquez, "Relativisticlike structure of classical thermodynamics," vol. arXiv:0811.0222 [math-ph], 2015.
- [63] A. Bravetti, C. S. Lopez-Monsalvo, F. Nettel, and H. Quevedo, "The conformal metric structure of GTD," J. Math. Phys., vol. 54, p. 033513, 2013.
- [64] H. Quevedo, "Fundamentals of geometrothermodynamics," vol. arXiv:1111.5056 [mathph], 2011.
- [65] H. Quevedo and S. A. Zaldivar, "A geometrothermodynamic approach to ideal quantum gases and Bose-Einstein condensates," 2015.
- [66] F. Nielsen, "An elementary introduction to information geometry," arXiv e-prints, p. ar-Xiv:1808.08271, Aug 2018.
- [67] T. Matumoto, "Any statistical manifold has a contrast function—on the c<sup>3</sup>-functions taking the minimum at the diagonal of the product manifold," *Hiroshima Math. J.*, vol. 23, no. 2, pp. 327–332, 1993.
- [68] M. L. Lyra and C. Tsallis, "Nonextensivity and multifractality in low-dimensional dissipative systems," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 80, pp. 53–56, Jan 1998.

- [69] A. Taruya and M. Sakagami, "Gravothermal catastrophe and tsallis' generalized entropy of self-gravitating systems," *Phys. A*, vol. 307, pp. 185–206, 2002.
- [70] L. C. Sampaio, M. P. de Albuquerque, and F. S. de Menezes, "Nonextensivity and tsallis statistics in magnetic systems," *Phys. Rev. B*, vol. 55, pp. 5611–5614, Mar 1997.
- [71] J. Du, "Nonextensivity in nonequilibrium plasma systems with coulombian long-range interactions," *Physics Letters A*, vol. 329, no. 4, pp. 262 – 267, 2004.
- [72] C. Tsallis, "Nonextensive statistics: theoretical, experimental and computational evidences and connections," *Brazilian Journal of Physics*, vol. 29, pp. 1 – 35, 03 1999.
- [73] C. Tsallis and E. Brigatti, "Nonextensive statistical mechanics: A brief introduction," Continuum Mechanics and Thermodynamics, vol. 16, pp. 223–235, 2004.
- [74] J. Naudts, "Theq-exponential family in statistical physics," Journal of Physics: Conference Series, vol. 201, p. 012003, feb 2010.
- [75] J. Naudts, Generalised Thermostatistics. Springer London, 2011.
- [76] S. Abe, S. Martnez, F. Pennini, and A. Plastino, "Nonextensive thermodynamic relations," *Physics Letters A*, vol. 281, no. 2, pp. 126 – 130, 2001.
- [77] R. Toral, "On the definition of physical temperature and pressure for nonextensive thermostatistics," *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 317, no. 1, pp. 209 - 212, 2003.
- [78] "Parallel maxwellian relations and their correlations in nonextensive thermodynamics," *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 527, p. 121304, 2019.
- [79] Y. Zheng, J. Du, and F. Liang, "Thermodynamic stability criterion and fluctuation theory in nonextensive thermodynamics," *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, vol. 30, pp. 629–639, May 2018.

- [80] Y. Zheng and J. Du, "Nonextensive thermodynamic relations based on the assumption of temperature duality," *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, vol. 28, pp. 1791– 1805, Nov 2016.
- [81] G. Ruppeiner, "Thermodynamics: A riemannian geometric model," Phys. Rev. A, vol. 20, pp. 1608–1613, Oct 1979.
- [82] H. Quevedo and A. Vázquez, "The geometry of thermodynamics," AIP Conference Proceedings, vol. 977, no. 1, pp. 165–172, 2008.
- [83] S. Abe, "Thermodynamic limit of a classical gas in nonextensive statistical mechanics: Negative specific heat and polytropism," *Physics Letters A*, vol. 263, no. 4, pp. 424 – 429, 1999.
- [84] S. Abe, S. Martinez, F. Pennini, and A. Plastino, "Classical gas in nonextensive optimal lagrange multipliers formalism," *Physics Letters A*, vol. 278, pp. 249–254, Jan 2001.
- [85] R. C. Tolman, "On the weight of heat and thermal equilibrium in general relativity," *Phys. Rev.*, vol. 35, pp. 904–924, 1930.
- [86] R. C. Tolman and P. Ehrenfest, "Temperature equilibrium in a static gravitational field," *Phys. Rev.*, vol. 36, pp. 1791–1798, 1930.
- [87] R. C. Tolman, "On the use of the energy-momentum principle in general relativity," *Phys. Rev.*, vol. 35, p. 875, 1930.
- [88] D. Lynden-Bell and R. Wood, "The gravo-thermal catastrophe in isothermal spheres and the onset of red-giant structure for stellar systems," Mon. Not. Roy. Astron. Soc., vol. 138, p. 495, 1968.
- [89] D. Lynden-Bell and P. P. Eggleton, "On the consequences of the gravothermal catastrophe," Mon. Not. Roy. Astron. Soc., vol. 191, p. 483, 1980.

- [90] V. A. Antonov, "Most probable phase distribution in spherical star systems and conditions for its existence," in *Dynamics of Star Clusters* (J. Goodman and P. Hut, eds.), vol. 113 of *IAU Symposium*, p. 525, 1985.
- [91] T. Padmanabhan, "Statistical mechanics of gravitating systems," Phys. Rep., vol. 5, pp. 285–362, 1990.
- [92] L. Velazquez, "Remarks about the thermodynamics of astrophysical systems in mutual interaction and related notions," J. Stat. Mech., vol. 2016, 2016.
- [93] H. J. de Vega and N. Sanchez, "Statistical mechanics of the self-gravitating gas: I. thermodynamic limit and phase diagrams," *Nuclear Physics B*, vol. 625, pp. 409–459, 2002.
- [94] X. P. Huang and C. F. Driscoll, "Relaxation of 2d turbulence to a metaeguilibrium near the minimum enstrophy state," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 72, p. 2187, 1994.
- [95] S. Abe, "Correlation induced by tsallis' nonextensivity," Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, vol. 269, no. 2, pp. 403 – 409, 1999.
- [96] A. Parvan, "Microcanonical ensemble extensive thermodynamics of tsallis statistics," *Physics Letters A*, vol. 350, no. 5, pp. 331 338, 2006.
- [97] D. Prato, "Generalized statistical mechanics: Extension of the hilhorst formula and application to the classical ideal gas," *Physics Letters A*, vol. 203, no. 4, pp. 165 – 168, 1995.
- [98] H. Stanley, Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena. International Series of Monogr, Oxford University Press, 1987.
- [99] A. Campa, T. Dauxois, and S. Ruffo, "Statistical mechanics and dynamics of solvable models with long-range interactions," *Phys. Rep.*, vol. 480, pp. 57–159, 2009.
- [100] H. J. de Vega and N. Sanchez, "Statistical mechanics of the self-gravitating gas: Ii. local physical magnitudes and fractal structures," *Nuclear Physics B*, vol. 625, pp. 460–494, 2002.

- [101] A. Taruya and M. Sakagami, "Self-gravitating stellar systems and non-extensive thermostatistics," *Continuum Mech. Thermodyn.*, vol. 16, p. 279–292, 2004.
- [102] A. Taruya and M. A. Sakagami, "Long-term evolution of stellar self-gravitating systems away from thermal equilibrium: Connection with nonextensive statistics," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 90, p. 181101, 2003.
- [103] A. Taruya and M. Sakagami, "Antonov problem and quasi-equilibrium states in an n-body system," Mon. Not. R. Astron. Soc., vol. 364, p. 990–1010, 2005.
- [104] A. Taruya and M. Sakagami, "Gravothermal catastrophe and tsallis' generalized entropy of self-gravitating systems. (iii). quasi-equilibrium structure using normalized q-values," *Phys. A.*, vol. 322, p. 285–312, 2002.
- [105] P. H. Chavanis, "Gravitational instability of polytropic spheres and generalized thermodynamics," Astronomy and Astrophysics, vol. 386, pp. 732 – 742, 2002.
- [106] J. Gibbs, A Method of Geometrical Representation of the Thermodynamic Properties of Substances by Means of Surfaces. A Method of Geometrical Representation of the Thermodynamic Properties of Substances by Means of Surfaces, The Academy, 1871.
- [107] H. Suyari and T. Wada, "On scaling law and tsallis entropy derived from a fundamental nonlinear differential equation(information and mathematics of non-additivity and nonextensivity : from the viewpoint of functional analysis)," 06 2007.