



**INSTITUTO POTOSINO DE INVESTIGACIÓN
CIENTÍFICA Y TECNOLÓGICA, A.C.
POSGRADO EN CONTROL Y SISTEMAS DINÁMICOS**

**Producción de entropía
en sistemas dinámicos disipativos
con aplicación
al proceso de Ornstein-Uhlenbeck**

Tesis que presenta

Ramón Alvarado Castillo

Para obtener el grado de

Maestro en Control y Sistemas Dinámicos

Directores de la Tesis:

Dr. César Octavio Maldonado Ahumada

Dr. Gerardo Barrera Vargas

San Luis Potosí, S.L.P., 12 de septiembre de 2025



Constancia de aprobación de la tesis

La tesis “**Producción de entropía en sistemas dinámicos disipativos con aplicación al proceso de Ornstein-Uhlenbeck**” presentada para obtener el Grado de **Maestro en Control y Sistemas Dinámicos** fue elaborada por **Ramón Alvarado Castillo** y aprobada el **doce de septiembre de dos mil veinticinco** por los suscritos, designados por el Colegio de Profesores de la División de Control y Sistemas Dinámicos del Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, A.C.

Dr. César Octavio Maldonado Ahumada
Codirector de la tesis

Dr. Gerardo Barrera Vargas
Codirector de la tesis

Dr. Haret-Codratian Rosu Barbus
Jurado en el examen

Dr. Eric Campos Cantón
Jurado en el examen



Créditos Institucionales

Esta tesis fue elaborada en la División de Control y Sistemas Dinámicos del Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, A.C., bajo la codirección de los Doctores César Octavio Maldonado Ahumada y Gerardo Barrera Vargas.

Durante la realización del trabajo el autor recibió una beca académica del Consejo Nacional de Humanidades, Ciencia y Tecnología (No. de registro: 897195) y del Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, A. C.

A mis padres

Ramón Alvarado Lara y Ma. Bernabé Rosalina Castillo Castillo

A mis hermanas

Jimena y Elizabeth

Quienes han sido apoyo y motivación en todo momento

Agradecimientos

A mis directores de tesis, los Drs. César Octavio Maldonado Ahumada y Gerardo Barrera Vargas, por su valiosa orientación, por su apoyo en este trabajo de investigación y por haberme brindado la oportunidad de realizar este trabajo. Sus consejos y retroalimentación fueron fundamentales para la realización de la misma.

Al Dr. Haret-Codratian Rosu Barbus, por su valiosa ayuda en la investigación, observaciones y correcciones en la elaboración de esta tesis.

A mis profesores del programa de maestría, por su valiosa enseñanza y apoyo a lo largo de mi tiempo dentro y fuera de clases. Su experiencia, conocimiento, paciencia y dedicación han sido fundamentales para mi crecimiento académico y personal.

A mis compañeros del programa de maestría, por su colaboración y solidaridad durante esta etapa. Sus consejos fueron de gran ayuda en momentos difíciles de este proceso.

A mis amigos y familia, por su amor, apoyo y comprensión incondicional durante este proceso, especialmente a Andrea por su amor y paciencia. Sin su ayuda y motivación, no habría podido completar esta tesis.

Al Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica, por proporcionar la oportunidad y los recursos para llevar a cabo esta investigación.

A todos aquellos que de alguna manera contribuyeron en la realización de esta tesis.

A todos ustedes, mi más sincero agradecimiento.

Resumen

Esta tesis se centra en la producción de entropía y la disipación de energía en sistemas fuera de equilibrio, analizando los principios termodinámicos y sus representaciones matemáticas basadas en el trabajo de Hong Qian sobre sistemas disipativos [1]. Se introducen conceptos básicos de entropía desde distintas perspectivas: termodinámica, mecánica estadística, teoría de la información y teoría ergódica. También se presentan diversas nociones de producción de entropía, tanto en sistemas continuos como discretos, estableciendo conexiones formales entre estos enfoques. Se estudian los sistemas dinámicos disipativos y su papel en la producción de entropía, considerando ejemplos representativos. Realizamos el cálculo explícito de la producción de entropía en el proceso de Ornstein-Uhlenbeck en dos y tres dimensiones, aprovechando su estructura lineal y su representación en términos de procesos estocásticos gaussianos. Finalmente, se presenta una aplicación del aprendizaje de máquinas para la estimación de la producción de entropía en algunos sistemas discretos, explorando el caso de dos osciladores acoplados. Este enfoque evidencia el potencial de las herramientas modernas de inteligencia artificial para abordar problemas complejos en física estadística y termodinámica fuera del equilibrio.

Abstract

This thesis focuses on entropy production and energy dissipation in non-equilibrium systems, drawing on Qian Hong's studies of dissipative systems [1] to analyze the principles of thermodynamics and their mathematical representation. The basic concepts of entropy are introduced from different perspectives, such as thermodynamics, statistical mechanics, information theory, and path theory. In addition, various concepts related to entropy production in continuous and discrete systems are presented, establishing formal connections between these methods. Using representative examples, we study dissipative dynamical systems and their role in entropy production. We use the linear structure of the Ornstein-Uhlenbeck process and the representation of the Gaussian random process to perform explicit calculations of entropy production in two and three dimensions. Finally, we present the application of machine learning to estimate entropy production in some discrete systems, exploring the case of two coupled oscillators. This approach highlights the potential of modern artificial intelligence tools to solve complex problems in statistical physics and thermodynamics of systems in non-equilibrium.

Índice general

Constancia de aprobación de la tesis	III
Créditos Institucionales	V
Acta de examen	VII
Dedicatoria	IX
Agradecimientos	XI
Resumen	XIII
Abstract	XIII
Introducción	1
1 Sistemas dinámicos	5
1.1 Sistemas dinámicos	5
1.1.1 Sistemas dinámicos continuos (ecuaciones diferenciales)	6
1.1.2 Sistemas dinámicos discretos (ecuaciones en diferencias)	10
1.1.3 Sistemas dinámicos hamiltonianos	14
1.1.4 Sistemas dinámicos disipativos	18
1.2 Breve introducción a la teoría de la medida en sistemas dinámicos	19
2 Entropía	25
2.1 Teoría termodinámica	25
2.2 Entropía termodinámica	29
2.3 Entropía de Boltzmann	33
2.4 Entropía de Shannon	35
2.5 Entropía de Kolmogórov-Sinai	36
3 Producción de entropía en sistemas dinámicos disipativos	39
3.1 Producción de entropía en termodinámica	40
3.2 Producción de entropía en teoría ergódica	41
3.2.1 Producción de entropía en cadenas de Márkov	44
3.3 Proceso de Ornstein-Uhlenbeck	46
4 Estimación de producción de entropía con aprendizaje automático	59
4.1 Elementos de aprendizaje de máquina	59
4.1.1 Perceptrón multicapa	60
4.2 Estimación de producción de entropía a través de aprendizaje de máquina	61
4.3 Caso de dos osciladores acoplados	63
Conclusiones y trabajo futuro	67
A Apéndice: Códigos	69
A.1 Simulaciones en Python	69
A.2 Cálculo de producción de entropía en un proceso de Ornstein-Uhlenbeck en dimensión 3.	80
A.3 Estimador de producción de entropía en un sistema de Ornstein-Uhlenbeck	83
Referencias	90

Introducción

La entropía es un concepto fundamental que se encuentra en el corazón de diversas disciplinas científicas. En física, se relaciona con la termodinámica y la mecánica estadística, describiendo la tendencia de los sistemas a alcanzar un estado de equilibrio [2, pp. 329-332]. Además, en teoría de la información, este concepto se emplea para estimar cuánta información está contenida en mensaje o sistema [3, p. 13]. En sistemas dinámicos, se relaciona con la complejidad y la aleatoriedad de los cambios en el estado del sistema que se producen a lo largo del tiempo debido a interacciones internas y externa [4, pp. 1-2].

La interdisciplinariedad de la entropía se extiende aún más, abarcando campos como la física estadística, la mecánica cuántica, la teoría del caos, la biología, la economía y la teoría de la complejidad. Esta generalidad refleja la importancia de la entropía en la comprensión de la naturaleza y la organización de los sistemas complejos, como los ecosistemas o las redes neuronales, que exhiben una alta interconexión. Su estudio permite analizar y comprender la estructura y la evolución de estos sistemas. Todo lo anterior hace destacar la versatilidad y la relevancia del concepto de entropía en la época contemporánea.

La entropía es una medida de la distribución microscópica presente en un sistema físico. En mecánica estadística, la entropía se relaciona con la cantidad de maneras en que las partículas y la energía del sistema pueden organizarse para alcanzar un estado macroscópico dado. En sistemas dinámicos, la entropía se asocia con la complejidad y aleatoriedad del comportamiento del sistema a lo largo del tiempo.

La entropía es una herramienta fundamental para caracterizar y comprender las propiedades intrínsecas de los sistemas. Al cuantificar la distribución microscópica de

un sistema, la entropía proporciona información valiosa sobre su estructura, organización y comportamiento. De esta manera, la entropía sirve como un indicador de propiedades intrínsecas de los sistemas, como su estabilidad, complejidad, irreversibilidad y capacidad para almacenar y procesar información. Al analizar la entropía de un sistema, se pueden obtener perspectivas profundas sobre su naturaleza fundamental y hacer predicciones sobre su comportamiento en diferentes condiciones.

La entropía ha demostrado ser un concepto versátil y fundamental en diversas áreas de la ciencia y la ingeniería. Su aplicación se ha extendido más allá de la termodinámica clásica, donde se originó, incluso permeando campos como la física cuántica, la biología, la economía y la teoría de la complejidad, entre otros. La entropía ha sido utilizada para analizar y comprender fenómenos tan diversos como la degradación de la energía, la transmisión de información, la complejidad de los sistemas biológicos y la dinámica de los mercados financieros. Esto demuestra la amplitud y la profundidad de la influencia de la entropía en nuestra comprensión del mundo natural y artificial.

La comprensión de la entropía en sistemas en equilibrio termodinámico sentó las bases para explorar su comportamiento en sistemas más complejos. Sin embargo, la realidad muestra que muchos sistemas naturales y artificiales operan lejos del equilibrio, exhibiendo comportamientos más ricos y complejos, como los patrones autoorganizados que se observan en células vivas durante procesos metabólicos [5, p. 387] o la dinámica atmosférica que genera tormentas y ciclones [6]. En este contexto, surge la idea de sistemas fuera de equilibrio, donde la entropía ya no es solo una medida de la distribución del sistema, sino que se convierte en una herramienta para describir la producción de entropía, es decir, la tasa a la que se genera entropía en un sistema debido a procesos irreversibles [7]. Esta producción de entropía se convierte en un concepto fundamental para entender la dinámica y la evolución de sistemas complejos, desde la biología hasta la física y la ingeniería.

En un sistema físico, la entropía puede provenir de varias fuentes, como el movimiento aleatorio de las partículas en un gas, la transferencia de calor entre cuerpos a diferentes temperaturas o la conversión de energía mecánica en calor. Según la segunda ley de la termodinámica, la entropía total de un sistema cerrado siempre aumenta con el tiempo. Esto

significa que, en un sistema cerrado, el proceso natural es el de una transferencia de energía desde un estado organizado y ordenado a un estado caótico y desordenado.

En un sistema físico, la entropía evoluciona con el tiempo, aumentando o disminuyendo según las condiciones del sistema. Sin embargo, existe un momento crítico en el que la entropía alcanza un valor máximo, lo que corresponde al estado de equilibrio termodinámico. En este punto, el sistema ha alcanzado la máxima desorganización y aleatoriedad, y cualquier cambio posterior en las condiciones del sistema solo puede llevar a una disminución de la entropía. Este estado de máxima entropía es precisamente el estado de equilibrio, en el que las propiedades del sistema se han estabilizado y no hay cambios netos en su estado [8]. La correspondencia entre el estado de equilibrio y el máximo de entropía es un principio fundamental de la termodinámica, que ha sido ampliamente verificado en una variedad de sistemas físicos.

En un sistema abierto, la entropía puede disminuir a medida que el sistema intercambia energía y materia con el entorno mientras que la entropía del entorno aumente. Por ejemplo, en una central térmica, la combustión de combustible en una caldera produce entropía en forma de calor, que se utiliza para generar trabajo mecánico en una turbina, y finalmente se descarga en forma de calor al ambiente. Sin embargo, el aumento total de entropía en el sistema abierto es mayor que el trabajo mecánico producido debido al calor descargado al ambiente [7]. La producción de entropía en sistemas abiertos refleja cómo los procesos internos y los intercambios con el entorno afectan la evolución de la entropía global.

Añadiendo, la producción de entropía vista desde la termodinámica es un aspecto intrínseco de los sistemas dinámicos, y se relaciona con la transferencia de energía y la organización del sistema. Según la segunda ley de la termodinámica, la entropía total de un sistema cerrado siempre aumenta con el tiempo, mientras que en un sistema abierto, la entropía puede disminuir temporalmente debido a la transferencia de energía y materia con el entorno.

En resumen, la entropía es un concepto fundamental que se encuentra en el corazón de diversas disciplinas científicas. Su estudio y comprensión son cruciales para analizar y

predecir el comportamiento de sistemas complejos en diferentes campos, desde la física y la química hasta la biología y la economía. Es importante destacar que la producción de entropía es un aspecto clave en todos estos campos, y su estudio puede proporcionar valiosas perspectivas sobre la organización, la complejidad y la evolución de los sistemas. Por lo tanto, es fundamental estudiar la producción de entropía en todos los casos mencionados, ya que puede ayudar a desarrollar nuevas teorías, modelos y aplicaciones que mejoren nuestra comprensión del mundo natural y artificial.

La producción de entropía ha sido abordada desde diversas perspectivas, destacando en particular la teoría de la información, donde se utiliza la distancia de Kullback–Leibler para cuantificar la diferencia entre distribuciones de probabilidad [3, pp. 19–20]. No obstante, desde el enfoque de los procesos estocásticos, las contribuciones han sido más limitadas. Entre los resultados conocidos se encuentra la fórmula exacta para la producción de entropía en cadenas de Markov finitas a tiempo discreto [9], así como el caso del proceso de Ornstein–Uhlenbeck, el cual es analizado con mayor detalle en esta tesis (ref: sección), con base en el estudio de [10]. En el ámbito de los sistemas dinámicos, también se han realizado aportes relevantes, como en ciertos sistemas particulares [11], en medidas de Gibbs aplicadas a sistemas simbólicos [12] y [13], y finalmente en sistemas dinámicos continuos de carácter disipativo, los cuales también son tratados en este trabajo a partir del enfoque de [1]. Dado que todas estas aproximaciones ofrecen nociones relacionadas entre sí, el objetivo de esta tesis es presentarlas dentro de un marco común que permita establecer vínculos formales entre ellas. Sin embargo, aunque este planteamiento representa una cuestión significativa, excede el alcance del presente trabajo de tesis.

Capítulo 1

Sistemas dinámicos

En este capítulo introducimos conceptos básicos de distintas clases de sistemas dinámicos para los cuales existen nociones de producción de entropía.

1.1. Sistemas dinámicos

Un sistema dinámico es un sistema compuesto de elementos que evolucionan con el tiempo, de forma discreta o continua. Estos sistemas pueden ser descritos matemáticamente mediante ecuaciones diferenciales, ecuaciones en diferencias o sistemas a trozos discretos, que describen cómo cambian las variables del sistema con el tiempo.

Son una representación matemática de sistemas físicos, biológicos, etc. Un sistema físico se caracteriza por un conjunto de todos los estados en los que puede encontrarse el sistema, conocido como espacio de fases que denotaremos Ω , y en general, consideraremos los sistemas en que en cualquier momento, todas las características del sistema se pueden deducir a partir del estado actual que denotaremos x y que cumple $x \in \Omega$. También, para esto y para observar el sistema, se emplean funciones de valor real en Ω , conocidas como observables, que pueden ser, por ejemplo, coordenadas de posición. Por lo general, Ω será un espacio métrico, donde la distancia definida nos permite hablar de estados cercanos. Aunque, en ciertas situaciones físicas, pueden existir estructuras adicionales en Ω , como espacios euclidianos, variedades riemannianas o espacios de Hilbert [14, pp. 79–80].

1.1.1. Sistemas dinámicos continuos (ecuaciones diferenciales)

Un ejemplo de representación de un sistema dinámico simple es el dado por una ecuación diferencial ordinaria autónoma de la forma

$$\dot{x} = f(x), \quad (1.1)$$

donde x representa el estado del sistema en un momento dado, es decir, al tiempo t , \dot{x} representa la velocidad a la que está cambiando la variable de estado x , y $f(x)$ define como el estado del sistema cambia con el tiempo [15, pp. 95–96].

Ejemplo 1.1 (Péndulo simple). Un caso de sistema dinámico es un péndulo simple como el de la figura 1.1, y como se muestra en [16, pp. 414–416] puede ser descrito mediante la ecuación del movimiento angular que es una ecuación diferencial ordinaria autónoma de segundo orden no lineal:

$$\ddot{\theta}(t) + \frac{g}{L} \sin(\theta(t)) = 0 \quad (1.2)$$

donde $\theta(t)$ es el ángulo del péndulo en función del tiempo, g es la aceleración debida a la gravedad y L es la longitud del péndulo. Para visualizar las trayectorias, en la figura 1.2 se puede visualizar la simulación de la ecuación para distintas condiciones iniciales.

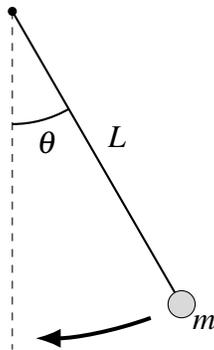


Figura 1.1: Péndulo simple

La solución a esta ecuación diferencial ordinaria no lineal es la función $\theta(t)$, que describe cómo el ángulo del péndulo cambia con el tiempo. Y esta función puede ser utilizada para predecir el comportamiento del péndulo en el futuro.

Ahora, aplicando un cambio de variable, como se describe en [16, pp. 414–416], se reduce el orden de la ecuación. Es decir, haciendo $\omega = \dot{\theta}$ y considerando la regla de la cadena

$$\ddot{\theta} = \dot{\omega} = \frac{d\omega}{dt} = \frac{d\omega}{d\theta} \frac{d\theta}{dt} = \dot{\theta} \frac{d\omega}{d\theta} = \omega \frac{d\omega}{d\theta} \quad (1.3)$$

se obtiene la ecuación

$$\omega \frac{d\omega}{d\theta} + \frac{g}{L} \sin(\theta) = 0 \quad (1.4)$$

con variables ω y θ . Luego, separando la ecuación e integrando respecto a θ y considerando $\theta(t_0) = \theta_0$ y $\dot{\theta}(t_0) = \omega_0$ queda

$$\int_{\theta_0}^{\theta} \omega \frac{d\omega}{d\theta} d\theta = -\frac{g}{L} \int_{\theta_0}^{\theta} \sin(\theta) d\theta \quad (1.5)$$

y como $(d\omega/d\theta) d\theta = d\omega$ se puede reescribir

$$\int_{\omega_0}^{\omega} \omega d\omega = -\frac{g}{L} \int_{\theta_0}^{\theta} \sin(\theta) d\theta \quad (1.6)$$

que realizando las integrales queda

$$\frac{1}{2}(\omega^2 - \omega_0^2) = \frac{g}{L} [\cos(\theta) - \cos(\theta_0)]. \quad (1.7)$$

Ahora, regresando a las variables θ y t se escribe

$$\frac{1}{2}(\dot{\theta}^2 - \omega_0^2) = \frac{g}{L} [\cos(\theta) - \cos(\theta_0)] \quad (1.8)$$

y despejando $\dot{\theta}$ se obtiene

$$\dot{\theta} = \pm \sqrt{\frac{2g}{L} [\cos(\theta) - \cos(\theta_0)] + \omega_0^2}. \quad (1.9)$$

Luego, reordenando la ecuación e integrando respecto a t queda

$$\int_{t_0}^t dt = \pm \int_{t_0}^t \frac{\dot{\theta} dt}{\sqrt{(2g/L)[\cos(\theta) - \cos(\theta_0)] + \omega_0^2}} \quad (1.10)$$

y como $\dot{\theta} dt = d\theta$ se puede escribir

$$t - t_0 = \pm \int_{\theta_0}^{\theta} \frac{d\theta}{\sqrt{(2g/L)[\cos(\theta) - \cos(\theta_0)] + \omega_0^2}}. \quad (1.11)$$

Ahora, para resolver esta integral, usando la identidad $\cos(\theta) = 1 - 2\text{sen}^2(\theta/2)$ y desarrollando se obtiene

$$t - t_0 = \pm \int_{\theta_0}^{\theta} \frac{d\theta}{\sqrt{(4g/L)\text{sen}^2(\theta_0/2) - (4g/L)\text{sen}^2(\theta/2) + \omega_0^2}}. \quad (1.12)$$

Factorizando $(g/L)\text{sen}^2(\theta_0) + \omega_0^2$, además de cambiando el diferencial de integración $d\theta$ por $2d(\theta/2)$, se puede reescribir como

$$t - t_0 = \pm \frac{2}{\sqrt{(4g/L)\text{sen}^2(\theta_0/2) + \omega_0^2}} \int_{\theta_0/2}^{\theta/2} \frac{d(\theta/2)}{\sqrt{1 - k^2\text{sen}^2(\theta/2)}}, \quad (1.13)$$

donde

$$k = \frac{1}{\sqrt{\text{sen}^2(\theta_0/2) + L\omega_0^2/(4g)}}. \quad (1.14)$$

Comparando con la integral elíptica incompleta de primera especie

$$F(\phi, k) = \int_0^{\phi} \frac{dx}{\sqrt{1 - k^2\text{sen}^2 x}} \quad (1.15)$$

tenemos

$$t - t_0 = \pm \frac{1}{\sqrt{(g/L)\text{sen}^2(\theta_0/2) + \omega_0^2/4}} \left[F\left(\frac{\theta}{2}, k\right) - F\left(\frac{\theta_0}{2}, k\right) \right]. \quad (1.16)$$

Luego, comenzando a despejar θ se obtiene

$$F\left(\frac{\theta}{2}, k\right) = \pm \sqrt{\frac{g}{L}\text{sen}^2\left(\frac{\theta_0}{2}\right) + \frac{\omega_0^2}{4}}(t - t_0) + F\left(\frac{\theta_0}{2}, k\right) \quad (1.17)$$

e invirtiendo la integral elíptica con la amplitud elíptica $\text{am}(F, k)$ se deduce la solución

$$\theta(t) = 2 \text{am} \left(\sqrt{\frac{g}{L} \sin^2 \left(\frac{\theta_0}{2} \right) + \frac{\omega_0^2}{4} (t - t_0) + F \left(\frac{\theta_0}{2}, k \right)}, k \right) \quad (1.18)$$

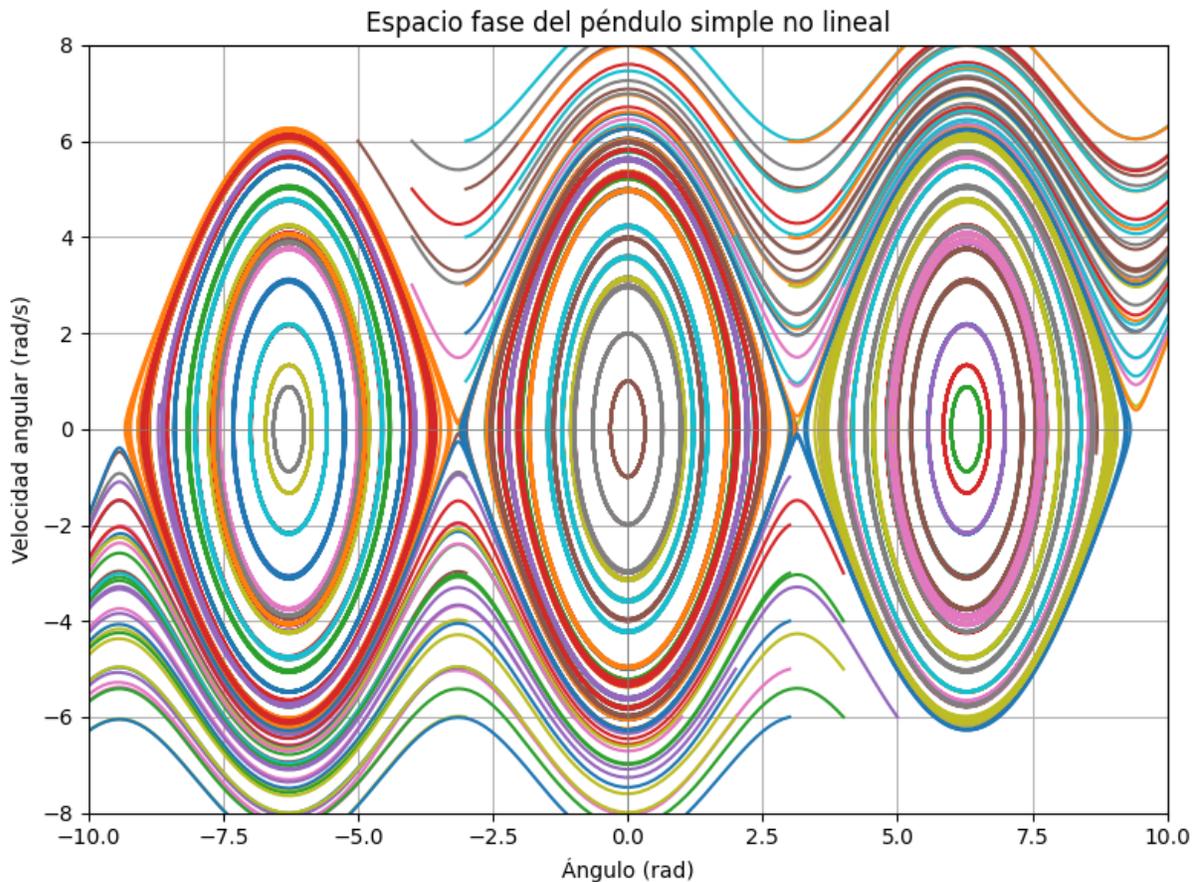


Figura 1.2: Espacio fase de péndulo simple no lineal dado en la ecuación (1.2) simulado en Python con el código dado en el anexo A.1.

Ejemplo 1.2 (Sistema de Lorenz). Otro sistema dinámico es el sistema de Lorenz. Edward Lorenz [6] buscaba modelar el comportamiento de la atmósfera, en particular la convección térmica, es decir, el movimiento del aire caliente que asciende y el aire frío que desciende. Para ello, simplificó las ecuaciones de la dinámica de fluidos en un sistema de tres ecuaciones

diferenciales no lineales que capturaban las características esenciales del fenómeno sin necesidad de una descripción completa del flujo. Es un sistema dinámico no lineal descrito por el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias:

$$\begin{cases} \dot{x} = \sigma(y - x) \\ \dot{y} = x(\rho - z) - y \\ \dot{z} = xy - \beta z \end{cases} \quad (1.19)$$

donde x , y , z son las variables del sistema y σ , ρ , β son constantes positivas. El sistema de Lorenz es conocido por tener soluciones caóticas, es decir, soluciones que son altamente sensibles a las condiciones iniciales. Para visualizar las trayectorias, en la figura 1.3 se muestran distintas proyecciones del espacio fase del sistema dado por estas ecuaciones. Lorenz empleó los valores $\sigma = 10$, $\beta = 8/3$ y $\rho = 28$ en su sistema, observando que bajo estas condiciones —y en un entorno de valores cercanos— el sistema presentaba un comportamiento caótico. Es decir, aunque el sistema está regido por ecuaciones deterministas, muestra una sensibilidad extrema a las condiciones iniciales, lo que vuelve impredecible su comportamiento a largo plazo. Este hallazgo marcó un punto de quiebre en la comprensión de los sistemas dinámicos, al revelar que incluso modelos matemáticos simples pueden generar dinámicas complejas e impredecibles. La elección de estos parámetros permitió visualizar el atractor de Lorenz, símbolo del caos determinista, el cual se observa en la figura 1.3 y dejó claro que pequeños cambios en las condiciones o parámetros pueden tener consecuencias significativas.

En general, los sistemas dinámicos son herramientas valiosas para modelar y comprender una amplia variedad de fenómenos en la naturaleza y en la ingeniería, desde la dinámica de los fluidos hasta la economía y la ecología.

1.1.2. Sistemas dinámicos discretos (ecuaciones en diferencias)

Un sistema dinámico discreto es, desde un punto de vista matemático, representado por una ecuación en diferencias. Por ejemplo, por una ecuación en diferencias de primer orden de la forma

$$x_{k+1} = f(x_k), \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (1.20)$$

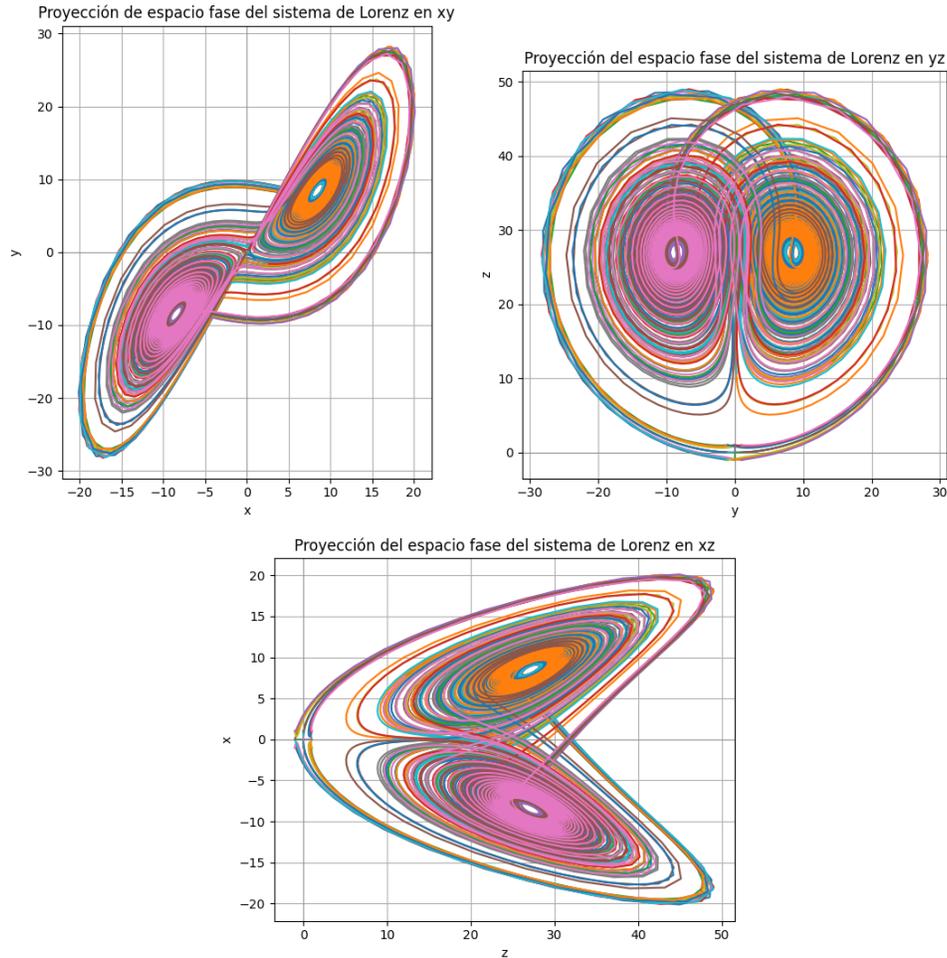


Figura 1.3: Espacio fase del sistema de Lorenz dado en el sistema de ecuaciones (1.19) simulado en Python con el código dado en el anexo A.1.

donde x_{k+1} se encuentra con el valor de x_k y f es una función definida en cierto conjunto X , es decir, $f : X \rightarrow X$.

Luego, si usamos el valor x_0 como inicial, entonces la iteración de la ecuación (1.20) generará la secuencia de valores

$$O(x_0) = x_0, x_1, x_2, \dots, x_{k-1}, x_k, x_{k+1}, \dots \quad (1.21)$$

que es una trayectoria o solución de la ecuación en diferencias con condición inicial x_0 . También es llamada órbita de x_0 bajo f .

Ejemplo 1.3 (Mapeo logístico). Un sistema dinámico discreto puede observarse en el mapeo logístico que originalmente se pretendía usar como modelo de población [17, pp. 338–340] y puede ser descrito por la ecuación en diferencias

$$x_{n+1} = rx_n(1 - x_n) \quad (1.22)$$

donde x es la variable dinámica y r el parámetro de control. En la figura 1.4 se puede visualizar una simulación de la ecuación (1.22) donde se observa un comportamiento caótico y en la figura 1.5 un diagrama de cobweb que muestra uno de los comportamientos de bifurcación.

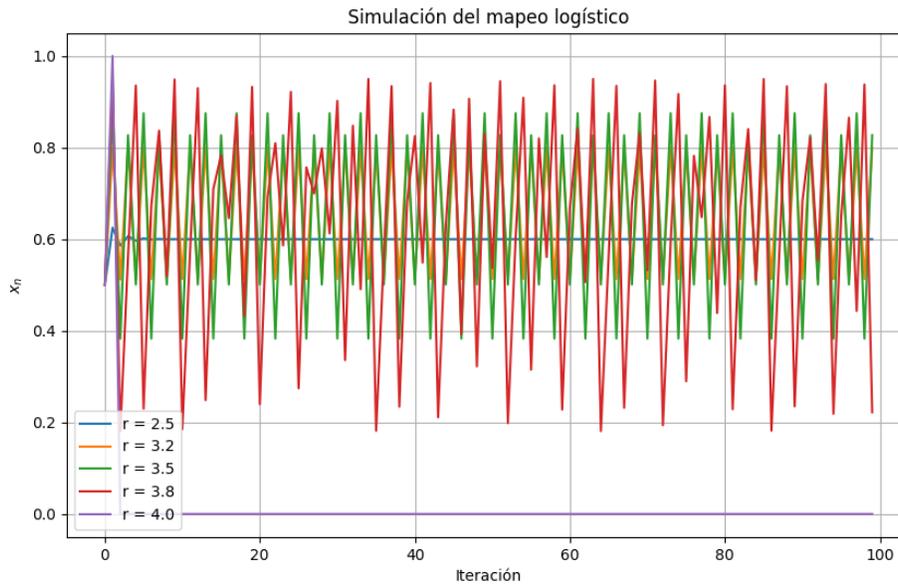


Figura 1.4: Simulación del mapeo logístico basada en la ecuación (1.22) con el código dado en el anexo A.1.

El estudio del mapeo logístico es fundamental en la teoría de sistemas dinámicos no lineales, ya que permite explorar una amplia gama de comportamientos dinámicos mediante la simple variación de su parámetro de control. Este modelo, a pesar de su sencillez, exhibe una rica variedad de fenómenos que van desde estados estacionarios hasta comportamientos periódicos crecientemente complejos, culminando en el comportamiento caótico, caracterizado por la ausencia de periodicidad. Esta transición del orden al caos ilustra

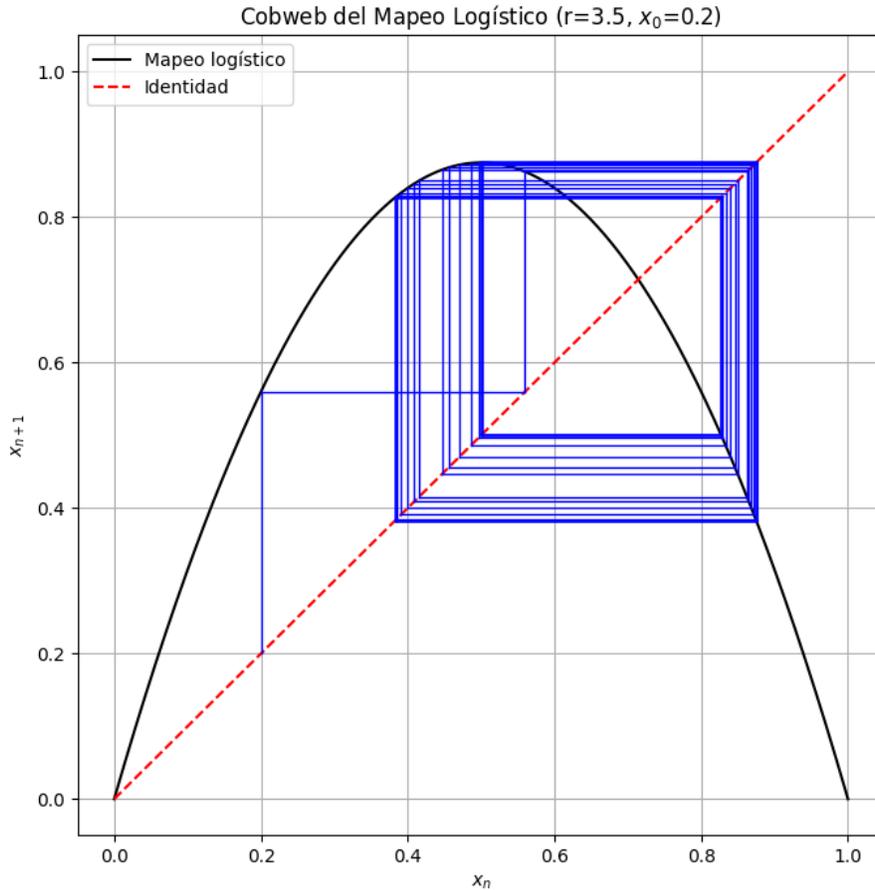


Figura 1.5: Diagrama cobweb del mapeo logístico basada en la ecuación (1.22) con el código dado en el anexo A.1.

cómo sistemas aparentemente simples pueden generar dinámicas impredecibles, lo que hace del mapa logístico una herramienta didáctica y representativa para introducir conceptos clave como bifurcaciones, atractores y sensibilidad a las condiciones iniciales en el estudio de la dinámica no lineal.

Ejemplo 1.4 (Mapeo de Hénon). El mapeo de Hénon propone un modelo reduccionista capaz de reproducir de modo computacionalmente más simple los resultados provenientes del modelo de Lorenz. En su forma más sencilla puede expresarse como

$$\begin{cases} x_{k+1} = 1 + y_k - \alpha x_k^2 \\ y_{k+1} = \beta x_k \end{cases} \quad (1.23)$$

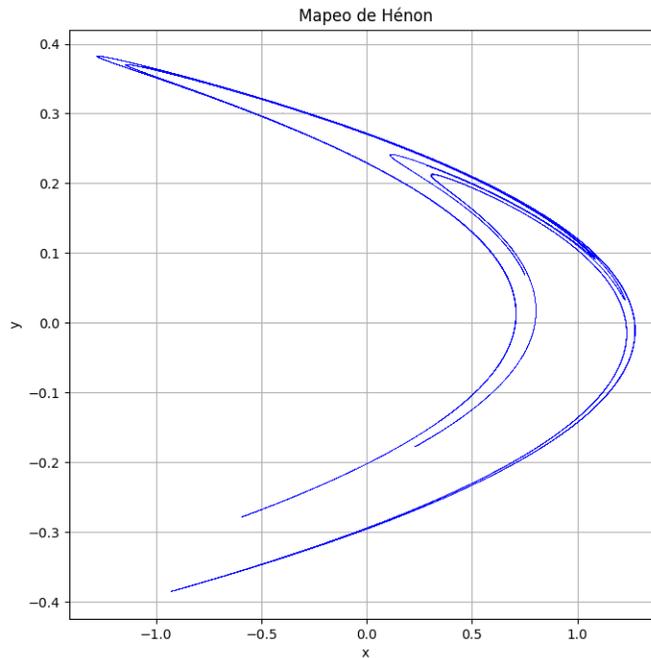


Figura 1.6: Simulación en Python del mapeo de Hénon dado por las ecuaciones (1.23) con el código dado en el anexo A.1.

donde $\alpha > 0$ y $|\beta| < 1$ [18]. Usualmente se usan los valores $\alpha = 1.4$ y $\beta = 0.3$.

El mapeo de Hénon exhibe varios comportamientos por lo que puede ser periódico, caótico y una marcada sensibilidad a las condiciones iniciales. Además, este sistema puede presentar fenómenos de histéresis y bistabilidad.

En la figura 1.6 se puede observar la simulación de una trayectoria generada por las ecuaciones (1.23) con condiciones iniciales $x_0 = 0$ y $y_0 = 0$.

1.1.3. Sistemas dinámicos hamiltonianos

En esta sección se aborda un tipo particular de sistemas que aparecen en la mecánica clásica: los sistemas hamiltonianos. La formulación hamiltoniana no solo describe la dinámica acorde con las ecuaciones de Newton, sino que también revela una estructura matemática rica que ha sido fundamental para el desarrollo de gran parte de la investigación

de sistemas dinámicos.

Primero, se puede definir una función escalar derivable en \mathbb{R}^2 como

$$H = H(q, p), \quad (q, p) \in \mathbb{R}^2 \quad (1.24)$$

donde $H : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ y $H \in C^1$. A la función H se le llama función de Hamilton, función hamiltoniana o simplemente hamiltoniano [17, p. 281] [18, p. 146].

La importancia de los sistemas hamiltonianos es que tienen un tipo de “ley de conservación” incorporada. La cantidad que los describe, llamada función hamiltoniana, no cambia con el tiempo mientras el sistema evoluciona. Es como si el sistema tuviera una energía que permanece intacta a lo largo de su movimiento.

Cuando un sistema es hamiltoniano, podemos entender su comportamiento sin resolver las ecuaciones por completo. Basta con trazar las curvas donde la función H tiene un valor constante sin que sea constante en alguna región abierta que contenga las curvas, ya que las trayectorias del sistema siguen esas líneas. Luego, con ayuda del campo vectorial, se describe hacia dónde se mueven.

Además, los puntos donde el sistema se equilibra coinciden con los lugares donde H no cambia, es decir, donde sus derivadas parciales se anulan.

Del hamiltoniano, las ecuaciones de Hamilton toman la siguiente forma:

$$\begin{cases} \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}(q, p), \\ \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}(q, p), \end{cases} \quad (1.25)$$

donde $\partial/\partial x$ indica la derivada parcial respecto a x .

Aplicando la regla de la cadena se tiene

$$\dot{H} = \frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial q} \dot{q} + \frac{\partial H}{\partial p} \dot{p} = \frac{\partial H}{\partial q} \frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial H}{\partial p} \frac{\partial H}{\partial q} = 0, \quad (1.26)$$

lo cual dice que la forma de las ecuaciones de Hamilton implica que el hamiltoniano es una constante en las trayectorias.

Además, se puede definir el conjunto de niveles constantes del hamiltoniano como

$$H_E = \{(q, p) \in \mathbb{R}^2 \mid H(q, p) = E\}, \quad (1.27)$$

donde E es un valor constante del hamiltoniano.

En términos generales, los conjuntos de nivel del hamiltoniano forman una curva, o en algunos casos, un punto de equilibrio. Por eso, en el plano bidimensional, las trayectorias que describen las ecuaciones de Hamilton coinciden con estos conjuntos de nivel.

Ejemplo 1.5 (La silla hamiltoniana). La silla hamiltoniana es un ejemplo clásico de sistema hamiltoniano que ilustra cómo se mueve una partícula sobre una superficie con forma de silla de montar.

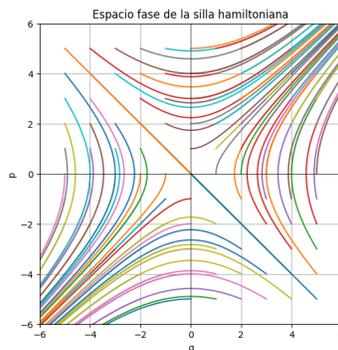


Figura 1.7: Espacio fase de la silla hamiltoniana dada por las ecuaciones (1.29) realizado con una simulación en Python [18] con el código dado en el anexo A.1.

Consideremos al hamiltoniano

$$H(q, p) = \frac{\lambda}{2}(p^2 - q^2), \quad (q, p) \in \mathbb{R}^2 \quad (1.28)$$

con $\lambda > 0$ como parámetro del sistema. De este hamiltoniano, derivamos las ecuaciones de

Hamilton

$$\begin{cases} \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}(q, p) = \lambda p \\ \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q}(q, p) = \lambda q. \end{cases} \quad (1.29)$$

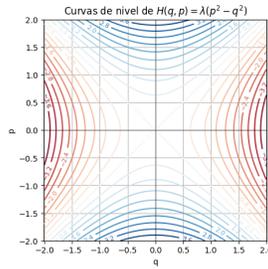


Figura 1.8: Curvas de nivel de la silla hamiltoniana dada por el hamiltoniano (1.28) realizadas con una simulación en Python [18] con el código dado en el anexo A.1.

En la figura 1.7 se pueden observar algunas trayectorias en el espacio fase del sistema con una variedad de condiciones iniciales. En la figura 1.8 se pueden observar las curvas de nivel en las cuales el hamiltoniano (1.28) toma un valor constante. Y en la figura 1.9 se puede observar la superficie generada por el hamiltoniano (1.28).

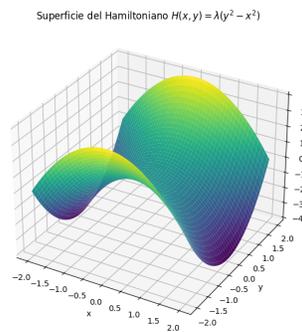


Figura 1.9: Superficie generada por el hamiltoniano de la silla hamiltoniana dada por el hamiltoniano (1.28) realizada con una simulación en Python con el código dado en el anexo A.1.

1.1.4. Sistemas dinámicos disipativos

Sean $x \in \mathbb{R}^n$ y $V \in C^1 : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, consideramos el sistema dinámico hamiltoniano

$$\dot{x} = V(x) \tag{1.30}$$

donde x representa una única variable que puede interpretarse como la coordenada de un punto que se desplaza a lo largo de una trayectoria con el paso del tiempo. Estas trayectorias se denomina espacio de fases. En términos generales, el espacio de fases es un espacio vectorial en el que cada punto (o vector) proporciona una descripción instantánea del estado del sistema dinámico en un momento dado. Si el sistema tiene múltiples variables, cada una de ellas corresponde a una componente del vector en el espacio de fases. En este contexto, la función $V(x)$ es el campo vectorial, ya que asigna a cada punto x del espacio de fases un vector que indica la dirección y magnitud del cambio temporal de x . Este campo vectorial determina la evolución del sistema y describe cómo se mueve el punto en el espacio de fases con el tiempo.

A diferencia de los sistemas conservativos —como los hamiltonianos—, donde la energía total se mantiene constante y no se genera entropía, los sistemas disipativos integran de manera explícita mecanismos de pérdida o intercambio de energía. Estos mecanismos pueden ser la fricción, la difusión o la interacción con un entorno térmico. Por eso, los sistemas disipativos son el marco natural para estudiar fenómenos irreversibles.

La entropía, en este contexto, refleja justamente ese carácter irreversible: su producción indica qué tanto se aleja un sistema de un comportamiento idealmente reversible o conservativo [19]. Así que, si queremos entender cómo evolucionan los sistemas reales —que casi siempre están en contacto con su entorno y tienden hacia el equilibrio—, necesitamos ir más allá del enfoque hamiltoniano y trabajar con modelos que incluyan disipación.

Esta ampliación del marco teórico nos permite incorporar la segunda ley de la termodinámica a la dinámica del sistema, y así analizar, de forma cuantitativa, cómo se genera entropía como parte esencial del proceso.

Definición 1.1 (Sistema disipativo). Se puede asumir que el sistema dado en la ecuación (1.30) tiene una función de energía $H \in C^1 : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ que sea disipativa al cumplir las condiciones:

$$H(x) \geq 0; \quad (1.31)$$

luego, considerando $\Omega_{h^*} = \{x \in \mathbb{R}^n \mid H(x) \leq h^*\}$, para todo $x \in \bar{\Omega}_{h^*}$ existe $h^* > 0$ tal que $H(x) > 0, \nabla H(x) \neq 0$ y

$$\dot{H}(x) = V(x) \cdot \nabla H(x) \leq 0; \quad (1.32)$$

y existe un conjunto

$$I \subset \{x \in \bar{\Omega}_{h^*} \mid \dot{H}(x) = 0\} \quad (1.33)$$

que es invariante respecto al flujo ϕ^t generado por el sistema (1.30).

1.2. Breve introducción a la teoría de la medida en sistemas dinámicos

La teoría de la medida en sistemas dinámicos se centra en el estudio de las medidas en espacios de fase de sistemas dinámicos continuos y discretos. Estos sistemas pueden ser deterministas o estocásticos y pueden incluir desde una partícula en un campo gravitatorio hasta un sistema de ecuaciones diferenciales complejo.

Primero, una σ -álgebra es una estructura matemática que nos permite definir qué conjuntos son medibles, es decir, sobre cuáles se puede aplicar una medida (como las conocidas longitud, área, probabilidad, etc.) de forma coherente.

Y de forma formal se puede enunciar la siguiente definición.

Definición 1.2 (σ -álgebra). Sea X un conjunto no vacío (por ejemplo, el espacio de estados). Una σ -álgebra \mathcal{B} sobre X es una colección no vacía de subconjuntos de X que cumple tres propiedades:

1. Contiene el espacio total: $X \in \mathcal{B}$.
2. Cerrada bajo complemento: Si $A \in \mathcal{B} \Rightarrow X \setminus A \in \mathcal{B}$.

3. Cerrada bajo uniones numerables: Si $A_1, A_2, A_3, \dots \in \mathcal{B} \Rightarrow \bigcup_{n=1}^{\infty} A_n \in \mathcal{B}$.

Para el intervalo $X = [0, 1]$ se tiene como ejemplo de σ -álgebra, la σ -álgebra de Borel dada a continuación.

Ejemplo 1.6 (σ -álgebra de Borel). Denotada \mathcal{B}_b , es la menor σ -álgebra que contiene todos los intervalos abiertos de \mathbb{R} , es decir:

$$\mathcal{B}_b(\mathbb{R}) = \sigma((a, b) | a, b \in \mathbb{R}, a < b) \quad (1.34)$$

Esto significa que cualquier conjunto que se pueda construir a partir de intervalos abiertos mediante un número finito o numerable de uniones, intersecciones y complementos está en la σ -álgebra de Borel.

Luego, con el concepto σ -álgebra se comienza definiendo una medida como sigue.

Definición 1.3 (Medida). Una medida μ en un sistema dinámico es una función que asigna un número real no negativo a ciertos subconjuntos A del espacio de estados X , cumpliendo cierta propiedad:

$$\mu : \mathcal{B} \rightarrow [0, \infty] \quad (1.35)$$

donde \mathcal{B} es una σ -álgebra de subconjuntos de X (es decir, los conjuntos "medibles").

Para observar la intuición sobre el concepto de medida se revisa el siguiente ejemplo.

Ejemplo 1.7 (Medida de Lebesgue). Denotada λ , es una función $\lambda : \mathcal{L} \rightarrow [0, \infty]$, donde \mathcal{L} es la σ -álgebra de Lebesgue, y cumple cuatro propiedades:

1. No negatividad: $\lambda(A) \geq 0$ para todo conjunto medible A .
2. Aditividad numerable: Si $\{A_i\}$ es una colección de conjuntos disjuntos, entonces

$$\lambda \left(\bigcup_{i=1}^{\infty} (A_i) \right) = \sum_{i=1}^{\infty} \lambda(A_i). \quad (1.36)$$

3. Normalización: $\lambda([0, 1]) = 1$ si se desea interpretar como una medida de probabilidad.

4. Invarianza traslacional: $\lambda(A + x) = \lambda(x)$, $\forall x \in \mathbb{R}$.

Se puede interpretar la medida de Lebesgue como una forma general de asignar un tamaño a los conjuntos, por ejemplo, extendiendo las nociones de longitud, área o volumen, pero también aplicable a conjuntos irregulares.

Como señala Walters [4, p. 1],

El objetivo de la teoría ergódica es estudiar el comportamiento medio a largo plazo de los sistemas dinámicos desde el punto de vista de la teoría de la medida. Para ello dotamos al espacio de fases de una medida de probabilidad invariante bajo la dinámica del sistema.

Así, para estudiar sistemas dinámicos desde el enfoque de la teoría de la medida, es necesario dotar al espacio de fase de una estructura adicional: la de un espacio de probabilidad. Esto implica definir una σ -álgebra de subconjuntos del espacio de fase y una medida de probabilidad que permita asignar valores a dichos conjuntos de manera coherente. Esta estructura probabilística es esencial para analizar la evolución estadística de las trayectorias del sistema, especialmente en contextos donde el comportamiento individual de las órbitas es complejo o caótico. Al considerar distribuciones de probabilidad en lugar de trayectorias deterministas, se pueden estudiar conceptos como medidas invariantes y la ergodicidad, que permiten describir el comportamiento a largo plazo de los sistemas dinámicos desde una perspectiva estadística, así como la entropía y la producción de entropía, que son de interés en esta tesis.

Definición 1.4 (Medida de probabilidad). Denotada \mathbb{P} , es una función $\mathbb{P} : \mathcal{B} \rightarrow [0, 1]$, donde \mathcal{B} es una σ -álgebra de un espacio Ω , y cumple tres propiedades:

1. No negatividad: $\mathbb{P}(A) \geq 0$ para todo conjunto medible $A \in \mathcal{B}$.
2. Aditividad numerable: Si $\{A_i\}$ es una colección de conjuntos disjuntos, entonces

$$\mathbb{P} \left(\bigcup_{i=1}^{\infty} (A_i) \right) = \sum_{i=1}^{\infty} \mathbb{P}(A_i). \quad (1.37)$$

3. Normalización: $\mathbb{P}(\Omega) = 1$.

Ahora, formalmente, en [4, p. 19] se introduce la definición siguiente.

Definición 1.5 (Medida invariante). Sea (X, \mathcal{B}, μ) un espacio de medida, y sea $T : X \rightarrow X$ una función (por ejemplo, una transformación del sistema dinámico, también llamada dinámica). La medida μ se dice invariante bajo T si para todo conjunto medible $A \subseteq X$, se cumple que

$$\mu(T^{-1}(A)) = \mu(A) \quad (1.38)$$

En el contexto de sistemas dinámicos continuos, una medida asigna un número —interpretado como probabilidad o densidad— a subconjuntos del espacio fase del sistema.

Ejemplo 1.8 (Medida de Liouville). Denotandola μ_L y sean $(q, p) \in \mathbb{R}^{2n}$ y $\rho \geq 0$, se define como el producto del volumen del elemento de fase por la densidad de probabilidad en ese punto, es decir, $\mu_L = \rho(q, p, t) dq^n dp^n$.

Y es invariante dado que

$$\mu_L(T^{-1}(A)) = \mu(A), \quad \forall A \in \mathbb{R}^{2n} \quad (1.39)$$

donde T es la dinámica del sistema.

Por otro lado, en un sistema dinámico discreto, la medida también asigna valores numéricos a los distintos estados del sistema. Se dice que una medida es invariante si dicha distribución no varía a lo largo de la evolución temporal del sistema.

Ejemplo 1.9 (Medida de Perron-Frobenius). Corresponde al estado estacionario de una matriz de transición estocástica. Dada una transformación $T : X \rightarrow X$ que actúa sobre un espacio medible (X, B) , es una medida invariante μ que puede obtenerse como límite del proceso iterativo definido por el operador \mathcal{P} dado por

$$(\mathcal{P}f)(x) = \sum_{y=T^{-1}(x)} \frac{f(y)}{|\det(DT(y))|} \quad (1.40)$$

donde $T^{-1}(x)$ es el conjunto de preimágenes de x bajo T , $DT(y)$ es la derivada (jacobiano) de T en y y $|\det(DT(y))|$ es el factor de expansión local de T en y .

Por ejemplo, para calcular el operador de Perron-Frobenius para $f(x) = 4x(1-x)$, primero se calcula la preimagen de $[0, x]$ bajo $f(x)$. En $f(y) = 0$ se tiene

$$4y(1-y) = 0 \quad \Rightarrow \quad y_1 = 0, \quad y_2 = 1 \quad (1.41)$$

En $f(y) = x$ se tiene

$$4y(1-y) = x \Rightarrow -4y^2 + 4y - x = 0 \Rightarrow y_3 = \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{1-x}, y_4 = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{1-x} \quad (1.42)$$

Por lo que, la preimagen es

$$f^{-1}([0,x]) = \left[0, \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{1-x}\right] \cup \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{1-x}, 1\right] \quad (1.43)$$

Usando

$$Pf(x) = \frac{d}{dx} \int_{S^{-1}([0,x])} f dy \quad (1.44)$$

se tiene que

$$\begin{aligned} Pf(x) &= \frac{d}{dx} \int_{\left[0, \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{1-x}\right] \cup \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{1-x}, 1\right]} f dy \\ &= \frac{d}{dx} \left(\int_0^{\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{1-x}} f dy + \int_{\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{1-x}}^1 f dy \right) \\ &= \frac{d}{dx} \int_0^{\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{1-x}} f dy + \frac{d}{dx} \int_{\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{1-x}}^1 f dy \end{aligned} \quad (1.45)$$

Y usando la derivación bajo el signo integral

$$\begin{aligned} Pf(x) &= \int_0^{\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{1-x}} \frac{df}{dx} dy + \int_{\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{1-x}}^1 \frac{df}{dx} dy \\ &= f\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{1-x}\right) \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{1-x}\right) - f(0) \frac{d0}{dx} \\ &\quad + f(1) \frac{d1}{dx} - f\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{1-x}\right) \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{1-x}\right) \\ &= f\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{1-x}\right) \left(\frac{1}{4\sqrt{1-x}}\right) - f\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{1-x}\right) \left(-\frac{1}{4\sqrt{1-x}}\right) \\ &= \frac{1}{4\sqrt{1-x}} \left[f\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{1-x}\right) + f\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{1-x}\right) \right] \end{aligned} \quad (1.46)$$

En sistemas dinámicos también se incluye el estudio de las medidas singulares, que son aquellas que tienen puntos de medida cero en un conjunto no medible de puntos en el espacio de fase. Estas medidas son importantes en el estudio de fenómenos caóticos, ya que pueden proporcionar información sobre los puntos de bifurcación y la estabilidad del sistema. En resumen, su importancia radica en que permite analizar y entender la evolución y estabilidad de estos sistemas.

Por otro lado, una medida ergódica es un tipo especial de medida invariante en un sistema dinámico que describe la situación en la que el comportamiento a largo plazo de una órbita individual refleja el comportamiento promedio del sistema completo.

Entonces, en [4, p. 26], se puede llegar a la definición siguiente.

Definición 1.6 (Medida ergódica). Sea (X, T, \mathcal{B}, μ) un sistema dinámico medible, donde X es el espacio de estados, \mathcal{B} es una σ -álgebra de subconjuntos de X , $T : X \rightarrow X$ es la dinámica del sistema y μ es una medida invariante bajo la transformación T . La medida μ se dice ergódica si toda función medible $f : X \rightarrow \mathbb{R}$ que es invariante bajo T (es decir, $f(T(x)) = f(x)$ casi en todas partes) es constante casi en todas partes. Además, el sistema se dice que presenta ergodicidad.

Teorema 1.1 (Teorema ergódico de Birkhoff). Sea (X, \mathcal{B}, μ) un espacio de con medida de probabilidad, y sea $T : X \rightarrow X$ una transformación medible con medida invariante.

Entonces, para toda función integrable $f \in L^1(\mu)$, se cumple que:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} f(T^k(x)) = f_i(x) \quad (1.47)$$

existe para casi todo $x \in X$, donde $f_i(x)$ es una función invariante bajo T .

Por lo tanto, la ergodicidad del sistema garantiza que el sistema no puede dividirse en partes más pequeñas que evolucionen de forma independiente. Así, los promedios temporales a lo largo de una órbita coinciden con los promedios espaciales respecto a la medida.

Capítulo 2

Entropía

2.1. Teoría termodinámica

Como se menciona en [20], para introducir el concepto de entropía, se puede comenzar con uno previo, el concepto de sistema termodinámico. Se define a un sistema termodinámico como una porción del espacio, y todo lo que contiene, que se encuentra delimitado por una superficie cerrada, como se puede ver en la figura 2.1. Esta superficie lo separa del resto del universo, al que comúnmente se le llama medio exterior o entorno. La superficie que encierra al sistema puede ser real, como en el caso de un gas contenido dentro de un cilindro, o bien imaginaria, es decir, una frontera conceptual que se introduce para facilitar el análisis del sistema.

Para que un sistema sea tratado mediante los principios de la termodinámica, debe tener dimensiones lo suficientemente grandes y un número de partículas lo suficientemente grande como para que sea posible definir en él propiedades macroscópicas —como la temperatura, presión o volumen— que son el resultado de promediar el comportamiento de un número enorme de partículas.

Los límites del sistema, también llamados superficies de separación, pueden tener distintas características: pueden ser rígidos, si no cambian de forma o tamaño, o deformables, si pueden cambiar bajo la acción de fuerzas externas o internas. Además, estas superficies pueden permitir o impedir el intercambio de energía (como calor o trabajo) y/o materia con

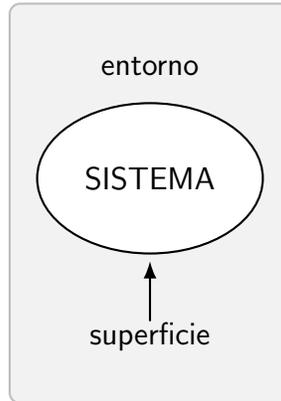


Figura 2.1: Esquema de un sistema termodinámico.

el entorno.

En función de su capacidad para intercambiar calor, una superficie puede clasificarse como:

- Diatérmica, si permite el paso del calor entre el sistema y el entorno.
- Adiabática, si impide cualquier transferencia de calor.

Así como se puede observar en la figura 2.2.



Figura 2.2: Tipos de superficies de separación térmicas.

A partir del tipo de intercambios que el sistema realiza con el medio exterior, se distinguen tres tipos principales de sistemas termodinámicos:

- Sistema cerrado, si intercambia energía (calor y/o trabajo) con su entorno, pero no intercambia materia. Un ejemplo típico sería un cilindro con gas sellado herméticamente, pero con un émbolo que puede moverse permitiendo que el gas realice trabajo.
- Sistema abierto, si puede intercambiar tanto energía como materia con el entorno. Un ejemplo sería una taza de café caliente, que intercambia calor con el aire y puede evaporar parte del líquido, intercambiando materia.
- Sistema aislado, si no intercambia ni energía ni materia con su entorno. En la práctica, los sistemas perfectamente aislados no existen, pero se pueden aproximar, como una bebida colocada en un termo bien cerrado.

Así como puede observarse en la figura 2.3.

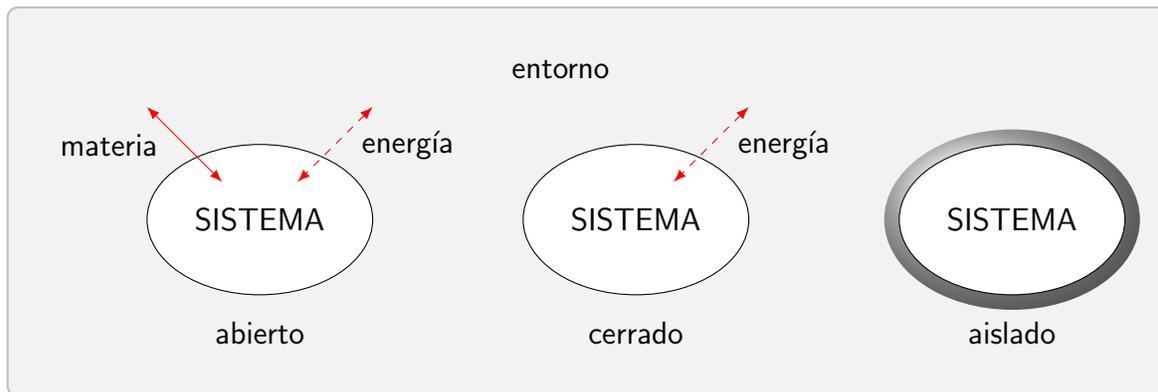


Figura 2.3: Tipos de sistemas termodinámicos

Este esquema conceptual es esencial para el análisis y la aplicación de los principios de la termodinámica, ya que permite establecer con claridad qué entra o sale del sistema, y cómo se relaciona con su entorno. Además, según el tipo de sistema que se considere, se aplican diferentes formas de los principios termodinámicos para predecir su comportamiento.

Continuando, la descripción del estado de un sistema se realiza a través de ciertas propiedades macroscópicas llamadas variables termodinámicas, como el volumen, la presión, la temperatura o la densidad. Estas propiedades son observables y medibles a nivel

macroscópico, y permiten caracterizar el comportamiento del sistema sin necesidad de conocer los detalles de su estructura microscópica.

Dentro de estas variables, algunas se consideran independientes entre sí y se conocen como variables de estado. Esto significa que una vez que se han definido estas variables, las demás pueden derivarse a partir de relaciones termodinámicas conocidas.

Las funciones de estado son aquellas magnitudes que dependen únicamente del estado actual del sistema y no del camino que ha seguido para llegar a ese estado. Es decir, su valor solo depende de los valores actuales de las variables de estado. Ejemplos clásicos de funciones de estado son la energía interna y la entropía, que desempeñan un papel fundamental en la formulación de los principios de la termodinámica. En cambio, otras magnitudes como el trabajo y el calor no son funciones de estado, ya que dependen del proceso específico mediante el cual el sistema evoluciona de un estado a otro.

Esta distinción es esencial para comprender los principios de la termodinámica, ya que permite separar las propiedades intrínsecas del sistema de aquellas que dependen de su interacción con el entorno.

Ahora, hablando específicamente del segundo principio de la termodinámica, que con base en los enunciados de Kelvin-Planck y Clausius, se puede decir como

“Es imposible un proceso espontáneo cuyo único resultado sea transferir calor de un sistema a otro que se encuentra a mayor temperatura.”

Sin embargo, existen formulaciones más profundas y conceptualmente ricas del segundo principio de la termodinámica donde no se hace referencia a sistemas concretos ni a procesos prácticos. En su lugar, se expresa mediante una cantidad abstracta pero fundamental: la entropía de un sistema. Esta perspectiva permite generalizar el principio a una gran variedad de situaciones, y no solo a aquellas que involucran transformaciones energéticas realizables.

Recordemos que en un ciclo termodinámico, el sistema parte de un estado inicial y, tras una serie de transformaciones, regresa exactamente a ese mismo estado. En consecuencia,

cualquier variable de estado, es decir, cualquier magnitud que dependa únicamente del estado actual del sistema y no de cómo se llegó a él, debe presentar un cambio neto igual a cero. Así, para un ciclo completo, se cumple que:

$$\Delta U = 0, \quad \Delta P = 0, \quad \Delta T = 0, \quad \Delta V = 0, \quad (2.1)$$

donde U es la energía interna, P la presión, T la temperatura y V el volumen. Estas variables son, por tanto, variables de estado.

Sin embargo, esto no significa que no ocurra nada durante el ciclo: tanto el calor intercambiado como el trabajo realizado suelen ser distintos de cero:

$$Q \neq 0, \quad W \neq 0. \quad (2.2)$$

La razón es que tanto el calor como el trabajo son ejemplos de funciones de proceso, es decir, dependen del camino que sigue el sistema entre dos estados, no solo de los estados inicial y final. Esto pone de manifiesto la necesidad de una nueva función de estado que capture de alguna forma los efectos irreversibles y la dirección de los procesos naturales.

2.2. Entropía termodinámica

Para introducir esta magnitud, la entropía denotada por S , consideremos un proceso infinitesimal y reversible en el que el sistema absorbe una cantidad de calor δQ_{rev} a temperatura T . Entonces, el cambio infinitesimal en la entropía del sistema se define como:

$$dS = \frac{\delta Q_{rev}}{T} \quad (2.3)$$

Esta definición, propuesta por Rudolf Clausius en 1865 [21], dio lugar a un concepto revolucionario. Clausius demostró que la entropía es también una función de estado, como lo es la energía interna, pero con una propiedad distintiva: en cualquier proceso espontáneo que ocurra en un sistema aislado, la entropía no disminuye. De hecho, aumenta, y si el proceso es reversible, permanece constante.

Para comprender la necesidad de introducir esta nueva magnitud termodinámica, la entropía, consideremos una situación en la que un sistema se encuentra conectado a un depósito térmico que mantiene una temperatura constante T_R . Este sistema, además, está acoplado a un sistema que realiza un ciclo reversible. Durante este ciclo, el sistema cíclico recibe una cantidad de calor δQ_R del depósito y entrega una cantidad de calor δQ al sistema (cuya temperatura local en la frontera donde ocurre esta transferencia es T). Como resultado, se produce trabajo por parte tanto del sistema como del sistema reversible: el dispositivo produce δW_{rev} y el sistema δW_{sis} .

Al considerar al sistema y al dispositivo cíclico como un sistema combinado, podemos aplicar el balance de energía. Este balance nos dice que el trabajo total realizado por el sistema combinado, es decir, $\delta W_C = \delta W_{rev} + \delta W_{sis}$, es igual al calor extraído del depósito térmico menos el cambio en la energía interna total del sistema combinado

$$\delta W_C = \delta Q_R - dE_C \quad (2.4)$$

Aquí, dE_C representa el cambio en la energía interna total del sistema combinado. Ahora bien, dado que el dispositivo cíclico es reversible, sabemos por la termodinámica clásica que la relación entre el calor recibido y la temperatura del depósito debe cumplir

$$\frac{\delta Q_R}{T_R} = \frac{\delta Q}{T} \quad (2.5)$$

Esta igualdad tiene un papel central: expresa que un proceso reversible mantiene la proporción entre el calor intercambiado y la temperatura del cuerpo que lo proporciona. Al sustituir esta expresión en la ecuación del balance energético y eliminar δQ_R , se obtiene

$$\delta W_C = T_R \frac{\delta Q}{T} - dE_C \quad (2.6)$$

Este resultado es muy revelador, pero aún más lo es si consideramos que tanto el sistema como el dispositivo reversible completan un ciclo. En ese caso, la energía interna, al ser una función de estado, regresa a su valor inicial, por lo que su cambio neto es cero ($\oint dE_C = 0$).

Así, la integral cíclica del trabajo del sistema combinado se vuelve

$$W_C = T_R \oint \frac{\delta Q}{T} \quad (2.7)$$

Hasta aquí, todo parece ir bien, pero es en este punto donde entra en juego el segundo principio de la termodinámica, específicamente el enunciado de Kelvin-Planck. Este principio afirma que no es posible construir un sistema que opere en un ciclo y convierta completamente en trabajo el calor extraído de un solo depósito térmico. Es decir, no puede haber un trabajo neto positivo si solo hay interacción con un único depósito de calor.

Aplicando esta idea al sistema combinado, que opera en un ciclo e intercambia calor únicamente con el depósito térmico, se deduce que el trabajo neto W_C no puede ser positivo. Como T_R es una temperatura positiva, esta condición implica que

$$\oint \frac{\delta Q}{T} < 0 \quad (2.8)$$

Esta es la “desigualdad de Clausius”, una expresión que distingue entre procesos reversibles e irreversibles. Ahora bien, si no existiera ninguna irreversibilidad, ni en el sistema ni en el sistema cíclico, entonces el ciclo completo sería reversible. Esto significa que el proceso puede invertirse, y en tal caso, todas las cantidades cambian de signo. Como consecuencia, el trabajo neto también debería cambiar de signo, pero como no puede ser positivo en un sentido ni negativo en el inverso (por la misma lógica de Kelvin-Planck), la única posibilidad es que

$$W_{C,rev} = 0 \Rightarrow \oint \frac{\delta Q_{rev}}{T} = 0 \quad (2.9)$$

Este resultado tiene una interpretación muy importante: para los ciclos reversibles, la integral cíclica de $\frac{\delta Q_{rev}}{T}$ es igual a cero. Por tanto, cuando se cumple la igualdad en la desigualdad de Clausius, estamos ante un proceso reversible; si se mantiene la desigualdad estricta, el proceso es irreversible.

Aquí es donde se vuelve natural introducir una nueva función de estado: ****la entropía****. Dado que $\oint \frac{\delta Q_{rev}}{T} = 0$ para ciclos reversibles, esta expresión nos sugiere que $\frac{\delta Q_{rev}}{T}$ puede interpretarse como la diferencial exacta de una nueva propiedad del sistema, pues su integral

cíclica se anula (una característica clave de las funciones de estado). Así, definimos la entropía S mediante

$$dS = \frac{\delta Q_{rev}}{T} \quad (2.10)$$

De esta manera, el cambio de entropía entre dos estados de un sistema queda definido como

$$\Delta S = S_2 - S_1 = \int_1^2 \frac{\delta Q_{rev}}{T} \quad (2.11)$$

Como la entropía es una función de estado significa que depende únicamente del estado del sistema y no del proceso seguido para llegar a ese estado. Esto tiene una consecuencia muy útil: aunque el proceso real entre dos estados pueda ser irreversible, el cambio de entropía puede determinarse considerando un proceso reversible imaginario que conecte esos mismos estados. Esto se debe a que el valor de la integral $\int \frac{\delta Q_{rev}}{T}$ solo corresponde al cambio de entropía si se evalúa sobre una trayectoria reversible.

Este resultado no solo proporciona una formulación más amplia del segundo principio, sino que también responde a una pregunta esencial: ¿en qué dirección ocurren de manera natural los procesos? La respuesta es clara: los procesos espontáneos son aquellos en los que la entropía total del sistema (y del entorno, si se incluye) aumenta.

Así, la entropía nos ofrece una brújula para orientarnos en el universo de las transformaciones termodinámicas: mientras que el primer principio nos asegura que la energía se conserva, el segundo nos indica que no toda transformación es igualmente posible, y que la irreversibilidad está escrita en las leyes fundamentales de la naturaleza.

La entropía es una medida de la incertidumbre un sistema físico y, en términos matemáticos, se define como la cantidad de incertidumbre asociada con una variable aleatoria. En un sistema termodinámico, la entropía se relaciona con la cantidad de energía no disponible para realizar trabajo útil.

En un sistema termodinámico cerrado, la entropía total del sistema debe aumentar con el tiempo. Esto se conoce como “el principio de aumento de entropía”. En términos simples, esto significa que la energía disponible en un sistema se agota con el tiempo, y no puede ser

recuperada completamente.

Por lo tanto, el cambio de entropía en un sistema se puede calcular mediante la fórmula:

$$\Delta S = \frac{Q}{T} \quad (2.12)$$

donde ΔS es el cambio en la entropía del sistema, Q es el calor transferido al sistema y T es la temperatura absoluta a la que se realiza la transferencia.

En resumen, la formulación de la entropía termodinámica clásica proporciona una forma macroscópica de establecer una dirección preferente para los procesos naturales —la del aumento de entropía—, lo que fundamenta el segundo principio de la termodinámica. Este concepto, aunque surgido en el contexto de motores térmicos, trasciende su origen y se convierte en una herramienta fundamental para comprender la irreversibilidad y la evolución de sistemas físicos en equilibrio o cercanos al equilibrio.

2.3. Entropía de Boltzmann

En la mecánica estadística clásica, el concepto de entropía se encuentra íntimamente ligado a la entropía de Boltzmann, una noción fundamental que proporciona el puente entre la descripción microscópica y macroscópica de los sistemas físicos. La fórmula propuesta por Ludwig Boltzmann en 1877 [22] expresa la entropía como

$$S_B = k_B \ln W_N, \quad (2.13)$$

donde k_B es la constante de Boltzmann (1.38×10^{-23} J/K) y W_N representa el número de microestados compatibles con un mismo macroestado (por ejemplo, una energía, volumen y número de partículas dados). Esta expresión encapsula su visión de que la incertidumbre, o la probabilidad de ocurrencia de un estado, tiene un fundamento estadístico.

Boltzmann pensaba en los microestados como pequeñas celdas (volúmenes elementales) en el espacio de fases, un espacio de dimensión $6N$ si consideramos N partículas clásicas (cada una con tres coordenadas de posición y tres de velocidad). Desde este punto de

vista, la entropía es una medida del volumen ocupado por el conjunto de configuraciones microscópicas que corresponden a un mismo estado macroscópico.

El marco habitual [22] en el que se introduce esta noción es el del ensamblaje microcanónico, que describe sistemas aislados con energía U , volumen V y número de partículas N fijos. Aquí se asume que todas las configuraciones compatibles con estos parámetros son equiprobables. Para ser precisos, se admite una pequeña tolerancia en la energía, δU , lo cual implica que el número de microestados relevantes es $W(N, V, U, \delta U)$, y la entropía se expresa como:

$$S_B = k_B \ln W(N, V, U, \delta U). \quad (2.14)$$

Sin embargo, en el límite termodinámico ($N \rightarrow \infty$), la contribución del término δU se vuelve despreciable. De hecho, dado que

$$W(N, V, U, \delta U) \sim W_N \frac{1}{\delta U}, \quad (2.15)$$

el término $\ln \delta U$ en la entropía es subdominante frente a la dependencia principal con N , por lo que se omite con seguridad en la mayoría de las aplicaciones físicas.

Una idea crucial es que la entropía de Boltzmann es extensiva, es decir, crece proporcionalmente con el número de partículas N . Esta propiedad permite conectar la entropía estadística con la entropía macroscópica de la termodinámica.

Finalmente, es importante destacar que la entropía termodinámica S , introducida por Clausius en 1865 en el contexto del segundo principio de la termodinámica, fue originalmente concebida de forma fenomenológica, sin referencia a microestados. El gran aporte de Boltzmann fue mostrar que esta entropía macroscópica se puede interpretar como la entropía estadística S_B en el límite termodinámico, es decir, cuando $N \rightarrow \infty$. Esto no solo proporcionó una base microscópica para el segundo principio, sino que cimentó la mecánica estadística como teoría fundamental del equilibrio térmico. Para que ambas entropías

coincidan en unidades físicas, es necesario el factor k_B , que conecta las unidades estadísticas (adimensionales) con las unidades macroscópicas de la termodinámica.

2.4. Entropía de Shannon

Ahora bien, aunque la entropía de Boltzmann está formulada en términos de configuraciones de todo el sistema (en el espacio X^N , donde X es el espacio de estados posibles para un solo elemento del sistema y N es el número de componentes del sistema), existe otra noción de entropía que se refiere a distribuciones sobre los estados individuales, conocida como entropía de Shannon. Si consideramos una configuración particular $\bar{x} \in X^N$, podemos contar cuántas veces aparece cada estado $x \in X$ dentro de ella. Este recuento define una distribución empírica (o tipo) $L_{\bar{x}}$, y su entropía se define como

$$H(L_{\bar{x}}) = - \sum_x \left(\frac{n_x}{N} \right) \log_2 \left(\frac{n_x}{N} \right), \quad (2.16)$$

donde n_x es el número de partículas en el estado x . Aunque parecidas en espíritu, estas dos entropías no deben confundirse: la de Boltzmann se refiere al conteo de microestados en el espacio de fases completo, mientras que la de Shannon mide la diversidad en la distribución empírica de los estados individuales.

Este vínculo entre ambas entropías se formaliza a través del teorema de Shannon–McMillan–Breiman, que establece que, para una secuencia larga de longitud N , el número de secuencias típicas se comporta como 2^{Nh} , donde h es la tasa de entropía por componente. Esta relación se parece mucho a la forma por partícula de la entropía de Boltzmann dada por

$$\frac{S_B}{N} = \frac{k_B}{N} \ln W_N, \quad (2.17)$$

y de hecho, como en [23], para grandes N se tiene que $W_N \approx N^N$, por lo que, si $h = S_B/N$ queda

$$h \approx \frac{k_B}{N} \ln N^N \quad (2.18)$$

luego, haciendo cambio de base del logaritmo, con $\log_2 x = \ln x / \ln 2$ queda

$$h \approx \frac{k_B}{N} \ln 2 \log_2 N^N \quad (2.19)$$

Por lo que, considerando $k_B \ln 2 \approx 1$ resulta

$$h \sim \frac{1}{N} \log_2 N^N, \quad (2.20)$$

lo que resalta la analogía estructural entre ambas formulaciones.

2.5. Entropía de Kolmogórov-Sinai

En la teoría de sistemas dinámicos la noción de la entropía de Shannon tiene un análogo si dotamos al espacio de estados del sistema de una medida: la entropía métrica, también conocida como entropía de Kolmogorov–Sinai. Esta fue desarrollada en los años cincuenta y sesenta por Kolmogórov y Sinai, quienes lograron introducir una medida estadística para sistemas que evolucionan de forma determinista pero exhiben comportamientos caóticos.

Como menciona [24], supongamos que tenemos una evolución discreta en el tiempo, dada por una función f que actúa sobre un espacio compacto, de modo que el estado del sistema en el tiempo $n + 1$ es $x_{n+1} = f(x_n)$. Para estudiar esta evolución, se toma una partición finita inicial del espacio, \mathcal{P}_0 , y se consideran las sucesivas particiones generadas por la dinámica dada por f , es decir:

$$\mathcal{P}_n = \mathcal{P}_0 \vee f^{-1}(\mathcal{P}_0) \vee \dots \vee f^{-n}(\mathcal{P}_0). \quad (2.21)$$

Cada elemento de la partición \mathcal{P}_n representa una secuencia de trayectorias posibles del sistema a lo largo de n pasos, y la cantidad de información asociada a esta evolución se define como:

$$\bar{h}(\mathcal{P}_0) = -\frac{1}{n} \sum_{A_n \in \mathcal{P}_n} m(A_n) \ln m(A_n), \quad (2.22)$$

donde m es una medida invariante bajo la dinámica de f . El valor límite de esta cantidad cuando $n \rightarrow \infty$, denotado $\bar{h}(\mathcal{P}_0)$, refleja la tasa de generación de información al observar la evolución del sistema según la partición inicial.

Y aquí se puede medir la pérdida de información con una cantidad, la entropía métrica, que propiamente se define como el supremo de estas tasas de información sobre todas las particiones finitas posibles:

$$h_m = \sup_{\mathcal{P}_0} \bar{h}(\mathcal{P}_0) \quad (2.23)$$

Este valor es invariante bajo isomorfismos entre sistemas dinámicos, lo que lo convierte en una herramienta para clasificar sistemas según su estructura dinámica y estadística. Si dos sistemas tienen diferente entropía métrica, entonces no pueden ser isomorfos, es decir, no existe una correspondencia que preserve su comportamiento dinámico.

Finalmente, una generalización práctica de esta idea es la ε -entropía, que se obtiene al considerar particiones \mathcal{P}_ε del espacio de fases cuyos elementos tienen un diámetro no mayor que ε , es decir

$$h(\varepsilon) = h_m(T, \mathcal{P}_\varepsilon) \quad (2.24)$$

donde $h_m(T, \mathcal{P}_\varepsilon)$ es la entropía métrica del sistema dinámico con respecto a una partición.

A diferencia de h_m , que toma el supremo sobre todas las particiones, la ε -entropía es más fácil de calcular y se puede definir para cualquier tipo de proceso dinámico, ya sea determinista o estocástico. En [4, p. 86] demuestra que en el caso determinista caótico, se cumple:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} h(\varepsilon) = h_m \quad (2.25)$$

En contraste, para procesos verdaderamente estocásticos, $h(\varepsilon)$ diverge al hacer $\varepsilon \rightarrow 0$, y la forma precisa de esta divergencia proporciona información sobre el tipo de proceso: por ejemplo, para un movimiento browniano, la entropía crece como $(\frac{1}{\varepsilon})^2$.

Así, la entropía métrica y sus variantes no solo permiten clasificar sistemas dinámicos, sino también distinguir entre comportamientos deterministas y estocásticos. En este sentido, se han convertido en herramientas esenciales tanto para la teoría como para la práctica del análisis de sistemas complejos.

Capítulo 3

Producción de entropía en sistemas dinámicos disipativos

La producción de entropía se refiere al aumento de entropía que ocurre en un sistema o en su entorno como resultado de procesos irreversibles. El concepto fue formalizado y discutido por primera vez por Rudolf Clausius en 1865 [21]. Y su estudio en sistemas dinámicos disipativos es crucial para comprender la evolución de sistemas complejos y su interacción con el entorno. En este capítulo, organizado en cuatro secciones, se explora cómo se manifiesta la producción de entropía en diferentes contextos teóricos, destacando su relevancia tanto en la teoría de la termodinámica como en la teoría ergódica y en el análisis de sistemas estocásticos específicos, como el sistema de Ornstein-Uhlenbeck. En la primera sección, se introduce la producción de entropía en el sistema más sencillo en que puede aparecer, es decir, en el contexto de las cadenas de Markov a tiempo y espacio discretos, en este caso se puede encontrar una fórmula explícita para la producción de entropía. En la segunda sección, se analiza cómo la producción de entropía está relacionada con la irreversibilidad de los procesos físicos desde una perspectiva termodinámica. Este enfoque proporciona una base sólida para entender cómo se genera la entropía en sistemas que intercambian energía con su entorno, esto desde el enfoque de los sistemas dinámicos Hamiltonianos. En la tercera sección, se investiga cómo la producción de entropía se relaciona con la dinámica a largo plazo de sistemas en evolución y cómo se pueden utilizar los fundamentos probabilísticos para analizar el comportamiento de sistemas complejos desde el punto de vista de la teoría ergódica. La cuarta sección, se centra en examinar la

manifestación de la producción de entropía en el sistema de Ornstein-Uhlenbeck, un caso particular de sistema dinámico estocástico con fluctuaciones aleatorias, proporcionando una visión detallada de las características de la disipación en sistemas con propiedades de ruido y correlaciones temporales. Finalmente, en la última sección se presentan las conclusiones de este capítulo.

3.1. Producción de entropía en termodinámica

Dentro de los conceptos fundamentales de la teoría de la termodinámica estadística, la tasa de producción de entropía se entiende mediante las definiciones de tasa de generación de calor y temperatura.

Primero, suponiendo que el sistema

$$\dot{x} = V(x) \quad (3.1)$$

es disipativo, consideremos la variedad

$$\Sigma_h = \{x \in \mathbb{R}^n \mid H(x) = h\} \quad (3.2)$$

como el conjunto de todas las configuraciones del sistema que tienen la misma energía $h > 0$.

Así, para cada $h > h^*$, la tasa media de generación de calor en Σ_h se puede definir como

$$\dot{Q}(h) = - \int_{\Sigma_h} V(x) \cdot \nabla H(x) dm_h, \quad (3.3)$$

donde

$$dm_h = \left[\int_{\Sigma_h} \frac{d\sigma}{\|\nabla H(x)\|} \right]^{-1} \frac{d\sigma}{\|\nabla H(x)\|} \quad (3.4)$$

es una medida probabilística sobre la variedad Σ_h .

Ahora, si consideramos

$$\Omega_h = \{x \in \mathbb{R}^n \mid H(x) \leq h\} \quad (3.5)$$

la probabilidad termodinámica en Ω_h es

$$W(h) = \int_{\Omega_h} dx \quad (3.6)$$

y su derivada temporal es

$$W'(h) = \int_{\Sigma_h} \frac{d\sigma}{\|\nabla H(x)\|}. \quad (3.7)$$

Recordando que la entropía termodinámica (de Boltzmann, donde $k_B = 1$ por simplicidad) se define como

$$S(h) = \ln[W(h)] \quad (3.8)$$

y la definición de temperatura es

$$\frac{1}{T(h)} = \frac{dS(h)}{dh} \quad (3.9)$$

entonces

$$T(h) = \frac{W(h)}{W'(h)}. \quad (3.10)$$

Así, por el teorema de la divergencia

$$\dot{Q}(h) = -\frac{1}{W'(h)} \int_{\Omega_h} \nabla \cdot [V(x)] dx \quad (3.11)$$

y con la producción de entropía como $e_{tp}(h) = \frac{\dot{Q}(h)}{T(h)}$, es decir,

$$e_{tp}(h) = -\frac{1}{W(h)} \int_{\Omega_h} \nabla \cdot [V(x)] dx. \quad (3.12)$$

3.2. Producción de entropía en teoría ergódica

Dentro de los conceptos fundamentales de la teoría ergódica, la tasa de producción de entropía se entiende mediante las definiciones de la entropía de Shannon y las medidas de probabilidad de Borel.

Partiendo de la densidad $\rho \in C^1 : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ y la ecuación de Liouville generalizada

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho V) \quad (3.13)$$

con

$$d\mu_t(x) = \rho(x, t) dx \quad (3.14)$$

donde $\rho(x, 0) = \rho_0(x)$, $\rho \geq 0$ e $\int_{\mathbb{R}^n} \rho dx = 1$ y $\mu_t \in \mathbb{R}^n$ es una medida invariante respecto al

flujo ϕ^t .

Considerando

$$\nabla \cdot (V\rho) = \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} (V\rho)_i = \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} (V_i\rho) = \sum_{i=1}^n \left[V_i \left(\frac{\partial}{\partial x_i} \rho \right) + \left(\frac{\partial}{\partial x_i} V_i \right) \rho \right], \quad (3.15)$$

Entonces, la ecuación queda

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho = - \sum_{i=1}^n \left[V_i \left(\frac{\partial}{\partial x_i} \rho \right) + \left(\frac{\partial}{\partial x_i} V_i \right) \rho \right]. \quad (3.16)$$

Reacomodando

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \sum_{i=1}^n V_i \left(\frac{\partial}{\partial x_i} \rho \right) = -\rho \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} V_i. \quad (3.17)$$

Cuya solución se logra encontrar por el método de las características, descrito en [25], de la forma que sigue. En un parámetro s se tiene que

$$\frac{d}{ds} \{ \rho[x(s), t(s)] \} = \left(\frac{d}{ds} t \right) \left(\frac{\partial}{\partial t} \rho \right) + \sum_{i=1}^n \left(\frac{d}{ds} x_i \right) \left(\frac{\partial}{\partial x_i} \rho \right) \quad (3.18)$$

si se seleccionan

$$\frac{d}{ds} t = 1, \quad \frac{d}{ds} x_i = V_i, \quad (3.19)$$

se tiene que

$$\frac{d}{ds} \rho = -\rho \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} V_i \quad (3.20)$$

y

$$t(0) = 0, \quad x_i(0) = x_{0,i}, \quad \rho(0) = \rho_0(x_0). \quad (3.21)$$

Parametrizando por x_0 se tiene

$$\frac{d}{ds} [t(x_0, s)] = 1, \quad \frac{d}{ds} [x_i(x_0, s)] = V_i[x(x_0, s)], \quad (3.22)$$

$$\frac{d}{ds} [\rho(x_0, s)] = -[\rho(x_0, s)] \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \{ V_i[x(x_0, s)] \} \quad (3.23)$$

y

$$t(x_0, 0) = 0, \quad x_i(x_0, 0) = x_{0,i}, \quad \rho(x_0, 0) = \rho_0(x_0) \quad (3.24)$$

De la primera ecuación,

$$t(x_0, s) = s + c_1(x_0) \quad (3.25)$$

De la segunda ecuación,

$$\int_{x_i(x_0, 0)}^{x_i(x_0, s)} \frac{1}{V_i[y(x_0, s)]} dy_i(x_0, s) = s + c_2(x_0) \quad (3.26)$$

De la tercera ecuación,

$$\rho(x_0, s) = c_3(x_0) \exp \left[- \int_0^s \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \{V_i[x(x_0, \tau)]\} d\tau \right] \quad (3.27)$$

Evaluando en las condiciones iniciales. De la primera ecuación,

$$t(x_0, 0) = c_1(x_0) = 0 \quad (3.28)$$

De la segunda ecuación,

$$\int_{x_i(x_0, 0)}^{x_i(x_0, 0)} \frac{1}{V_i[y(x_0, 0)]} dy_i(x_0, 0) = 0 = c_2(x_0) \quad (3.29)$$

De la tercera ecuación,

$$\rho(x_0, 0) = c_3(x_0) = \rho_0(x_0) \quad (3.30)$$

Por lo que, de la primera ecuación,

$$t(x_0, s) = s \quad (3.31)$$

De la segunda ecuación,

$$\int_{x_i(x_0, 0)}^{x_i(x_0, s)} \frac{1}{V_i[y(x_0, s)]} dy_i(x_0, s) = s \quad (3.32)$$

De la tercera ecuación,

$$\rho(x_0, s) = \rho_0(x_0) \exp \left[- \int_0^s \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \{V_i[x(x_0, \tau)]\} d\tau \right] \quad (3.33)$$

Como

$$\nabla \cdot V = \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} V_i, \quad s(x, t) = t \quad (3.34)$$

$$x_0(x, t) = \phi^{-t}(x) \quad x(x_0, \tau) = x(\tau) = \phi^\tau(x_0) = \phi^\tau(\phi^{-t}(x)) = \phi^{\tau-t}(x) \quad (3.35)$$

la solución es

$$\rho(x, t) = \rho_0(\phi^{-t}(x)) \exp \left[- \int_0^t \nabla \cdot \{V[\phi^{\tau-t}(x)]\} d\tau \right]$$

o, con $s = -(\tau - t)$

$$\rho(x, t) = \rho_0[\phi^{-t}(x)] \exp \left[- \int_0^t \nabla \cdot \{V[\phi^{-s}(x)]\} ds \right]. \quad (3.36)$$

Junto con la entropía de Shannon

$$S(t) = - \int_{\mathbb{R}^n} \rho(x, t) \ln \rho(x, t) dx \quad (3.37)$$

y su tasa de variación

$$\dot{S} = \int_{\mathbb{R}^n} \rho(x, t) \nabla \cdot [V(x)] dx, \quad (3.38)$$

entonces, se identifica la tasa de producción de entropía como

$$e_{ip}(t) = - \int_{\mathbb{R}^n} \nabla \cdot [V(x)] d\mu_t(x). \quad (3.39)$$

3.2.1. Producción de entropía en cadenas de Márkov

El caso más simple en el que puede definirse la producción de entropía corresponde a las cadenas de Markov con tiempo y espacio discretos.

En una cadena de Markov ergódica y recurrente, las trayectorias recorren una colección de ciclos sin detenerse jamás. Este comportamiento cíclico se analiza formalmente mediante el teorema de descomposición de circulación en [26], que nos dice que el flujo de probabilidad entre dos estados cualquiera se puede descomponer en:

1. *Componente de equilibrio detallado*, que corresponde a aquella parte del flujo que no genera “giro” neto y caracterizaría un proceso reversible.
2. *Componente de circulación*, que mide la asimetría entre flujos en direcciones opuestas y refleja la “irrevocabilidad” del

sistema.

Si únicamente está presente la porción de equilibrio detallado, la cadena es reversible; cuando aparece un término de circulación neta en al menos un ciclo, la cadena pierde reversibilidad y podemos hablar de procesos irreversibles.

A partir de esta descomposición surge de forma natural el concepto de tasa de producción de entropía. Intuitivamente, esta magnitud cuantifica la incompatibilidad entre la dinámica temporal del proceso y su reverso temporal: cuanto mayor sea la circulación neta, más “lejanas” estarán las trayectorias directas de las reversas, y mayor será la entropía generada. Para una cadena estacionaria $\{\xi_t\}_{t \geq 0}$ con ley P y su reverso P^- , definimos

$$e_p = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} H(P_{[0,t]} \| P^-_{[0,t]}), \quad (3.40)$$

donde $H(\cdot \| \cdot)$ es la entropía relativa restringida a las trayectorias entre 0 y t . Bajo condiciones naturales (estacionariedad, continuidad de trayectorias y recíproca absoluta continuidad de P y P^-), este límite existe y es finito.

De acuerdo con [26], en el caso concreto de una cadena de tiempo continuo con espacio de estados finito S , cuya distribución estacionaria es π y cuya tasa de transición de i a j es q_{ij} , la tasa de producción de entropía adquiere la forma explícita

$$e_p = \frac{1}{2} \sum_{i,j \in S} (\pi_i q_{ij} - \pi_j q_{ji}) \log \frac{\pi_i q_{ij}}{\pi_j q_{ji}}. \quad (3.41)$$

Aquí, cada término $\pi_i q_{ij} - \pi_j q_{ji}$ mide el flujo neto en la arista $i \rightarrow j$, mientras que el logaritmo pondera esa asimetría con el “peso” informativo de la transición. Si todos los términos de circulación neta se anulan (es decir, $\pi_i q_{ij} = \pi_j q_{ji}$ para todo par (i, j)), entonces $e_p = 0$ y la cadena se halla en equilibrio detallado, condición equivalente a su reversibilidad. Por el contrario, siempre que exista al menos un circuito con circulación neta, $e_p > 0$, indicando la producción continua de entropía característica de los procesos irreversibles.

Interpretación: la positividad de e_p refleja la “direccionalidad” intrínseca de la dinámica de la cadena de Markov. En sistemas físicos, esta irreversibilidad se traduce en disipación de energía o generación de calor, mientras que en modelos de biología o química indica la presencia de ciclos metabólicos o rutas catalíticas fuera de equilibrio. En todos los casos, e_p es una medida cuantitativa de la distancia al equilibrio detallado y un indicador clave de cuán lejos se encuentra el sistema de un comportamiento reversible ideal.

3.3. Proceso de Ornstein-Uhlenbeck

Para concluir este capítulo, se ofrece un ejemplo concreto de cómo se produce entropía en sistemas con dos o tres grados de libertad acoplados, como dos o tres osciladores conectados en un medio viscoso. Estos escenarios ilustran la mayoría de las características típicas de los procesos Ornstein-Uhlenbeck multivariantes.

Sea el sistema dado por la ecuación diferencial estocástica

$$\frac{d\mathbf{x}(t)}{dt} = -\mathbf{B}\mathbf{x}(t) + \boldsymbol{\eta}(t), \quad (3.42)$$

donde

$$\langle \boldsymbol{\eta}(t)\boldsymbol{\eta}^T(t') \rangle = 2\mathbf{D}\delta(t-t'), \quad (3.43)$$

a \mathbf{B} se le conoce como matriz de fricción y a \mathbf{D} se le conoce como matriz de difusión. Y en estado estacionario se cumple que

$$\mathbf{B}\mathbf{S} + \mathbf{S}\mathbf{B}^T = 2\mathbf{D}, \quad (3.44)$$

donde \mathbf{S} es la matriz de covarianza.

Vamos a analizar con detalle dos casos en los que se pueden calcular explícitamente todas las matrices de forma general:

Caso dos dimensional. Para el caso donde $N = 2$ se tiene que

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}, \quad \mathbf{D} = \begin{pmatrix} u & w \\ w & v \end{pmatrix}, \quad \mathbf{S} = \begin{pmatrix} s_1 & s_3 \\ s_3 & s_2 \end{pmatrix}. \quad (3.45)$$

Sustituyendo en la ecuación (3.44) se obtiene

$$\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_1 & s_3 \\ s_3 & s_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} s_1 & s_3 \\ s_3 & s_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & c \\ b & d \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} u & w \\ w & v \end{pmatrix}, \quad (3.46)$$

por lo que, haciendo las operaciones resulta

$$\begin{pmatrix} 2as_1 + 2bs_3 & cs_1 + bs_2 + (a+d)s_3 \\ cs_1 + bs_2 + (a+d)s_3 & 2ds_2 + 2cs_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2u & 2w \\ 2w & 2v \end{pmatrix}. \quad (3.47)$$

En forma escalonada reducida

$$\begin{pmatrix} 2a & 0 & 2b & 2u \\ 0 & 2d & 2c & 2v \\ c & b & a+d & 2w \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \frac{adu+b^2v-bcu-2bdw+d^2u}{(a+d)(ad-bc)} \\ 0 & 1 & 0 & \frac{a^2v-2acw+adv-bcv+c^2u}{(a+d)(ad-bc)} \\ 0 & 0 & 1 & \frac{-abv+2adw-cdu}{(a+d)(ad-bc)} \end{pmatrix}. \quad (3.48)$$

Por lo tanto,

$$\mathbf{S} = \frac{1}{(a+d)(ad-bc)} \begin{pmatrix} \alpha & \gamma \\ \gamma & \beta \end{pmatrix}, \quad (3.49)$$

donde

$$\begin{aligned} \alpha &= adu + b^2v - bcu - 2bdw + d^2u, \\ \beta &= a^2v - 2acw + adv - bcv + c^2u, \\ \gamma &= -abv + 2adw - cdu. \end{aligned} \quad (3.50)$$

De la igualdad $\mathbf{Q} = \mathbf{BS} - \mathbf{D}$ se tiene que

$$\mathbf{Q} = \frac{1}{(a+d)(ad-bc)} \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha & \gamma \\ \gamma & \beta \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} u & w \\ w & v \end{pmatrix}, \quad (3.51)$$

lo cual se reduce a

$$\mathbf{Q} = \frac{cu - bv + (d-a)w}{a+d} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.52)$$

Calculando $\mathbf{D}^{-1}\mathbf{BQ}$ se tiene

$$\mathbf{D}^{-1}\mathbf{BQ} = \frac{cu - bv + (d-a)w}{(a+d)(uv-w^2)} \begin{pmatrix} v & -w \\ -w & u \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.53)$$

que se reduce a

$$\mathbf{D}^{-1}\mathbf{BQ} = \frac{cu - bv + (d-a)w}{(a+d)(uv-w^2)} \begin{pmatrix} bv - dw & cw - av \\ du - bw & aw - cu \end{pmatrix}. \quad (3.54)$$

Utilizando la definición de producción de entropía $e_p = -\text{tr}(\mathbf{D}^{-1}\mathbf{BQ})$ se tiene que

$$e_p = -\text{tr} \left[\frac{cu - bv + (d - a)w}{(a + d)(uv - w^2)} \begin{pmatrix} bv - dw & cw - av \\ du - bw & aw - cu \end{pmatrix} \right], \quad (3.55)$$

y se obtiene que

$$e_p = -\frac{cu - bv - (a - d)w}{(a + d)(uv - w^2)} [bv - cu + (a - d)w], \quad (3.56)$$

lo cual se reduce a

$$e_p = \frac{[bv - cu + (a - d)w]^2}{(a + d)(uv - w^2)}. \quad (3.57)$$

Caso tres dimensional. Para el caso donde $N = 3$ se tiene que

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{pmatrix}, \quad \mathbf{D} = \begin{pmatrix} u & x & z \\ x & v & y \\ z & y & w \end{pmatrix}, \quad \mathbf{S} = \begin{pmatrix} s_1 & s_4 & s_6 \\ s_4 & s_2 & s_5 \\ s_6 & s_5 & s_3 \end{pmatrix}. \quad (3.58)$$

Sustituyendo en la ecuación (3.44) se obtiene

$$\begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_1 & s_4 & s_6 \\ s_4 & s_2 & s_5 \\ s_6 & s_5 & s_3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} s_1 & s_4 & s_6 \\ s_4 & s_2 & s_5 \\ s_6 & s_5 & s_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & d & g \\ b & e & h \\ c & f & i \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} u & x & z \\ x & v & y \\ z & y & w \end{pmatrix}, \quad (3.59)$$

por lo que haciendo las operaciones resulta

$$\begin{pmatrix} \alpha & \delta & \zeta \\ \delta & \beta & \varepsilon \\ \zeta & \varepsilon & \gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2u & 2x & 2z \\ 2x & 2v & 2y \\ 2z & 2y & 2w \end{pmatrix}, \quad (3.60)$$

donde

$$\begin{aligned} \alpha &= 2as_1 + 2bs_4 + 2cs_6, & \delta &= ds_1 + bs_2 + (a + e)s_4 + cs_5 + fs_6, \\ \beta &= 2es_2 + 2ds_4 + 2fs_5, & \varepsilon &= hs_2 + fs_3 + gs_4 + (e + i)s_5 + ds_6, \\ \gamma &= 2is_3 + 2hs_5 + 2gs_6, & \zeta &= gs_1 + cs_3 + hs_4 + bs_5 + (a + i)s_6. \end{aligned} \quad (3.61)$$

Luego, haciendo el cálculo en Python, como se puede ver en el anexo (A.2), en forma escalonada reducida

$$\begin{pmatrix} 2a & 0 & 0 & 2b & 0 & 2c & 2u \\ 0 & 2e & 0 & 2d & 2f & 0 & 2v \\ 0 & 0 & 2i & 0 & 2h & 2g & 2w \\ d & b & 0 & a+e & c & f & 2x \\ 0 & h & f & g & e+i & d & 2y \\ g & 0 & c & h & b & a+i & 2z \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{M_1}{M} \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{M_2}{M} \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \frac{M_3}{M} \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \frac{M_4}{M} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \frac{M_5}{M} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & \frac{M_6}{M} \end{pmatrix}, \quad (3.62)$$

donde

$$M = [(a+e)(ae-bd) + (a+i)(ai-cg) + (e+i)(ei-fh) + 2aei - bfg - cdh] \\ [a(ei-fh) + b(fg-di) + c(dh-eg)], \quad (3.63)$$

$$\begin{aligned} M_1 &= N_{1,1}u + N_{1,2}v + N_{1,3}w + 2N_{1,4}x + 2N_{1,5}y + 2N_{1,6}z, \\ M_2 &= N_{2,1}u + N_{2,2}v + N_{2,3}w + 2N_{2,4}x + 2N_{2,5}y + 2N_{2,6}z, \\ M_3 &= N_{3,1}u + N_{3,2}v + N_{3,3}w + 2N_{3,4}x + 2N_{3,5}y + 2N_{3,6}z, \\ M_4 &= N_{4,1}u + N_{4,2}v + N_{4,3}w + 2N_{4,4}x + 2N_{4,5}y + 2N_{4,6}z, \\ M_5 &= N_{5,1}u + N_{5,2}v + N_{5,3}w + 2N_{5,4}x + 2N_{5,5}y + 2N_{5,6}z, \\ M_6 &= N_{6,1}u + N_{6,2}v + N_{6,3}w + 2N_{6,4}x + 2N_{6,5}y + 2N_{6,6}z, \end{aligned} \quad (3.64)$$

y

$$\begin{aligned}
 N_{1,1} &= a^2e^2i - a^2efh + a^2ei^2 - a^2fhi - 2abdei + abdfh - abdi^2 + abefg + abfgi \\
 &\quad + acdeh + acdhi - ace^2g - 2acegi + acfgh + ae^3i - ae^2fh + 2ae^2i^2 \\
 &\quad - 2aefhi + aei^3 - afh^2 + b^2d^2i - b^2dfg - bcd^2h + bcdeg + bcdgi - bcfg^2 \\
 &\quad - bde^2i - bdei^2 - bdfhi - bdi^3 + be^2fg + befgi + bf^2gh + bfgi^2 - c^2dgh \\
 &\quad + c^2eg^2 + cde^2h + cdehi + cd fh^2 + cdhi^2 - ce^3g - ce^2gi - cefgh - cegi^2 \\
 &\quad + e^3i^2 - 2e^2fhi + e^2i^3 + ef^2h^2 - 2efhi^2 + f^2h^2i, \\
 N_{1,2} &= ab^2ei - ab^2fh + ab^2i^2 - 2abchi + ac^2h^2 - b^3di + b^3fg + b^2cdh - b^2ceg \\
 &\quad + b^2ei^2 + b^2i^3 - 2bcehi - 2bchi^2 + c^2eh^2 + c^2h^2i, \\
 N_{1,3} &= ab^2f^2 - 2abcef + ac^2e^2 + ac^2ei - ac^2fh + b^2ef^2 + b^2f^2i - bc^2di + bc^2fg \\
 &\quad - 2bce^2f - 2bcefi + c^3dh - c^3eg + c^2e^3 + c^2e^2i, \\
 N_{1,4} &= -abe^2i + abefh - abei^2 + abfhi + b^2dei - b^2efg - bcdeh + bcdhi + bce^2g \\
 &\quad - bcfggh - be^2i^2 + befhi - bei^3 + bfhi^2 - c^2dh^2 + c^2egh + ce^2hi - cefh^2 \\
 &\quad + chei^2 - cfh^2i, \\
 N_{1,5} &= -ab^2fi + 2abcei - ac^2eh - b^2cdi + b^2cfg - b^2efi - b^2fi^2 + bc^2dh - bc^2eg \\
 &\quad + bce^2i + bcefh + bcei^2 + bcfhi - c^2e^2h - c^2ehi, \\
 N_{1,6} &= -ace^2i + acefh - acei^2 + acfhi + b^2d fi - b^2f^2g - bcd fh + bcdi^2 + bcefg \\
 &\quad - bcfgi + be^2fi - bef^2h + befi^2 - bf^2hi - c^2dhi + c^2egi - ce^3i + ce^2fh \\
 &\quad - ce^2i^2 + cefhi.
 \end{aligned} \tag{3.65}$$

$$\begin{aligned}
 N_{2,1} &= ad^2ei - ad^2fh + ad^2i^2 - 2adfgi + af^2g^2 - bd^3i + bd^2fg + cd^3h - cd^2eg \\
 &\quad + d^2ei^2 + d^2i^3 - 2defgi - 2dfigi^2 + ef^2g^2 + f^2g^2i, \\
 N_{2,2} &= a^3ei - a^3fh + a^3i^2 - a^2bdi + a^2bfg + a^2cdh - a^2ceg - 2a^2cgi + a^2e^2i \\
 &\quad - a^2efh + 2a^2ei^2 - a^2fhi + a^2i^3 - 2abdei + abdfh - abdi^2 + abefg + abfgi \\
 &\quad + ac^2g^2 + acdeh + acdhi - ace^2g - 2acegi - acfgh - 2acgi^2 + ae^2i^2 \\
 &\quad - 2aefhi + aei^3 + af^2h^2 - afh^2 + b^2d^2i - b^2dfg - bcd^2h + bcdeg - bcdgi \\
 &\quad + bcf^2g^2 - bdei^2 + bdfhi - bdi^3 + befgi - bf^2gh + bfgi^2 + c^2dgh + c^2g^2i \\
 &\quad + cdehi - cd fh^2 + cdhi^2 - ce^2gi + cefgh - cegi^2, \\
 N_{2,3} &= a^3f^2 - 2a^2cdf + a^2ef^2 + a^2f^2i + ac^2d^2 - 2acdef - 2acd fi + aef^2i - af^3h \\
 &\quad - bdf^2i + bf^3g + c^2d^2e + c^2d^2i + cd f^2h - cef^2g, \\
 N_{2,4} &= -a^2dei + a^2dfh - a^2di^2 + a^2fgi + abd^2i - abdfg - acd^2h + acdeg + acdgi \\
 &\quad - acfg^2 - adei^2 - adi^3 + af^2gh + afgi^2 + bdfgi - bf^2g^2 + cdegi - cd fgh \\
 &\quad + cdgi^2 - cfg^2i, \\
 N_{2,5} &= -a^3fi + a^2cdi + a^2cfg - a^2efi - a^2fi^2 - ac^2dg + acdfh + acdi^2 + acefg \\
 &\quad + acfgi - aefi^2 + af^2hi + bcd^2i - bcdfg + bdfi^2 - bf^2gi - c^2d^2h - c^2dgi \\
 &\quad - cd fhi + cefgi, \\
 N_{2,6} &= a^2d fi - a^2f^2g - acd^2i + acdfg + 2adefi - ad f^2h + ad fi^2 - aef^2g - af^2gi \\
 &\quad - bd^2fi + bdf^2g - cd^2ei + cd^2fh - cd^2i^2 + cd fgi.
 \end{aligned} \tag{3.66}$$

$$\begin{aligned}
 N_{3,1} &= ad^2h^2 - 2adegh + ae^2g^2 + aeg^2i - afg^2h - bdg^2i + bfg^3 + cdg^2h - ceg^3 \\
 &\quad + d^2eh^2 + d^2h^2i - 2de^2gh - 2deghi + e^3g^2 + e^2g^2i, \\
 N_{3,2} &= a^3h^2 - 2a^2bgh + a^2eh^2 + a^2h^2i + ab^2g^2 - 2abegh - 2abghi + aeh^2i - afh^3 \\
 &\quad + b^2eg^2 + b^2g^2i - bdh^2i + bfg^2h + cdh^3 - cegh^2, \\
 N_{3,3} &= a^3e^2 + a^3e^i - a^3fh - 2a^2bde - a^2bdi + a^2bfg + a^2cdh - a^2ceg + a^2e^3 \\
 &\quad + 2a^2e^2i - a^2efh + a^2ei^2 - a^2fhi + ab^2d^2 - 2abde^2 - 2abdei - abdfh \\
 &\quad - abdi^2 + abefg + abfgi + acdeh + acdhi - ace^2g - 2acegi + acfgh + ae^3i \\
 &\quad - ae^2fh + ae^2i^2 - 2aefhi + af^2h^2 + b^2d^2e + b^2dfg + bcd^2h - bcdeg \\
 &\quad + bcdgi - bcfgh^2 - bde^2i - bdei^2 + bdfhi + be^2fg + befgi - bf^2gh - c^2dgh \\
 &\quad + c^2eg^2 + cde^2h + cdehi - cdfh^2 - ce^3g - ce^2gi + cefgh, \tag{3.67} \\
 N_{3,4} &= -a^2dh^2 + a^2egh + abdgh - abeg^2 - adeh^2 - adh^2i + ae^2gh + 2aeghi \\
 &\quad - afg^2h + bdegh - be^2g^2 - beg^2i + bfg^2h + cdgh^2 - ceg^2h, \\
 N_{3,5} &= -a^3eh + a^2bdh + a^2beg - a^2e^2h - a^2ehi - ab^2dg + abdeh + abdhi + abe^2g \\
 &\quad + abfgh - ae^2hi + aefh^2 - b^2deg - b^2fg^2 - bcdgh + bceg^2 + bdehi \\
 &\quad - befgh - cdeh^2 + ce^2gh, \\
 N_{3,6} &= a^2deh - a^2e^2g - a^2egi + a^2fgh - abd^2h + abdeg + abdgi - abfg^2 - acdgh \\
 &\quad + aceg^2 + ade^2h + adfh^2 - ae^3g - ae^2gi - bd^2eh + bde^2g + bdegi - bdfgh \\
 &\quad - cd^2h^2 + cdegh.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 N_{4,1} &= -ade^2i + adefh - adei^2 + adfhi + bd^2ei - bdefg + bdfgi - bf^2g^2 - cd^2eh \\
 &\quad + cde^2g - cd fgh + cefg^2 - de^2i^2 + defhi - dei^3 + dfhi^2 + e^2 fgi - ef^2gh \\
 &\quad + efgi^2 - f^2ghi, \\
 N_{4,2} &= -a^2bei + a^2bfh - a^2bi^2 + a^2chi + ab^2di - ab^2fg - abcdh + abceg + abcgi \\
 &\quad - abei^2 - abi^3 - ac^2gh + acfh^2 + achi^2 + bcdhi + bcegi - bc fgh + bcgi^2 \\
 &\quad - c^2dh^2 - c^2ghi, \\
 N_{4,3} &= -a^2bf^2 + a^2cef + abcdf - abef^2 - abf^2i - ac^2de + ace^2f + 2acefi \\
 &\quad - acf^2h + bcdef + bcf^2g - c^2de^2 - c^2dei + c^2dfh - c^2efg, \\
 N_{4,4} &= a^2e^2i - a^2efh + a^2ei^2 - a^2fhi - abdei + abefg + acdeh - ace^2g - acegi \\
 &\quad + acfgh + ae^2i^2 - aefhi + ae^3i - afh^2 - ce^2gi + cefgh - cegi^2 + cfghi, \\
 N_{4,5} &= a^2bfi - a^2cei - abc fg + abefi + abfi^2 + ac^2eg - acefh - acei^2 - bcdei \\
 &\quad - bc fgi + c^2deh + c^2egi, \\
 N_{4,6} &= -abd fi + abf^2g + acdei - acefg - ae^2fi + aef^2h - aefi^2 + af^2hi + cde^2i \\
 &\quad - cdefh + cdei^2 - cd fhi. \\
 N_{5,1} &= -ad^2hi + 2adegi - aefg^2 - bd^2gi + bdfg^2 + cd^2gh - cdeg^2 - d^2ehi - d^2hi^2 \\
 &\quad + de^2gi + defgh + degi^2 + dfghi - e^2fg^2 - efg^2i, \\
 N_{5,2} &= -a^3hi + a^2bgi + a^2cgh - a^2ehi - a^2hi^2 - abcg^2 + abfgh + abgi^2 + acegh \\
 &\quad + acghi - aehi^2 + afh^2i + b^2dgi - b^2fg^2 - bcdgh - bcg^2i + bdhi^2 - b fghi \\
 &\quad - cdh^2i + ceghi, \\
 N_{5,3} &= -a^3ef + a^2bdf + a^2cde - a^2e^2f - a^2efi - abcd^2 + abdef + abdfi + acde^2 \\
 &\quad + acdfh - ae^2fi + aef^2h - bcd^2e - bcd fg + bdefi - bef^2g - c^2d^2h \\
 &\quad + c^2deg - cdefh + ce^2fg, \\
 N_{5,4} &= a^2dhi - a^2egi - acdgh + aceg^2 + adehi + adhi^2 - aefgh - aegi^2 - bdegi \\
 &\quad + befg^2 - cdghi + ceg^2i, \\
 N_{5,5} &= a^3ei - a^2bdi - a^2ceg + a^2e^2i + a^2ei^2 + abcdg - abdei - abdi^2 - ace^2g \\
 &\quad - acegi + ae^2i^2 - aefhi + bcdeg + bcdgi - bdei^2 + be fgi + cdehi - ce^2gi, \\
 N_{5,6} &= -a^2dei + a^2efg + abd^2i - abdfg - ade^2i - adfhi + ae^2fg + aefgi + bd^2ei \\
 &\quad - bdefg + cd^2hi - cdegi.
 \end{aligned}
 \tag{3.68}$$

$$\begin{aligned}
 N_{6,1} &= -ae^2gi + aefgh - aegi^2 + afghi + bd^2hi - bdfgh + bdgi^2 - bfg^2i - cd^2h^2 \\
 &\quad + cdegh - cdghi + ceg^2i + de^2hi - defh^2 + dehi^2 - dfh^2i - e^3gi + e^2fgh \\
 &\quad - e^2gi^2 + efghi, \\
 N_{6,2} &= a^2bhi - a^2ch^2 - ab^2gi + abcgh + 2abehi - abfh^2 + abhi^2 - aceh^2 - ach^2i \\
 &\quad - b^2dhi - b^2egi + b^2fgh - b^2gi^2 + bcdh^2 + bcghi, \\
 N_{6,3} &= a^2bef - a^2ce^2 - a^2cei + a^2cfh - ab^2df + abcde + abcdi - abcfg + abe^2f \\
 &\quad + abf^2h - ac^2dh + ac^2eg - ace^3 - ace^2i - b^2def - b^2f^2g + bcde^2 + bcdei \\
 &\quad - bcdfh + bcefg, \\
 N_{6,4} &= -abdhi + abegi + acdh^2 - acegh - ae^2hi + aefh^2 - aehi^2 + afh^2i + be^2gi \\
 &\quad - befgh + begi^2 - bfggi, \\
 N_{6,5} &= -a^2bei + a^2ceh + ab^2di - abcdh - abe^2i - abfhi + ace^2h + acehi + b^2dei \\
 &\quad + b^2fgi - bcdeh - bcegi, \\
 N_{6,6} &= a^2e^2i - a^2efh + a^2ei^2 - a^2fhi - abdei + abdfh - abdi^2 + abfgi + acdhi \\
 &\quad - acegi + ae^3i - ae^2fh + ae^2i^2 - aefhi - bde^2i + bdefh - bdei^2 + bdfhi.
 \end{aligned} \tag{3.70}$$

Continuando, por lo tanto

$$\mathbf{S} = \frac{1}{M} \begin{pmatrix} M_1 & M_4 & M_6 \\ M_4 & M_2 & M_5 \\ M_6 & M_5 & M_3 \end{pmatrix}. \tag{3.71}$$

Luego, calculando \mathbf{Q} con $\mathbf{Q} = \mathbf{BS} - \mathbf{D}$ se tiene que

$$\mathbf{Q} = \frac{1}{M} \begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_1 & M_4 & M_6 \\ M_4 & M_2 & M_5 \\ M_6 & M_5 & M_3 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} u & x & z \\ x & v & y \\ z & y & w \end{pmatrix}, \tag{3.72}$$

lo cual se reduce a

$$\mathbf{Q} = \frac{1}{P} \begin{pmatrix} 0 & P_1 & P_3 \\ -P_1 & 0 & P_2 \\ -P_3 & -P_2 & 0 \end{pmatrix}, \tag{3.73}$$

donde

$$P = (a + e)(ae - bd) + (e + i)(ei - fh) + (a + i)(ai - cg) + 2aei - cdh - bfg, \tag{3.74}$$

y

$$\begin{aligned}
 P_1 &= R_{1,1}u + R_{1,2}v + R_{1,3}w + R_{1,4}x + 2R_{1,5}y + 2R_{1,6}z, \\
 P_2 &= R_{1,1}u + R_{1,2}v + R_{1,3}w + 2R_{1,4}x + R_{1,5}y + 2R_{1,6}z, \\
 P_3 &= R_{1,1}u + R_{1,2}v + R_{1,3}w + 2R_{1,4}x + 2R_{1,5}y + R_{1,6}z,
 \end{aligned} \tag{3.75}$$

y

$$\begin{aligned}
 R_{1,1} &= -ade - adi + bd^2 + cdg - dei - di^2 + efg + fgi \\
 R_{1,2} &= abe + abi - ach - b^2d + bei - bfh + bi^2 - chi \\
 R_{1,3} &= cf(a - e) + bf^2 - c^2d \\
 R_{1,4} &= (a - e)(ae - bd) - (e + i)(ei - fh) + (a + i)(ai - cg) - bfg + cdh \\
 R_{1,5} &= ce(a + i) - b(cd + fi) \\
 R_{1,6} &= d(bf + ci) - af(e + i)
 \end{aligned} \tag{3.76}$$

$$\begin{aligned}
 R_{2,1} &= dg(e - i) + fg^2 - d^2h \\
 R_{2,2} &= -a^2h + abg - aeh - ahi + bdh + bgi - ehi + fh^2 \\
 R_{2,3} &= a^2f - acd + aef + afi - cde - cfg + efi - f^2h \\
 R_{2,4} &= h(ad + fg) - ge(a + i) \\
 R_{2,5} &= (a + e)(ae - bd) + (e - i)(ei - fh) - (a + i)(ai - cg) - bfg + cdh \\
 R_{2,6} &= di(a + e) - f(ag + dh)
 \end{aligned} \tag{3.77}$$

$$\begin{aligned}
 R_{3,1} &= -aeg - agi + bdg + cg^2 + deh + dhi - e^2g - egi \\
 R_{3,2} &= bh(a - i) + ch^2 - b^2g \\
 R_{3,3} &= -abf + ace + aci - bef + bfg - c^2g + ce^2 + cei - cfh \\
 R_{3,4} &= e(bg - ah) + h(cg - ai) \\
 R_{3,5} &= bi(a + e) - c(bg + eh) \\
 R_{3,6} &= (a + e)(ae - bd) - (e + i)(ei - fh) + (a - i)(ai - cg) + bfg - cdh.
 \end{aligned} \tag{3.78}$$

Luego, calculando $\mathbf{D}^{-1}\mathbf{BQ}$ se tiene que

$$\mathbf{D}^{-1}\mathbf{BQ} = \frac{1}{P} \begin{pmatrix} u & x & z \\ x & v & y \\ z & y & w \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & P_1 & P_3 \\ -P_1 & 0 & P_2 \\ -P_3 & -P_2 & 0 \end{pmatrix}, \tag{3.79}$$

que se reduce a

$$\mathbf{D}^{-1}\mathbf{BQ} = \frac{1}{T} \begin{pmatrix} DT_1 + GT_2 & AT_1 + GT_3 & AT_2 + DT_3 \\ ET_1 + HT_2 & BT_1 + HT_3 & BT_2 + ET_3 \\ FT_1 + IT_2 & CT_1 + IT_3 & CT_2 + FT_3 \end{pmatrix}, \quad (3.80)$$

donde

$$T = [(a + e)(ae - bd) + (e + i)(ei - fh) + (a + i)(ai - cg) + 2aei - bfg - cdh] \\ (uvw - uy^2 - vz^2 - wx^2 + 2xyz), \quad (3.81)$$

y

$$\begin{aligned} T_1 = & a^2ex + a^2ix - abdx + abev + abiv + 2acey + acfw - acgx - achv - adeu \\ & - adiu - ae^2x - 2aefz - 2afiz + ai^2x - b^2dv - 2bcdy + bd^2u + bdex + 2bdfz \\ & + beiv + bf^2w - bfgx - bfhv - 2bfiy + bi^2v - c^2dw + cdgu + cdhx + 2cdiz \\ & - cefw + 2ceiy - cgix - chiv - deiu - di^2u - e^2ix + efgu + efhx - ei^2x \\ & + fgiu + fhix \\ T_2 = & a^2ez + a^2iz - abdz - abfw + abhv + 2abiy + acew - acgz + aciw + ae^2z \\ & - aegu - 2aehx - agiu - 2ahix - ai^2z - b^2gv - 2bcgy - bdez + bdgu - bef w \\ & + 2begx + 2beiy + bfgz - bhiv - c^2gw - cdhz + ce^2w - 2cehy + ceiw - cfhw \\ & + cg^2u + 2cghx + cgiz + ch^2v + dehu + dhiu - e^2gu - e^2iz + efhz - egiu \\ & - ei^2z + fhiz, \\ T_3 = & a^2ey + a^2fw - a^2hv - a^2iy - abdy + abgv - acdw + acgy + 2adhx + 2adiz \\ & + ae^2y + aefw - 2aegx - aehv - 2afgz + afiw - ahiv - ai^2y - bdey + bdhv \\ & - bfgy + bgiv - cdew + cdhy - cfgw + cgyi - d^2hu + degu + 2deiz - 2dfhz \\ & - dgiu + e^2iy - efhy + ef iw - 2egix - ehiv - ei^2y - f^2hw + fg^2u + 2fghx \\ & + fh^2v + fhiy, \end{aligned} \quad (3.82)$$

y

$$\begin{aligned}
 A &= a(vw - y^2) - d(wx - yz) - g(vz - xy), \\
 B &= -a(wx - yz) + d(uw - z^2) - g(uy - xz), \\
 C &= -a(vz - xy) - d(uy - xz) + g(uv - x^2), \\
 D &= -b(vw - y^2) + e(wx - yz) + h(vz - xy), \\
 E &= b(wx - yz) - e(uw - z^2) + h(uy - xz), \\
 F &= b(vz - xy) + e(uy - xz) - h(uv - x^2), \\
 G &= -c(vw - y^2) + f(wx - yz) + i(vz - xy), \\
 H &= c(wx - yz) - f(uw - z^2) + i(uy - xz), \\
 I &= c(vz - xy) + f(uy - xz) - i(uv - x^2).
 \end{aligned} \tag{3.83}$$

Calculando e_p con $e_p = -\text{tr}(\mathbf{D}^{-1}\mathbf{BQ})$ se tiene que

$$e_p = -\text{tr} \left[\frac{1}{T} \begin{pmatrix} DT_1 + GT_2 & AT_1 + GT_3 & AT_2 + DT_3 \\ ET_1 + HT_2 & BT_1 + HT_3 & BT_2 + ET_3 \\ FT_1 + IT_2 & CT_1 + IT_3 & CT_2 + FT_3 \end{pmatrix} \right], \tag{3.84}$$

lo cual se reduce a

$$e_p = -\frac{(B+D)T_1 + (C+G)T_2 + (F+H)T_3}{T}. \tag{3.85}$$

Para verificar la expresión, haciendo la evaluación de (3.85) para el equivalente de las matrices del caso $N = 2$ con los valores $c = 0, f = 0, g = 0, h = 0, i = 1, w = 1, y = 0, z = 0$ se obtiene la expresión

$$e_p = \frac{(bv - du + (a - e)x)^2}{(a + e)(uv - x^2)}, \tag{3.86}$$

que corresponde con la producción de entropía del caso $N = 2$.

Para terminar, en este capítulo, se ha examinado la producción de entropía en sistemas dinámicos desde dos contextos teóricos y en el análisis de un sistema estocástico específico, el sistema de Ornstein-Uhlenbeck. Con esto se han encontrado las siguientes conclusiones.

La producción de entropía en termodinámica depende de la probabilidad termodinámica (total de estados) y la divergencia del campo vectorial del sistema dinámico.

La producción de entropía en teoría ergódica depende de la divergencia del campo vectorial del sistema dinámico y de la medida invariante del espacio de estados.

El estado estacionario fuera del equilibrio de un proceso de Ornstein-Uhlenbeck multivariable con N grados de libertad permite derivar una expresión analítica para la tasa de producción de entropía.

Capítulo 4

Estimación de producción de entropía con aprendizaje automático

En este capítulo, se presenta un enfoque para la estimación de la producción de entropía en sistemas dinámicos utilizando métodos de aprendizaje de máquina y técnicas de modelado estocástico. El principal objetivo es aplicar este enfoque al caso de dos osciladores acoplados, un modelo representativo de sistemas con interacciones disipativas.

De acuerdo con [3, p. 5], la producción de entropía en sistemas dinámicos discretos se puede calcular utilizando la ecuación:

$$e_p = S(t + \Delta t) - S(t) = \sum_i \rho_i(t) \log(\rho_i(t + \Delta t)) - \sum_i \rho_i(t) \log(\rho_i(t)), \quad (4.1)$$

donde S es la entropía, $\rho_i(t)$ es la probabilidad de estar en el estado i en el tiempo t , y Δt es el intervalo de tiempo. Esta ecuación se basa en la definición de entropía de Shannon, que se utiliza para medir la información contenida en un sistema.

4.1. Elementos de aprendizaje de máquina

En el contexto del aprendizaje de máquinas, de acuerdo con [27], un modelo puede entenderse como una representación matemática de un sistema codificada en un algoritmo computacional, la cual se construye a partir de un proceso de entrenamiento con datos. Su

finalidad es realizar tareas como predicciones, clasificaciones o la toma de decisiones sin que sea necesario programar explícitamente cada caso particular.

En términos simples, el modelo constituye el producto del entrenamiento de un algoritmo de aprendizaje. Este incorpora un conjunto de parámetros ajustados —como los pesos en una red neuronal, los coeficientes en una regresión lineal o las probabilidades en un modelo bayesiano— que se determinan al ejecutar el algoritmo con un conjunto de datos de entrenamiento.

Una vez concluido este proceso, el modelo es capaz de recibir nueva información (entradas) y generar una salida (ya sea una predicción o una decisión) en función de los patrones previamente aprendidos.

4.1.1. Perceptrón multicapa

Un perceptrón multicapa [27], como el de la figura 4.1, es una red neuronal artificial compuesta por al menos tres capas: entrada, una o varias capas ocultas y salida. Cada nodo de una capa se conecta a todos los de la siguiente mediante pesos ajustables durante el entrenamiento, lo que permite a la red aprender patrones complejos y realizar tareas de clasificación o regresión.

Ejemplo 4.1 (Reconocimiento de dígitos). Un perceptrón multicapa para reconocer dígitos escritos a mano usaría nodos de entrada para cada píxel, capas ocultas que capturan representaciones intermedias y nodos de salida correspondientes a cada dígito. Durante el entrenamiento, los pesos se ajustan para minimizar la diferencia entre las predicciones y las etiquetas reales mediante un proceso iterativo llamado retropropagación del error. Este proceso implica:

Paso hacia adelante: cada nodo calcula la suma ponderada de sus entradas y aplica una función de activación (sigmoide, tanh o ReLU), generando la salida de la red.

Cálculo del error: se evalúa la diferencia entre la salida predicha y la real.

Retropropagation: el error se propaga hacia atrás, calculando los gradientes de la función de pérdida respecto a los pesos de cada capa.

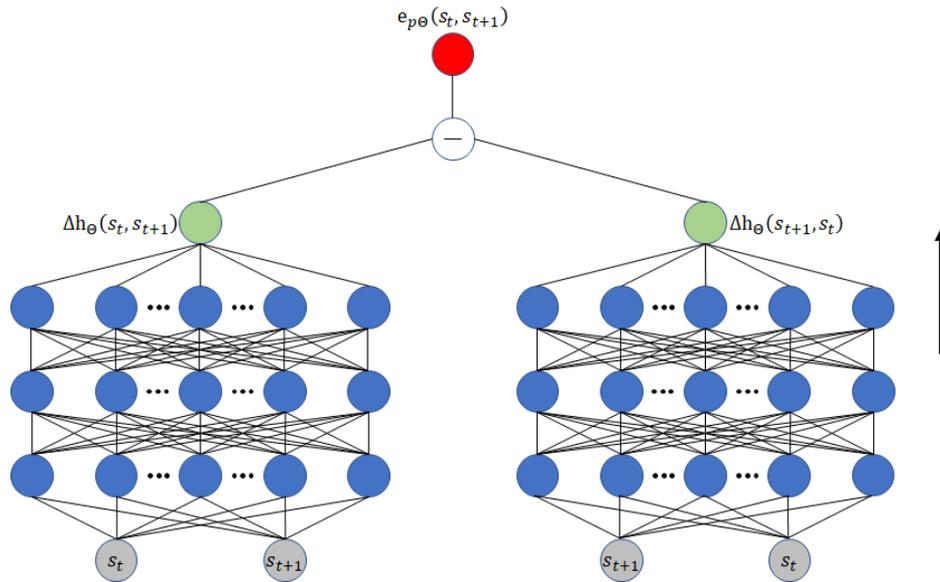


Figura 4.1: Ilustración de dos perceptrones multicapa con tres capas ocultas cada uno y cuya salida se usa para obtener una sola salida.

Actualización de pesos: los pesos se ajustan usando algoritmos de optimización como el descenso de gradiente, iterando hasta minimizar la pérdida global.

La retropropagación comienza en la capa de salida porque ahí se puede evaluar directamente el error. Cada capa ajusta sus pesos según el gradiente correspondiente, lo que permite que la red aprenda relaciones complejas y mejore su capacidad de predicción.

4.2. Estimación de producción de entropía a través de aprendizaje de máquina

Para una trayectoria codificada en el vector $s = (s_1, s_2, \dots, s_L)$ tomamos una función $h_{\Theta}(s_t, s_{t+1})$ donde $\Theta = (\theta, \mu, \sigma)$ son los parámetros del modelo, que constituyen los elementos que determinan la estructura y el comportamiento del modelo estimador h_{Θ} , como en la figura 4.1. La manera en que estos parámetros se interpretan depende directamente del tipo de función que se utilice. De manera general, en el marco de los sistemas dinámicos y del aprendizaje de máquina, pueden entenderse de la siguiente forma:

θ : suele representar un vector de parámetros libres o pesos asociados al modelo,

μ : comúnmente se interpreta como un parámetro de localización o media,

σ : típicamente denota la desviación estándar o parámetro de dispersión.

Y la salida del estimador será

$$e_{p\Theta}(s_t, s_{t+1}) = h_{\Theta}(s_t, s_{t+1}) - h_{\Theta}(s_{t+1}, s_t). \quad (4.2)$$

Al estilo de [28], dada la forma que tiene, se propone la función

$$J(\theta) = e_{p\Theta}(s_t, s_{t+1}) - e^{-e_{p\Theta}(s_t, s_{t+1})},$$

que al optimizar, es decir, imponer la condición

$$\frac{\partial J}{\partial h_{\Theta}} = 0, \quad (4.3)$$

se obtiene para estado estacionario la relación

$$e_{p\Theta} = -\ln \left(\frac{P_{\Theta}(s_{t+1}|s_t)}{P_{\Theta}(s_t|s_{t+1})} \right), \quad (4.4)$$

compatible con la ecuación 4.1, que es la producción de entropía estocástica [29], donde $P_{\Theta}(s_{t+1}|s_t)$ y $P_{\Theta}(s_t|s_{t+1})$ son las probabilidades de transición hacia adelante y hacia atrás, respectivamente.

Junto con la función de verosimilitud dada por

$$\mathcal{L}(\mu, \sigma) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2} \sqrt{|\sigma|}} \exp \left(-\frac{1}{2} [s - \mu] \sigma^{-1} [s - \mu]^T \right).$$

donde μ es el vector de medias de los datos y σ es la matriz de covarianza. Esta función esta encargada de asegurar que los parámetros (μ, σ) del modelo se ajusten adecuadamente a los datos observados.

Así, al proponer la función objetivo a ser maximizada como

$$\mathcal{F}(\Theta) = J(\theta)\mathcal{L}(\mu, \sigma).$$

se logra un balance natural entre la fidelidad a la definición terica de la producción de entropía y la consistencia estadística con los datos, de manera que la optimización simultánea promueve soluciones que son tanto físicamente significativas como estadísticamente confiables. Este enfoque permite integrar de forma directa criterios teóricos y empíricos dentro de un mismo marco de optimización, lo cual resulta especialmente útil en el estudio de sistemas dinámicos estocásticos.

La optimización para entrenar el modelo se propone hacer mediante el método de ascenso del gradiente estocástico dado por la ecuación en diferencias

$$\Theta_{n+1} = \Theta_n + \gamma \nabla \mathcal{F}(\Theta_n), \gamma \in \mathbb{R}_+,$$

la cual es una técnica utilizada para optimizar funciones en las que se busca maximizar un valor objetivo. A diferencia del descenso de gradiente tradicional, que calcula el gradiente utilizando todo el conjunto de datos, el ascenso de gradiente estocástico actualiza los parámetros utilizando solo un subconjunto aleatorio de los datos en cada iteración. Esto permite realizar actualizaciones más frecuentes y rápidas, favoreciendo la exploración de la superficie de la función y evitando quedar atrapado fácilmente en máximos locales. Cada actualización se realiza en la dirección del gradiente de la función objetivo respecto a los parámetros, ajustando éstos para aumentar el valor de la función de manera incremental hasta alcanzar una convergencia.

4.3. Caso de dos osciladores acoplados

Utilizando el modelo propuesto se consideran dos osciladores acoplados como un ejemplo para estudiar la producción de entropía en un sistema dinámico con dos grados de libertad. Este sistema permite analizar las características disipativas y los efectos del acoplamiento entre las componentes, que resultan relevantes en sistemas termodinámicos fuera del equilibrio.

El sistema se modela mediante la ecuación de Langevin acoplada o proceso de Ornstein-Uhlenbeck de dimensión 2:

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = -B \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \eta_1(t) \\ \eta_2(t) \end{pmatrix} \quad (4.5)$$

donde B es la matriz de acoplamiento, y $\eta(t)$ es un término de ruido estocástico con la siguiente propiedad:

$$\langle \eta(t) \eta^T(t') \rangle = 2D \delta(t - t') \quad (4.6)$$

donde D es la matriz de difusión.

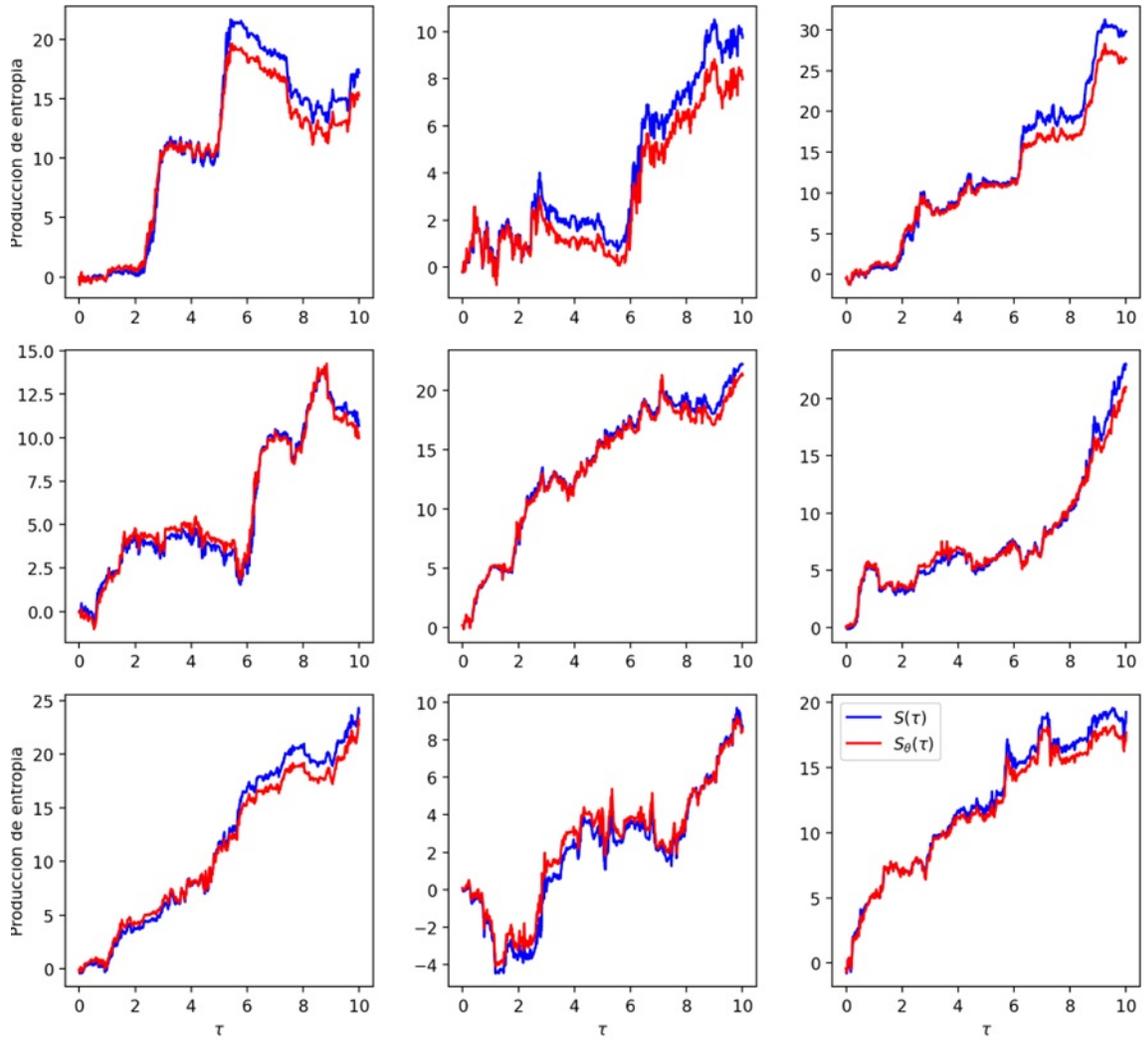
A través de simulaciones numéricas en el ejemplo de osciladores acoplados y el desarrollo de un estimador basado en el principio de maximización de la verosimilitud, se logran varios hallazgos clave:

Estimación efectiva de la producción de entropía: La aplicación del estimador de producción de entropía permitió obtener una estimación precisa de la tasa de producción de entropía para el sistema de dos osciladores acoplados. Al utilizar la función de verosimilitud y la técnica de ascenso del gradiente estocástico, se maximizaron los parámetros θ , lo que proporcionó una evaluación cuantitativa consistente de la irreversibilidad en el sistema.

Impacto del acoplamiento en la disipación de energía: Los resultados mostraron que el acoplamiento entre los osciladores, representado por los parámetros b y c en la matriz de acoplamiento, juega un papel crucial en la producción de entropía. A medida que aumentaba el acoplamiento, se observaba un incremento en la tasa de producción de entropía, lo que refleja un aumento en la irreversibilidad del sistema debido a la interacción entre los osciladores.

Relación entre la disipación y los parámetros del sistema: Para el caso dos dimensional, la producción de entropía en el sistema depende de los valores de los parámetros a , b , c , d (acoplamiento) y u , v , w (disipación). Se demostró que, cuando los parámetros de disipación (u y v) eran grandes, la producción de entropía también aumentaba, lo que señala la influencia dominante de la disipación en sistemas estocásticos.

Confirmación de los resultados analíticos mediante simulaciones: Las simulaciones numéricas realizadas para los osciladores acoplados corroboran las predicciones obtenidas mediante el modelo analítico de producción de entropía. Esta consistencia entre los resultados analíticos y los simulados valida el enfoque propuesto y refuerza su aplicabilidad en sistemas



dinámicos más complejos.

Aplicabilidad del estimador en sistemas reales: La metodología de estimación basada en aprendizaje de máquina demuestra un gran potencial para su aplicación en sistemas físicos reales, como sistemas oscilatorios en medios viscoelásticos o sistemas biológicos. En particular, los métodos presentados pueden ser útiles para analizar la producción de entropía en sistemas con ruido y correlaciones temporales complejas, donde los métodos tradicionales de cálculo podrían no ser prácticos.

En resumen, este capítulo demuestra que el uso de técnicas avanzadas de estimación de entropía proporciona una herramienta robusta y precisa para estudiar la irreversibilidad y la disipación en sistemas dinámicos. Además, la combinación de modelos estocásticos con métodos de aprendizaje de máquina abre nuevas posibilidades para el análisis de sistemas más complejos, lo cual puede ser fundamental para la comprensión de fenómenos fuera del equilibrio en diversas disciplinas.

Conclusiones y trabajo futuro

Conclusiones

Esta tesis aborda la producción de entropía en sistemas dinámicos desde diversas perspectivas teóricas y prácticas, destacando su relevancia en la termodinámica fuera del equilibrio y en el análisis de sistemas complejos. Entre los principales avances se encuentran:

Se estudió la producción de entropía en el contexto de los sistemas dinámicos disipativos. Se reobtuvo la fórmula para la producción de entropía en estos sistemas, en la que la divergencia del campo vectorial del sistema dinámico y a la probabilidad termodinámica de los estados. Este enfoque permite conectar la generación de calor y la distribución de energía con la evolución del sistema.

A través del análisis de la entropía de Shannon y las medidas invariantes, se mostró que existe una relación directa entre los fundamentos probabilísticos y la producción de entropía. Esto refuerza la importancia de la teoría ergódica como herramienta para describir la dinámica de sistemas no lineales y caóticos.

Este caso particular permitió ilustrar la producción de entropía en un sistema estocástico con dos y tres grados de libertad. Las expresiones analíticas obtenidas resaltan cómo la interacción entre ruido y correlaciones temporales influye en la disipación y la estabilidad del sistema.

El estado estacionario fuera del equilibrio de un proceso de Ornstein-Uhlenbeck multivariable con N grados de libertad permite derivar una expresión analítica para la tasa de producción de entropía.

Uso de aprendizaje de máquina y estimación de entropía: En el capítulo introduce un enfoque novedoso para la estimación de producción de entropía basado en técnicas de aprendizaje automático. Además, se presentan casos prácticos, como el análisis de

dos osciladores acoplados, que ilustran la aplicabilidad del modelo en sistemas dinámicos complejos.

En general, la producción de entropía se presenta como una medida fundamental para describir la irreversibilidad y la dinámica fuera del equilibrio en sistemas físicos y matemáticos. Y en conjunto, la tesis propone un enfoque unificado que conecta aspectos teóricos y herramientas computacionales para comprender la producción de entropía en sistemas dinámicos.

Trabajo futuro

Como trabajo futuro, al menos en la parte práctica, se podría intentar implementar el enfoque propuesto en sistemas físicos reales, como en sistemas biológicos, podría demostrar su aplicabilidad en contextos experimentales. En particular, se podrían realizar pruebas controladas en laboratorio para medir parámetros clave, como las tasas de disipación de energía y su correlación con las predicciones del modelo. Además, el uso de sistemas experimentales accesibles, como péndulos acoplados o circuitos eléctricos con pérdidas, podría facilitar una validación más amplia y robusta.

Por otra parte se podría aplicar el esquema de aprendizaje de máquinas en otros sistemas dinámicos sencillos que presenten producción de entropía positiva en la que se pueda calcular de forma explícita y así como en algunos en donde no se conozca de forma explícita, con tal de dar estimaciones. También se podría usar en el caso de sistemas con datos incompletos o ruido significativo

Apéndice A

Apéndice: Códigos

A.1. Simulaciones en Python

Espacio fase del péndulo simple

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy.integrate import solve_ivp

# Parámetros del péndulo
g = 9.81      # aceleración gravitacional (m/s2)
l = 1.0      # longitud del péndulo (m)

# Ecuaciones del péndulo no lineal
def pendulo_nolineal(t, y):
    theta, omega = y
    dtheta_dt = omega
    domega_dt = - (g / l) * np.sin(theta)
    return [dtheta_dt, domega_dt]

# Condiciones iniciales para generar curvas en el espacio fase
condiciones_iniciales = [
```

```
(-1, -1), (-1, 0), (-1, 1), (0, -1), (0, 0), (0, 1), (1, -1), (1, 0),
(1, 1), (-2, -2), (-2, -1), (-2, 0), (-2, 1), (-2, 2), (-1, -2),
(-1, 2), (0, -2), (0, 2), (1, -2), (1, 2), (2, -2), (2, -1), (2, 0),
(2, 1), (2, 2), (-3, -3), (-3, -2), (-3, -1), (-3, 0), (-3, 1),
(-3, 2), (-3, 3), (-2, -3), (-2, 3), (-1, -3), (-1, 3), (0, -3),
(0, 3), (1, -3), (1, 3), (2, -3), (2, 3), (3, -3), (3, -2), (3, -1),
(3, 0), (3, 1), (3, 2), (3, 3), (-4, -4), (-4, -3), (-4, -2),
(-4, -1), (-4, 0), (-4, 1), (-4, 2), (-4, 3), (-4, 4), (-3, -4),
(-3, 4), (-2, -4), (-2, 4), (-1, -4), (-1, 4), (0, -4), (0, 4),
(1, -4), (1, 4), (2, -4), (2, 4), (3, -4), (3, 4), (4, -4), (4, -3),
(4, -2), (4, -1), (4, 0), (4, 1), (4, 2), (4, 3), (4, 4), (-5, -5),
(-5, -4), (-5, -3), (-5, -2), (-5, -1), (-5, 0), (-5, 1), (-5, 2),
(-5, 3), (-5, 4), (-5, 5), (-4, -5), (-4, 5), (-3, -5), (-3, 5),
(-2, -5), (-2, 5), (-1, -5), (-1, 5), (0, -5), (0, 5), (1, -5),
(1, 5), (2, -5), (2, 5), (3, -5), (3, 5), (4, -5), (4, 5), (5, -5),
(5, -4), (5, -3), (5, -2), (5, -1), (5, 0), (5, 1), (5, 2), (5, 3),
(5, 4), (5, 5), (-6, -6), (-6, -5), (-6, -4), (-6, -3), (-6, -2),
(-6, -1), (-6, 0), (-6, 1), (-6, 2), (-6, 3), (-6, 4), (-6, 5),
(-6, 6), (-5, -6), (-5, 6), (-4, -6), (-4, 6), (-3, -6), (-3, 6),
(-2, -6), (-2, 6), (-1, -6), (-1, 6), (0, -6), (0, 6), (1, -6),
(1, 6), (2, -6), (2, 6), (3, -6), (3, 6), (4, -6), (4, 6), (5, -6),
(5, 6), (6, -6), (6, -5), (6, -4), (6, -3), (6, -2), (6, -1), (6, 0),
(6, 1), (6, 2), (6, 3), (6, 4), (6, 5), (6, 6)]
```

```
# Tiempo de simulación
t_span = (-10, 10)
t_eval = np.linspace(*t_span, 1000)

# Graficar espacio fase
plt.figure(figsize=(8, 6))
for theta0, omega0 in condiciones_iniciales:
    sol = solve_ivp(pendulo_nolineal, t_span, [theta0, omega0], t_eval=t_eval)
```

```
plt.plot(sol.y[0],sol.y[1],
         label=f"$\\theta_0$={theta0},$\\omega_0$={omega0}")

plt.xlim(-10, 10)
plt.ylim(-8, 8)
plt.title("Espacio fase del péndulo simple no lineal")
plt.xlabel("Ángulo (rad)")
plt.ylabel("Velocidad angular (rad/s)")
plt.grid(True)
plt.axhline(0, color='gray', linewidth=0.5)
plt.axvline(0, color='gray', linewidth=0.5)
plt.tight_layout()
plt.show()
```

Espacio fase del sistema Lorenz

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy.integrate import solve_ivp

# Parámetros del sistema
sigma = 10
rho = 28
beta = 8/3

# Ecuaciones del sistema
def lorenz(t, r):
    x, y, z = r
    dx_dt = sigma * (y - x)
    dy_dt = x * (rho - z) - y
    dz_dt = x * y - beta * z
    return [dx_dt, dy_dt, dz_dt]
```

```
# Condiciones iniciales para generar curvas en el espacio fase
condiciones_iniciales = [
(-1,-1,-1),(-1,-1,0),(-1,-1,1),(-1,0,-1),(-1,0,0),(-1,0,1),
(-1,1,-1),(-1,1,0),(-1,1,1),(0,-1,-1),(0,-1,0),(0,-1,1),(0,0,-1),
(0,0,0),(0,0,1),(0,1,-1),(0,1,0),(0,1,1),(1,-1,-1),(1,-1,0),
(1,-1,1),(1,0,-1),(1,0,0),(1,0,1),(1,1,-1),(1,1,0),(1,1,1)
]

# Tiempo de simulación
t_span = (-10, 10)
t_eval = np.linspace(*t_span, 1000)

# Graficar espacio fase
plt.figure(figsize=(5, 6))
for x0, y0, z0 in condiciones_iniciales:
sol = solve_ivp(lorenz, t_span, [x0, y0, z0], t_eval=t_eval)
plt.plot(sol.y[0], sol.y[1], label=f"$\\x_0$={x0}, $\\y_0$={y0}")

plt.title("Proyección de espacio fase del sistema de Lorenz en xy")
plt.xlabel("x")
plt.ylabel("y")
plt.grid(True)
plt.axhline(0, color='gray', linewidth=0.5)
plt.axvline(0, color='gray', linewidth=0.5)
plt.tight_layout()
plt.show()

plt.figure(figsize=(5.5, 5.5))
for x0, y0, z0 in condiciones_iniciales:
sol = solve_ivp(lorenz, t_span, [x0, y0, z0], t_eval=t_eval)
plt.plot(sol.y[1], sol.y[2], label=f"$\\y_0$={y0}, $\\z_0$={z0}")
```

```
plt.title("Proyección del espacio fase del sistema de Lorenz en yz")
plt.xlabel("y")
plt.ylabel("z")
plt.grid(True)
plt.axhline(0, color='gray', linewidth=0.5)
plt.axvline(0, color='gray', linewidth=0.5)
plt.tight_layout()
plt.show()
```

```
plt.figure(figsize=(6, 5))
for x0, y0, z0 in condiciones_iniciales:
    sol = solve_ivp(lorenz, t_span, [x0, y0, z0], t_eval=t_eval)
    plt.plot(sol.y[2], sol.y[0], label=f"$\\z_0$={z0}, $\\x_0$={x0}")
```

```
plt.title("Proyección del espacio fase del sistema de Lorenz en xz")
plt.xlabel("z")
plt.ylabel("x")
plt.grid(True)
plt.axhline(0, color='gray', linewidth=0.5)
plt.axvline(0, color='gray', linewidth=0.5)
plt.tight_layout()
plt.show()
```

Mapeo logístico

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

def logistic_map(r, x0, n_iter):
    # Simula el mapeo logístico para un valor de r
    # y condición inicial x0.
    x = np.zeros(n_iter)
    x[0] = x0
```

```
for n in range(1, n_iter):
x[n] = r * x[n-1] * (1 - x[n-1])
return x

# Parámetros de la simulación
r_values = [2.5, 3.2, 3.5, 3.8, 4.0]
x0 = 0.5 # Condición inicial
n_iter = 100 # Número de iteraciones

# Graficar la evolución para distintos valores de r
plt.figure(figsize=(10, 6))
for r in r_values:
x = logistic_map(r, x0, n_iter)
plt.plot(range(n_iter), x, label=f"r = {r}")

plt.title("Simulación del mapeo logístico")
plt.xlabel("Iteración")
plt.ylabel("$x_n$")
plt.legend()
plt.grid(True)
plt.show()
```

Diagrama cobweb del mapeo logístico

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

# Parámetros del mapa logístico
r = 3.5 # parámetro de bifurcación
x0 = 0.2 # condición inicial

# Número de iteraciones
n_iter = 50
```

```

# Mapeo logístico
def logistic_map(x):
    return r * x * (1 - x)

# Generar puntos de la órbita
x_vals = [x0]
for _ in range(n_iter):
    x_vals.append(logistic_map(x_vals[-1]))

# Preparar gráfica cobweb
x = np.linspace(0, 1, 500)
y = logistic_map(x)

plt.figure(figsize=(8, 8))
plt.plot(x, y, 'k', label='Mapeo logístico')           # Curva f(x)
plt.plot(x, x, 'r--', label='Identidad')              # Línea y = x

# Dibujar la telaraña
xn = x0
for _ in range(n_iter):
    yn = logistic_map(xn)
    plt.plot([xn, xn], [xn, yn], 'b', lw=1)           # línea vertical
    plt.plot([xn, yn], [yn, yn], 'b', lw=1)           # línea horizontal
    xn = yn

plt.title(f'Cobweb del Mapeo Logístico (r={r}, $x_0$={x0})')
plt.xlabel('$x_n$')
plt.ylabel('$x_{n+1}$')
plt.grid(True)
plt.legend()
plt.show()

```

Mapeo de Hénon

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

# Parámetros del mapeo de Hénon
a,b = 1.4, 0.3

# Número de iteraciones
N = 100000

# Condiciones iniciales
x, y = 0.0, 0.0

# Listas para guardar la trayectoria
x_vals = []
y_vals = []

for _ in range(N):
    x_new = 1 - a * x**2 + y
    y_new = b * x
    x, y = x_new, y_new
    x_vals.append(x)
    y_vals.append(y)

# Visualización
plt.figure(figsize=(8, 8))
plt.plot(x_vals, y_vals, ',b', alpha=0.3)
plt.title("Mapeo de Hénon")
plt.xlabel("x")
plt.ylabel("y")
plt.grid(True)
plt.show()
```

Espacio fase de la silla hamiltoniana

```

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy.integrate import solve_ivp

# Parámetro del sistema
lam = 4.0 # Puedes cambiar el valor de lambda

# Ecuaciones de Hamilton
def hamiltonian_chair(t, z):
    x, y = z
    dx_dt = lam * y
    dy_dt = lam * x
    return dx_dt, dy_dt

# Condiciones iniciales y tiempo de integración
t_span = (0, 10)
t_eval = np.linspace(*t_span, 1000)

# Múltiples condiciones iniciales para el retrato de fase
initial_conditions = [
    (-1, -1), (-1, 0), (-1, 1), (0, -1), (0, 0), (0, 1), (1, -1), (1, 0),
    (1, 1), (-2, -2), (-2, -1), (-2, 0), (-2, 1), (-2, 2), (-1, -2),
    (-1, 2), (0, -2), (0, 2), (1, -2), (1, 2), (2, -2), (2, -1), (2, 0),
    (2, 1), (2, 2), (-3, -3), (-3, -2), (-3, -1), (-3, 0), (-3, 1),
    (-3, 2), (-3, 3), (-2, -3), (-2, 3), (-1, -3), (-1, 3), (0, -3),
    (0, 3), (1, -3), (1, 3), (2, -3), (2, 3), (3, -3), (3, -2), (3, -1),
    (3, 0), (3, 1), (3, 2), (3, 3), (-4, -4), (-4, -3), (-4, -2),
    (-4, -1), (-4, 0), (-4, 1), (-4, 2), (-4, 3), (-4, 4), (-3, -4),
    (-3, 4), (-2, -4), (-2, 4), (-1, -4), (-1, 4), (0, -4), (0, 4),
    (1, -4), (1, 4), (2, -4), (2, 4), (3, -4), (3, 4), (4, -4), (4, -3),
    (4, -2), (4, -1), (4, 0), (4, 1), (4, 2), (4, 3), (4, 4), (-5, -5),

```

```
(-5, -4), (-5, -3), (-5, -2), (-5, -1), (-5, 0), (-5, 1), (-5, 2),  
(-5, 3), (-5, 4), (-5, 5), (-4, -5), (-4, 5), (-3, -5), (-3, 5),  
(-2, -5), (-2, 5), (-1, -5), (-1, 5), (0, -5), (0, 5), (1, -5),  
(1, 5), (2, -5), (2, 5), (3, -5), (3, 5), (4, -5), (4, 5), (5, -5),  
(5, -4), (5, -3), (5, -2), (5, -1), (5, 0), (5, 1), (5, 2), (5, 3),  
(5, 4), (5, 5)
```

```
]
```

```
# Graficar el retrato de fase  
plt.figure(figsize=(6, 6))  
for z0 in initial_conditions:  
    sol = solve_ivp(hamiltonian_chair, t_span, z0, t_eval=t_eval)  
    plt.plot(sol.y[0], sol.y[1], label=f'z0={z0}')  
  
plt.xlim(-6,6)  
plt.ylim(-6,6)  
plt.xlabel('q')  
plt.ylabel('p')  
plt.title('Espacio fase de la silla hamiltoniana')  
plt.grid()  
plt.axhline(0, color='black', linewidth=0.5)  
plt.axvline(0, color='black', linewidth=0.5)  
plt.show()
```

Curvas de nivel de la silla hamiltoniana

```
import numpy as np  
import matplotlib.pyplot as plt  
  
lamda = 1.0 # Parámetro del Hamiltoniano  
x = np.linspace(-2, 2, 400) # Crear una malla de puntos (x, y)  
y = np.linspace(-2, 2, 400)  
X, Y = np.meshgrid(x, y)
```

```
# Definir el Hamiltoniano H(x, y)
H = lamda * (Y**2 - X**2)

# Graficar curvas de nivel
plt.figure(figsize=(5, 5))
contours = plt.contour(X,Y,H,levels=np.linspace(-4,4,21),cmap='RdBu')
plt.clabel(contours, inline=True, fontsize=8)
plt.axhline(0, color='black', linewidth=0.5)
plt.axvline(0, color='black', linewidth=0.5)
plt.title(r'Curvas de nivel de  $H(q, p) = \lambda(p^2 - q^2)$ ')
plt.xlabel('q')
plt.ylabel('p')
plt.grid(True)
plt.axis('equal')
plt.show()
```

Superficie generada por un hamiltoniano

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D

# Parámetro lambda
lmbda = 1.0 # Puedes cambiar este valor

# Rango de valores para x e y
x = np.linspace(-2, 2, 100)
y = np.linspace(-2, 2, 100)
X, Y = np.meshgrid(x, y)

# Hamiltoniano  $H(x, y) = \lambda(y^2 - x^2)$ 
H = lmbda * (Y**2 - X**2)
```

```
# Graficar la superficie
fig = plt.figure(figsize=(10, 7))
ax = fig.add_subplot(111, projection='3d')
ax.plot_surface(X, Y, H, cmap='viridis', edgecolor='none')
ax.set_title(r'Superficie de $H(q,p)=\lambda (q^2-p^2)$')
ax.set_xlabel('q')
ax.set_ylabel('p')
ax.set_zlabel('H(q, p)')

plt.show()
```

A.2. Cálculo de producción de entropía en un proceso de Ornstein-Uhlenbeck en dimensión 3.

```
import sympy as sp

a,b,c,d,e,f,g,h,i = sp.symbols('a b c d e f g h i')
u,v,w,x,y,z = sp.symbols('u v w x y z')
B = sp.Matrix([[a, b, c],
               [d, e, f],
               [g, h, i]])
D = sp.Matrix([[u, x, z],
               [x, v, y],
               [z, y, w]])
M = sp.Matrix([[2*a, 0, 0, 2*b, 0, 2*c],
               [0, 2*e, 0, 2*d, 2*f, 0],
               [0, 0, 2*i, 0, 2*h, 2*g],
               [d, b, 0, a+e, c, f],
               [0, h, f, g, e+i, d],
               [g, 0, c, h, b, a+i]])
det = sp.factor(M.det())
```

```

M1 = sp.Matrix([[2*u, 0, 0, 2*b, 0, 2*c],
                [2*v, 2*e, 0, 2*d, 2*f, 0 ],
                [2*w, 0, 2*i, 0, 2*h, 2*g],
                [2*x, b, 0, a+e, c, f ],
                [2*y, h, f, g, e+i, d ],
                [2*z, 0, c, h, b, a+i]])
det1 = sp.collect(sp.simplify(M1.det()),{8*u,8*v,8*w,16*x,16*y,16*z})
s1 = sp.simplify(det1/det)

```

```

M2 = sp.Matrix([[2*a, 2*u, 0, 2*b, 0, 2*c],
                [ 0, 2*v, 0, 2*d, 2*f, 0 ],
                [ 0, 2*w, 2*i, 0, 2*h, 2*g],
                [ d, 2*x, 0, a+e, c, f ],
                [ 0, 2*y, f, g, e+i, d ],
                [ g, 2*z, c, h, b, a+i]])
det2 = sp.collect(sp.simplify(M2.det()),{8*u,8*v,8*w,16*x,16*y,16*z})
s2 = sp.simplify(det2/det)

```

```

M3 = sp.Matrix([[2*a, 0, 2*u, 2*b, 0, 2*c],
                [ 0, 2*e, 2*v, 2*d, 2*f, 0 ],
                [ 0, 0, 2*w, 0, 2*h, 2*g],
                [ d, b, 2*x, a+e, c, f ],
                [ 0, h, 2*y, g, e+i, d ],
                [ g, 0, 2*z, h, b, a+i]])
det3 = sp.collect(sp.simplify(M3.det()),{8*u,8*v,8*w,16*x,16*y,16*z})
s3 = sp.simplify(det3/det)

```

```

M4 = sp.Matrix([[2*a, 0, 0, 2*u, 0, 2*c],
                [ 0, 2*e, 0, 2*v, 2*f, 0 ],
                [ 0, 0, 2*i, 2*w, 2*h, 2*g],
                [ d, b, 0, 2*x, c, f ],

```

```

        [ 0,  h,  f,  2*y,  e+i,  d ],
        [ g,  0,  c,  2*z,  b,  a+i]])
det4 = sp.collect(sp.simplify(M4.det()),{8*u,8*v,8*w,16*x,16*y,16*z})
s4 = sp.simplify(det4/det)

M5 = sp.Matrix([[2*a,  0,  0,  2*b,  2*u,  2*c],
                [ 0,  2*e,  0,  2*d,  2*v,  0 ],
                [ 0,  0,  2*i,  0,  2*w,  2*g],
                [ d,  b,  0,  a+e,  2*x,  f ],
                [ 0,  h,  f,  g,  2*y,  d ],
                [ g,  0,  c,  h,  2*z,  a+i]])
det5 = sp.collect(sp.simplify(M5.det()),{8*u,8*v,8*w,16*x,16*y,16*z})
s5 = sp.simplify(det5/det)

M6 = sp.Matrix([[2*a,  0,  0,  2*b,  0,  2*u],
                [ 0,  2*e,  0,  2*d,  2*f,  2*v],
                [ 0,  0,  2*i,  0,  2*h,  2*w],
                [ d,  b,  0,  a+e,  c,  2*x],
                [ 0,  h,  f,  g,  e+i,  2*y],
                [ g,  0,  c,  h,  b,  2*z]])
det6 = sp.collect(sp.simplify(M6.det()),{8*u,8*v,8*w,16*x,16*y,16*z})
s6 = sp.simplify(det6/det)

MERR = sp.Matrix([[1, 0, 0, 0, 0, 0, s1],
                  [0, 1, 0, 0, 0, 0, s2],
                  [0, 0, 1, 0, 0, 0, s3],
                  [0, 0, 0, 1, 0, 0, s4],
                  [0, 0, 0, 0, 1, 0, s5],
                  [0, 0, 0, 0, 0, 1, s6]])
S = sp.Matrix([[s1, s4, s6],
               [s4, s2, s5],
               [s6, s5, s3]])

```

```
Q = sp.simplify(B*S - D)

T = sp.simplify(D.inv()*B*Q)

ep3 = sp.factor(sp.simplify(-sp.trace(T)))
print(ep3)

ep2 = sp.factor(sp.simplify(
    ep3.subs({c:0,f:0,g:0,h:0,i:1,w:1,y:0,z:0})))
print(ep2)
```

A.3. Estimador de producción de entropía en un sistema de Ornstein-Uhlenbeck

```
import sys

sys.path.append('.')

from argparse import Namespace

import numpy as np
import pandas as pd
import torch
import torch.nn as nn
import torch.nn.functional as F
from scipy import stats
from tqdm.notebook import tqdm

import matplotlib.pyplot as plt
import seaborn as sns
from muestras import muestra
```

```
from ornstein_uhlenbeck import simulacion, dif_entropia_medio,
                                dif_entropia_shannon
from mpl_toolkits.axes_grid1.inset_locator import inset_axes

#Estimador

class estimador(nn.Module):
    def __init__(self, hp):
        super(estimador, self).__init__()
        self.h = nn.Sequential(
            nn.Linear(2*hp.n_entrada, hp.n_ocultas),
            nn.ReLU(inplace=True),
            nn.Linear(hp.n_ocultas, hp.n_ocultas),
            nn.ReLU(inplace=True),
            nn.Linear(hp.n_ocultas, hp.n_ocultas),
            nn.ReLU(inplace=True),
            nn.Linear(hp.n_ocultas, 2)
        )

    def forward(self, s1, s2):
        x = torch.cat([s1, s2], dim=-1)
        x_ = torch.cat([s2, s1], dim=-1)

        salida = self.h(x) - self.h(x_)
        media = salida[:, 0].unsqueeze(-1)
        log_desviacion_estandar = salida[:, 1].unsqueeze(-1)

    return media, log_desviacion_estandar

#Algoritmo de entrenamiento

def entrenar(hp, modelo, optimizador, trayectorias, muestra_):
```

```
modelo.train()
turno, turno_siguiente = next(muestra_)

s_ant = trayectorias[turno].to(hp.procesamiento)
s_sig = trayectorias[turno_siguiente].to(hp.procesamiento)
produccion_entropia, log_sigma = modelo(s_ant, s_sig)

optimizador.zero_grad()

# Función objetivo
J = (-produccion_entropia + torch.exp(-produccion_entropia)).mean()
log_verosimilitud = -((-0.5*torch.log(2*torch.pi*torch.exp(
    log_sigma)**2))-0.5*((s_sig-produccion_entropia)**2
    /torch.exp(log_sigma)**2)).sum(dim=-1)).mean()
perdida = J * log_verosimilitud

perdida.backward()
optimizador.step()
return perdida.item()

def validar(hp, modelo, trayectorias, muestra_):
    modelo.eval()

    ret = []
    perdida = 0
    with torch.no_grad():
        for turno, turno_siguiente in muestra_:
            s_ant = trayectorias[turno].to(hp.procesamiento)
            s_sig = trayectorias[turno_siguiente].to(hp.procesamiento)

            produccion_entropia, _ = modelo(s_ant, s_sig)
            entropia = produccion_entropia.cpu().squeeze().numpy()
```

```
ret.append(entropia)
perdida += (-produccion_entropia
            + torch.exp(-produccion_entropia)).sum().cpu().item()
perdida = perdida / muestra_.tamaño
ret = np.concatenate(ret)
ret = ret.reshape(trayectorias.shape[0], trayectorias.shape[1]-1)
return ret, perdida

#Hiperparámetros

hp = Namespace()
hp.procesamiento = 'cpu'
hp.tamaño_entrada = 2048
hp.tamaño_entrada_prueba = 25000
hp.n_entrada = 2
hp.n_ocultas = 256

hp.lr = 0.0001
hp.wd = 5e-5

hp.record_freq = 1000
hp.seed = np.random.randint(0, 100)

torch.manual_seed(hp.seed)

#Trayectorias

hp.M = 100          # numero de trayectorias
hp.L = 1000        # longitud de una trayectoria
hp.n_libertad = 2  # número de grados de libertad
hp.Tf = 1          # temperature fría
hp.Tc = 10         # temperature caliente
```

```

hp.time_step = 0.01 # tamaño del paso de tiempo

trayectorias = simulacion(hp.M, hp.L, hp.n_libertad, hp.Tf,
                          hp.Tc, hp.time_step, seed=0)
trayectorias_prueba = simulacion(hp.M, hp.L, hp.n_libertad, hp.Tf,
                                  hp.Tc, hp.time_step, seed=1)

trayectorias_t = trayectorias.to(hp.procesamiento).float()
trayectorias_prueba_t=trayectorias_prueba.to(hp.procesamiento).float()

#Entrenamiento

modelo = estimador(hp)
modelo = modelo.to(hp.procesamiento)
optimizador = torch.optim.Adam(modelo.parameters(),
                                hp.lr, weight_decay=hp.wd)

muestra_entrenamiento=muestra(hp.M, hp.L, hp.tamaño_entrada,
                               procesamiento=hp.procesamiento)
muestra_prueba=muestra(hp.M, hp.L, hp.tamaño_entrada_prueba,
                       procesamiento=hp.procesamiento, entrenar=False)

# Salidas antes de comenzar el entrenamiento
salida_inicial, _ = validar(hp, modelo,
                           trayectorias_prueba_t, muestra_prueba)

# Producción de entropía analítica
entropia=dif_entropia_medio(trayectorias_prueba[:100], hp.Tf, hp.Tc)
+dif_entropia_shannon(trayectorias_prueba[:100], hp.Tf, hp.Tc)

#def plot_scatter(salida_, entropia_):
salida_rate, _, r_value, pvalue, _ = stats.linregress(entropia_, salida_)

```

Apéndice A. Apéndice: Códigos

```
plt.figure(figsize=(4,4), dpi=100)
sns.regplot(x=entropia_, y=salida_,
color='r',
line_kws={'lw':1.5, 'label': '$R^2=%.4f$ p-value: %.4f'
          %(r_value**2, pvalue)},
scatter_kws={'color':'k', 'alpha':0.3, 's':3, 'rasterized':True})
plt.xlabel('$\Delta S$', fontsize=12)
plt.ylabel('$\Delta S_{\theta}$', fontsize=12)
plt.legend()

indice = np.random.randint(0, 100)
salida_ = salida_inicial[indice]
entropia_ = entropia[indice]
plot_scatter(salida_, entropia_.numpy())

hp.n_iteraciones = 1000 # número de iteraciones de entrenamiento

for i in tqdm(range(1, hp.n_iteraciones + 1)):
    entrenar(hp, modelo, optimizador,
             trayectorias_t, muestra_entrenamiento)

#Prueba

salida, _ = validar(hp, modelo, trayectorias_prueba_t, muestra_prueba)

# Producción de entropía analítica
entropia=dif_entropia_medio(trayectorias_prueba[:100],hp.Tf, hp.Tc)
+dif_entropia_shannon(trayectorias_prueba[:100],hp.Tf, hp.Tc)

#Resultados
#Producción de entropía
```

```
indice = np.random.randint(0, 100)
entropia_ = entropia[indice]
salida_ = salida[indice]
plot_scatter(salida_, entropia_.numpy())
{entropia.shape, salida.shape}

#Producción de entropía

indice = np.random.randint(0, 100)
entropia_ = entropia[indice]
salida_ = salida[indice]

salida_c = np.cumsum(salida, axis=1)
entropia_c = np.cumsum(entropia, axis=1)

ts = np.linspace(0, hp.L * hp.time_step, num=hp.L - 1)

plt.figure(dpi=100)
plt.plot(ts, np.cumsum(entropia_), lw=3, alpha=0.5, color='b',
label='$S(t)$')
plt.plot(ts, np.cumsum(salida_), lw=1, color='r',
label='$S_{\theta}(t)$')
plt.plot([], ls = 'dotted', color='b', lw=2,
label='$\sigma(t)$')
plt.plot([], lw=2, ls = '--', alpha=0.5, color='r',
label='$\sigma_{\theta}(t)$')

plt.xlim(0)
plt.xlabel('$t$')
plt.ylabel('Producción de entropía')
plt.legend(frameon = False)
ax = plt.gca()
```

```
axins = ax.inset_axes([0.55, 0.1, 0.4, 0.4])
axins.plot(ts, entropia_c.mean(axis=0), ls = 'dotted', color='b',
lw=3.5, label='$\sigma(t)$')
axins.plot(ts, salida_c.mean(axis=0), lw=2, ls = '--', alpha=0.5,
label='$\sigma_{\theta}(t)$', color='r')
plt.xlim(0)
plt.show()

plt.figure(figsize=(10,9), dpi=100)
for i in range(9):
plt.subplot(3, 3, i+1)
indice = i
entropia_ = entropia[indice]
salida_ = salida[indice]
plt.plot(ts, np.cumsum(entropia_), label='$S(t)$', color='b')
plt.plot(ts, np.cumsum(salida_), label='$S_{\theta}(t)$', color='r')
if i >= 6:
plt.xlabel('$t$')
if i%3==0:
plt.ylabel('Producción de entropía')

plt.legend()
plt.tight_layout()
plt.show()
```

Referencias

- [1] H. Qian, S. Wang, y Y. Yi, *Entropy productions in dissipative systems*, Proceedings of the American Mathematical Society **147** (2019), no. 12, 5209–5226.
- [2] H. B. Callen, *Thermodynamics and an introduction to thermostatistics*, 2nd., John Wiley & Sons, Singapore, 1985.
- [3] T. M. Cover, *Elements of information theory*, 2nd., John Wiley & Sons, New Jersey, 2006.
- [4] P. Walters, *An introduction to ergodic theory*, Vol. 79, Springer-Verlag, New York, 2000.
- [5] G. Nicolis y I. Prigogine, *Self-organization in nonequilibrium systems: from dissipative structures to order through fluctuations*, John Wiley & Sons, New York, 1977.
- [6] E. N. Lorenz, *Deterministic nonperiodic flow*, Journal of Atmospheric Sciences **20** (1963), no. 2, 130–141.
- [7] D. Kondepudi y I. Prigogine, *Modern thermodynamics: From heat engines to dissipative structures*, 2nd ed., John Wiley & Sons, Chichester, UK, 2014.
- [8] K. Huang, *Statistical mechanics*, 2nd., John Wiley & Sons, New York, 1987.
- [9] P. Gaspard, *Time-reversed dynamical entropy and irreversibility in markovian random processes*, Journal of Statistical Physics **117** (2004), 599–615.
- [10] C. Godrèche y L. Jean-Marc, *Characterising the nonequilibrium stationary states of ornstein–uhlenbeck processes*, Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical **52** (2019), 035002.
- [11] C. Maes, R. Frank, y A. Van Moffaert, *On the definition of entropy production, via examples*, Journal of Mathematical Physics **41** (2000), 1528.

- [12] J.-R. Chazzotes, C. Giardina, y F. Refig, *Relative entropy and waiting times for continuous-time markov processes*, *Electronic Journal of Probability* **11** (2006), 1049–1068.
- [13] C. Maldonado y R. Salgado-García, *Estimating entropy rate from censored symbolic time series: A test for time-irreversibility*, *Chaos* **31** (2021), 013131.
- [14] P. Collet y J.-P. Eckmann, *Concepts and results in chaotic dynamics: a short course*, Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg, 2006.
- [15] L. Perko, *Differential equations and dynamical systems*, 3rd ed., Springer-Verlag, New York, 2001.
- [16] D. G. Zill, *Ecuaciones diferenciales con problemas de valores en la frontera*, 9a, Cengage Learning, Ciudad de México, 2018.
- [17] M. W. Hirsch, S. Smale, y R. L. Devaney, *Differential equations, dynamical systems, and linear algebra*, 3rd ed., Academic Press, Massachusetts, 2013.
- [18] S. Lynch, *Dynamical systems with applications using python*, Springer International Publishing, Cham, 2018.
- [19] A. Kleidon y R. D. Lorenz, *Non-equilibrium thermodynamics and the production of entropy*, Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg, 2005.
- [20] Y. A. Çengel, M. A. Boles, y M. Kanoğlu, *Termodinámica*, 9a., McGraw-Hill, Ciudad de México, 2019.
- [21] R. Clausius, *Ueber verschiedene für die anwendung bequeme formen der hauptgleichungen der mechanischen wärmetheorie*, *Annalen der Physik* **201** (1865), 353–400.
- [22] L. Boltzmann, *Über die beziehung zwischen dem zweiten hauptsatze des mechanischen wärmetheorie und der wahrscheinlichkeitsrechnung, respective den sätzen über das wärmegleichgewicht*, *Sitzungsberichte der kaiserlichen Akademie der Wissenschaften, mathematisch-naturwissenschaftliche Classe* **76** (1877), 373–435.
- [23] R. K. Pathria y P. D. Beale, *Statistical mechanics*, 3rd ed., Elsevier, Oxford, 2011.
- [24] A. Lesne, *Shannon entropy: a rigorous notion at the crossroads between probability, information theory, dynamical systems and statistical physics*, *Mathematical Structures in Computer Science* **24** (2014), no. 3, e240311.

- [25] L. C. Evans, *Partial differential equations*, 2nd., American Mathematical Society, Rhode Island, 2010.
- [26] D.-Q. Jiang, M. Qian, y M.-P. Qian, *Mathematical theory of nonequilibrium steady states: On the frontier of probability and dynamical systems*, Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg, 2004.
- [27] S. Russell y P. Norvig, *Artificial intelligence: a modern approach*, 3rd ed., Pearson Education, New Jersey, 2010.
- [28] D.-K. Kim, Y. Bae, S. Lee, y H. Jeong, *Learning entropy production via neural networks*, Physical Review Letters **125** (2020), 140604.
- [29] U. Seifert, *Entropy production along a stochastic trajectory and an integral fluctuation theorem*, Physical Review Letters **95** (2005), 040602.

