



Proyecto Teórico-Computacional 2023-1

**Implementación de Machine Learning en la
predicción de la dirección de la flecha del
tiempo termodinámica en movimiento
browniano**

Juan Esteban Sandoval Granados

Departamento de física, Universidad de los Andes
Bogotá D.C, Colombia

Profesor director: Gabriel Téllez Acosta PhD
Profesor revisor: Alejandro García Varela PhD

Resumen/ Abstract

Resumen

La flecha del tiempo termodinámica determina la dirección temporal que un proceso microscópico puede tomar, ya sea hacia adelante o en dirección reversa. Utilizando conceptos como la tasa de producción de entropía y adaptando la segunda ley de la termodinámica para que sea válida en contextos estocásticos, se determina que los procesos que violan la segunda ley de la termodinámica son aquellos con una flecha del tiempo en dirección reversa. Por otra parte, el Machine Learning ha probado ser una herramienta poderosa que le permite a los computadores reconocer patrones y aprender, a partir de entrenamiento guiado o no guiado, a hacer predicciones ceteras. En este proyecto, el potencial del Machine Learning se pone a prueba en el contexto de la física estadística para analizar la posibilidad de reproducir resultados teóricos únicamente con un modelo de Machine Learning.

Para predecir la dirección de la flecha del tiempo termodinámica en un sistema de partículas en movimiento browniano con un potencial cuadrático dependiente del tiempo sin usar la estimación teórica ya establecida, se implementa un modelo de Machine Learning basado en regresión logística. La estimación teórica de la flecha del tiempo fue exitosamente replicada por las predicciones del modelo con una precisión del 79.5%. De manera similar, el modelo fue capaz de relacionar el trabajo realizado por la partícula browniana con la dirección de la flecha del tiempo, concordando con la literatura existente en el campo de la reversibilidad en la escala microscópica. Esto abre las posibilidades de expandir el uso del Machine Learning en la física estadística para hallar nuevos patrones físicos y para observar patrones existentes en sistemas novedosos.

Abstract

The thermodynamic arrow of time determines the time direction that a microscopic process takes, which can happen in a forward or a reverse direction. Using concepts such as entropy production rate and adapting the second law of thermodynamics to hold true in a stochastic context, it has been determined that processes that violate the second law of thermodynamics are those with a reverse arrow of time. On the other hand, Machine Learning has proven to be a powerful tool that allows computers to recognize patterns and learn from guided or unguided training to make predictions. In this project, the potential of Machine Learning is tested in a statistical physics context to analyze the possibility of reproducing theoretical results with just a Machine Learning model.

To predict the direction of the thermodynamic arrow of time in a particle system in brownian motion with a time-dependent quadratic potential without using the theoretical estimation, a Machine Learning classification model based on logistic regression was implemented. The theoretical estimation of the arrow of time was successfully reproduced by the model's predictions with a 79.5 % accuracy. Similarly, the model was able to relate the work done by the brownian particle to the direction of the arrow of time, agreeing with the literature involving reversibility in the microscopic scale. This opens the possibility of expanding the use of Machine Learning in statistical physics to find new physical patterns and to observe previous patterns in novel systems.

Índice general

Resumen/Abstract	I
1 Introducción	1
2 Objetivos	3
2.1 Pregunta de investigación	3
2.2 Objetivo general	3
2.3 Objetivos específicos	3
3 Marco teórico	4
3.1 Formalización de la flecha del tiempo termodinámica	4
3.2 Segunda ley de la termodinámica estocástica	5
3.3 Teorema de fluctuaciones de Crooks	6
3.4 Estimación teórica de la dirección de la flecha del tiempo termodinámica . . .	8
3.5 Movimiento browniano en un potencial cuadrático dependiente del tiempo .	10
3.6 Regresión logística en Machine Learning	11
4 Metodología	12
4.1 Metodología de simulación	12
4.2 Implementación y entrenamiento del modelo de Machine Learning	13
5 Resultados	15
6 Conclusiones	20
Referencias	23

Índice de figuras

1.1	Gráfica de la trayectoria de una partícula hacia adelante junto con su trayectoria reversa asociada en el espacio de fase. Tomado de [1].	2
4.1	Pérdidas del modelo en función de las épocas utilizadas para entrenar y probar el modelo. La línea azul indica las pérdidas en la fase de entrenamiento y la línea amarilla las pérdidas en la fase de pruebas.	14
4.2	Precisión del modelo en función de las épocas utilizadas para entrenar y probar el modelo. La precisión final del modelo es de 79.5%. La línea azul indica las pérdidas en la fase de entrenamiento y la línea amarilla las pérdidas en la fase de pruebas.	14
5.1	Muestra de 100 trayectorias (en unidades adimensionales de posición $x(k\beta)^{1/2}$ y tiempo γt) hacia adelante junto con la trayectoria promedio y la solución analítica a la ecuación (3.24). Las trayectorias color rojo claro corresponden a la muestra de 100 trayectorias, la trayectoria roja corresponde a la trayectoria promedio de las 100 trayectorias y la trayectoria azul corresponde a la solución analítica a la ecuación (3.27). Todas las trayectorias se simularon utilizando $\Delta t = 0.01s$, $\beta = \gamma = k = 1$, $\tau = 10s$ y $\lambda = 0.5$	16
5.2	Muestra de 100 trayectorias (en unidades adimensionales de posición $x(k\beta)^{1/2}$ y tiempo γt) en dirección reversa junto con la trayectoria promedio. Las trayectorias de color azul claro corresponden a la muestra de 100 trayectorias y la trayectoria azul oscuro corresponde a la trayectoria promedio de las 100 trayectorias. Todas las trayectorias se simularon utilizando $\Delta t = 0.01s$, $\beta = \gamma = k = 1$, $\tau = 10s$ y $\lambda = 0.5$	16
5.3	Trayectorias promedio (en unidades adimensionales de posición $x(k\beta)^{1/2}$ y tiempo γt) obtenidas para las dos direcciones de la flecha del tiempo termodinámica (ver figuras 5.1 y 5.2) junto con el centro del potencial descrito en la ecuación (3.23).	17
5.4	Distribución de trabajo (en unidades adimensionales βW) de las trayectorias hacia adelante y en dirección reversa simuladas. El histograma rojo corresponde a las trayectorias hacia adelante, el histograma azul corresponde a las trayectorias en dirección reversa y las líneas marcan el trabajo promedio realizado por las trayectorias. El histograma morado corresponde a la superposición de los histogramas rojo y azul.	18
5.5	Estimación del modelo de la probabilidad de obtener una trayectoria hacia adelante ($P(f x)$) en función del trabajo realizado por cada trayectoria. Los puntos de color azul claro indican las predicciones hechas por el modelo, mientras que la curva azul oscura indica la estimación teórica en la ecuación (3.21). El modelo realizó las predicciones con una precisión del 79.5%.	19

1

Introducción

La flecha del tiempo termodinámica se entiende como la dirección temporal que puede tomar un proceso termodinámico. Así como un proceso cualquiera puede comenzar en un tiempo $t = 0$ y terminar en otro tiempo $t = \tau$, pueden existir otros procesos que comienzan en el tiempo $t = \tau$ y que terminan en el tiempo $t = 0$. A partir de esto, se puede definir la dirección hacia adelante de la flecha del tiempo termodinámica como la dirección tal que el tiempo inicial sea menor que el tiempo final, mientras que la dirección reversa de la misma se define como la dirección tal que el tiempo inicial sea mayor que el tiempo final. Una forma de distinguir visualmente la dirección de la flecha del tiempo es por medio del espacio de fase. Teniendo en cuenta que una trayectoria hacia adelante debe tener una velocidad particular, la trayectoria reversa asociada debe tener una velocidad opuesta a dicha velocidad para lograr recorrer el camino en dirección reversa, de modo que las coordenadas de momentum de la trayectoria reversa tienen que estar conjugadas con respecto a las de la trayectoria hacia adelante (ver figura 1.1) [1].

Para poder estimar la dirección de la flecha del tiempo termodinámica de manera teórica, se ha recurrido a la termodinámica estocástica. En esta, las variables de interés en la termodinámica clásica, como lo son el trabajo, la energía interna y el calor, se vuelven variables estocásticas que dependen de las fluctuaciones térmicas del sistema o del medio en el que este vive. A partir de esta aproximación, como se discutirá en la sección 3.2, se puede obtener la segunda ley de la termodinámica estocástica, la cual indica que el cambio de entropía de un proceso tiene que ser mayor que cero únicamente en promedio, mostrando la existencia de procesos particulares para los que este cambio es menor que cero [2].

Por otra parte, el teorema de fluctuaciones de Crooks, como se discutirá en la sección 3.3, plantea que la probabilidad de encontrar una trayectoria reversa depende tanto de la probabilidad de encontrar una trayectoria hacia adelante como de la tasa de producción de entropía. Particularmente, este último concepto cuantifica la cantidad disponible de entropía que tiene un sistema para evolucionar en el tiempo, en la cual se encuentra que las trayectorias en dirección reversa consumen entropía, mientras que el calor y las trayectorias hacia adelante producen entropía [3, 4]. A partir de este teorema, como se mostrará en la sección 3.4, se puede encontrar que la probabilidad de que una trayectoria sea hacia adelante está dada por

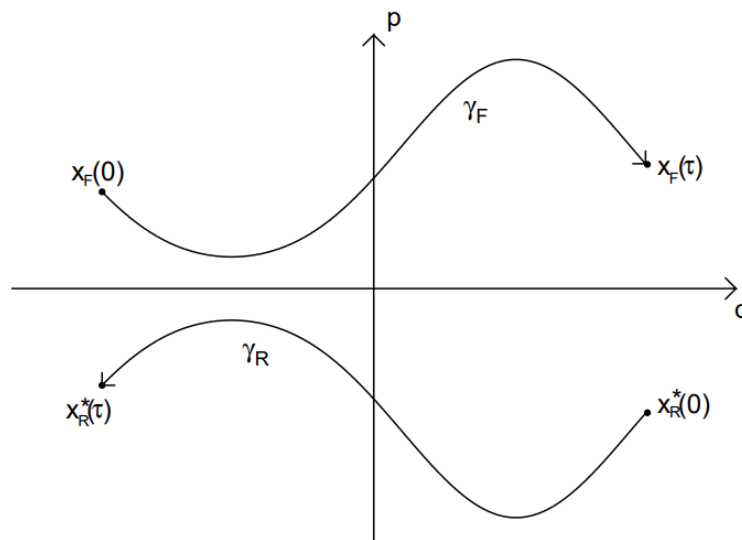


Figura 1.1: Gráfica de la trayectoria de una partícula hacia adelante junto con su trayectoria reversa asociada en el espacio de fase. Tomado de [1].

$$P(f|x) = \frac{1}{1 + e^{-\beta(W-\Delta F)'}}$$

la cual indica que la flecha del tiempo de un proceso que viola la segunda ley de la termodinámica clásica debe estar en dirección reversa, y viceversa [5].

En particular, uno de los sistemas candidatos para analizar la dirección de la flecha del tiempo termodinámica es un ensamble de partículas en movimiento browniano. Este es un tipo de movimiento usualmente encontrado en sistemas mesoscópicos (de una sola molécula) en el cual su ecuación de movimiento depende de un término estocástico usualmente tomado de una distribución normal con media cero. Debido a su naturaleza microscópica y estocástica, es teóricamente posible que una trayectoria cualquiera tenga una flecha del tiempo en dirección reversa, pero prácticamente imposible que esta se pueda distinguir únicamente viendo su trayectoria [6].

Uno de los campos que se están volviendo cada vez más relevantes en el mundo de la ciencia es el de la inteligencia artificial, más específicamente el Machine Learning. En este, se hace una aproximación matemática al aprendizaje, de modo que los computadores, a partir de modelos programados, sean capaces de aprender información y así responder preguntas que a los humanos nos costaría responder. Concretamente, los modelos de Machine Learning a día de hoy permiten clasificar series de datos según un parámetro de interés cuando se le entregan grandes cantidades de ejemplos para que después estos sean capaces de realizar predicciones de datos que nunca ha visto antes [7]. Con todo lo anterior en mente, se quiere atacar el problema de la clasificación de la flecha del tiempo de un proceso microscópico por medio del Machine Learning, a la vez que se analizan los parámetros tomados en cuenta por el modelo implementado para relacionarlos con la teoría ya establecida.

2

Objetivos

2.1. Pregunta de investigación

Teniendo en cuenta que en los sistemas microscópicos o mesoscópicos pueden existir procesos que violan la segunda ley de la termodinámica clásica, se quiere poder distinguir de una trayectoria hacia adelante de una reversa sin recurrir de herramientas matemáticas pero manteniendo la información física relevante. Asimismo, al considerar que el Machine Learning proporciona una gran herramienta para clasificar series de datos según un parámetro establecido, esta herramienta puede usarse para distinguir la dirección de la flecha del tiempo de cada proceso únicamente conociendo la trayectoria de la partícula a analizar. Al tomar un sistema de partículas en movimiento browniano dentro de un potencial cuadrático dependiente del tiempo, *¿es posible estimar la dirección de la flecha del tiempo termodinámica en este sistema a partir de un modelo de Machine Learning?*

2.2. Objetivo general

Estimar la dirección de la flecha del tiempo termodinámica de una partícula en movimiento browniano dentro de un potencial cuadrático dependiente del tiempo a través de un modelo de Machine Learning basado en regresión logística.

2.3. Objetivos específicos

- Generar múltiples trayectorias hacia adelante y reversas de una partícula en movimiento browniano en un potencial cuadrático dependiente del tiempo.
- Entrenar un modelo de Machine Learning basado en regresión logística con las trayectorias generadas.
- Predecir la dirección de la flecha del tiempo termodinámica de diferentes trayectorias a partir de las estimaciones hechas por el modelo entrenado.
- Comparar los resultados obtenidos con la estimación teórica para verificar los parámetros tenidos en cuenta por el modelo.

3

Marco teórico

3.1. Formalización de la flecha del tiempo termodinámica

Cualquier tipo de proceso físico que implique una reversibilidad en el tiempo puede ser modelado por medio de un parámetro $\lambda(t)$ dentro de la energía potencial asociada al mismo. Este parámetro se puede pensar como un modulador externo que permite que el proceso vaya en la dirección usual de la flecha del tiempo o en la dirección contraria, por lo cual se utilizan los parámetros $\lambda_f(t)$ y $\lambda_r(t)$ para indicar la dirección hacia adelante (f) y la dirección reversa (r) de la flecha del tiempo, respectivamente. Para un tiempo final τ , se puede definir el parámetro de la dirección reversa en términos de la dirección hacia adelante de la forma

$$\lambda_r(t) = \lambda_f(\tau - t), \quad (3.1)$$

lo cual indica que un proceso hacia adelante termina donde el proceso hacia atrás comienza, y viceversa. Con esto en mente, el hamiltoniano de un sistema arbitrario con una flecha de tiempo arbitraria está dado por

$$H[\vec{x}, \lambda(t)] = \sum_i \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} + U[\vec{x}, \lambda(t)], \quad (3.2)$$

en donde \vec{p}_i indica el momentum de una de las partículas y U su respectiva energía potencial, la cual depende del parámetro externo que indica la dirección de la flecha del tiempo [5].

Por otra parte, al introducir un parámetro externo que puede modular la flecha del tiempo de un proceso, hay que tener en cuenta cuánto trabajo se tuvo que realizar para seguir una dirección específica, ya que revertir un proceso puede llegar a ser más laborioso que dejarlo seguir naturalmente. Siguiendo la definición usual del diferencial de trabajo, se puede encontrar que el diferencial de trabajo realizado únicamente por el parámetro está dado por

$$dW = \vec{F} \cdot \vec{dr} = \frac{\partial H}{\partial \lambda} d\lambda. \quad (3.3)$$

A partir de este la ecuación (3.3), el trabajo realizado por el parámetro λ está dado por

$$W \equiv \int_0^\tau dW = \int_0^\tau \frac{\partial H}{\partial \lambda} \dot{\lambda} dt,$$

en donde se tiene en cuenta que el parámetro solo varía con respecto al tiempo. Al integrar, teniendo en cuenta que la derivada parcial de un hamiltoniano con respecto al tiempo es igual a su derivada total con respecto al tiempo, se llega a

$$W = H(\vec{x}_\tau, \lambda) - H(\vec{x}_0, \lambda), \quad (3.4)$$

en donde \vec{x}_τ y \vec{x}_0 indican las posiciones en el tiempo final τ y en el tiempo inicial, respectivamente. De este resultado, se concluye que el trabajo realizado por un parámetro únicamente implica la diferencia de los hamiltonianos en los puntos inicial y final, los cuales pueden variar dependiendo de la dirección de la flecha del tiempo. Así, se puede ver que la flecha del tiempo puede ser identificada al tener en cuenta el signo obtenido en la ecuación (3.4), aunque este argumento será tratado con más detalle posteriormente [6].

3.2. Segunda ley de la termodinámica estocástica

Debido a la naturaleza estocástica que tiene la naturaleza microscópica y mesoscópica, la segunda ley de la termodinámica tiene que ser adaptada de modo que tenga en cuenta la noción de procesos microscópicos, procesos mesoscópicos y la noción de comportamiento macroscópico, el cual incluye todas las partículas que componen un sistema. Esta misma naturaleza lleva a la idea de que la segunda ley de la termodinámica, la cual indica que un proceso solo puede suceder cuando su entropía asociada es mayor a 0, únicamente se cumple en promedio, mas no en cada uno de los procesos microscópicos que componen el sistema.

Para demostrar esto, se considera un estado inicial A de un ensamble de partículas en equilibrio térmico, y un estado final B de ese mismo ensamble también en equilibrio. Las probabilidades de hallar cada uno de estos estados está dada por

$$P_{A,B} = \frac{1}{Z_{A,B}} e^{-\beta H(\vec{x}_{0,\tau}, \lambda)}, \quad (3.5)$$

donde $H(\vec{x}_{0,\tau}, \lambda)$ son los mismos hamiltonianos descritos en la ecuación (3.2), β se define como $1/K_b T$ y $Z_{A,B}$ es la función de partición en los estados inicial y final, respectivamente, dada por

$$Z_{A,B} = \int e^{-\beta H(\vec{x}_{0,\tau}, \lambda)} d\vec{x}_{0,\tau}. \quad (3.6)$$

A partir de esto, el valor medio de la función $e^{-\beta W}$ en el estado inicial está dada por

$$\langle e^{-\beta W} \rangle = \int P_A e^{-\beta W} d\vec{x}_0 = \frac{1}{Z_A} \int e^{-\beta H(\vec{x}_0, \lambda)} e^{-\beta W} d\vec{x}_0, \quad (3.7)$$

en donde $d\vec{x}_0$ indica que se integra sobre todas las posiciones iniciales de todas las partículas. En este punto, se supone que la función de partición es una constante al integrar sobre las coordenadas iniciales. Al despejar $H(\vec{x}_0, \lambda)$ de la ecuación (3.2), la expresión hallada se puede reemplazar en la ecuación (3.7) para encontrar que

$$\langle e^{-\beta W} \rangle = \frac{1}{Z_A} \int e^{-\beta H(\vec{x}_\tau, \lambda)} d\vec{x}_0.$$

Al hacer un cambio de variable de \vec{x}_0 a \vec{x}_τ , y teniendo en cuenta que este cambio es unitario gracias a que, por el teorema de Liouville, la densidad del espacio de fase no cambia [1], se tiene que

$$\langle e^{-\beta W} \rangle = \frac{1}{Z_A} \int e^{-\beta H(\vec{x}_\tau, \lambda)} d\vec{x}_\tau.$$

Viendo que la integral restante es la función de partición en el punto B dada por la ecuación (3.6), se llega finalmente a

$$\langle e^{-\beta W} \rangle = \frac{Z_B}{Z_A}. \quad (3.8)$$

La diferencia de energía libre de Helmholtz (ΔF) entre los estados A y B está dada por

$$\Delta F = -\frac{1}{\beta} \ln \left(\frac{Z_B}{Z_A} \right) = -\frac{1}{\beta} \ln \langle e^{-\beta W} \rangle,$$

en donde se usó la ecuación (3.8). Al reorganizar términos, se tiene que

$$e^{-\beta \Delta F} = \langle e^{-\beta W} \rangle,$$

la cual se conoce como la identidad de Jarzynski [1, 2]. Al usar la desigualdad de Jensen, la cual indica que el valor medio de una función es mayor o igual que la función evaluada en el valor medio del argumento, se llega finalmente a la segunda ley de la termodinámica estocástica, la cual está dada por

$$\langle W \rangle \geq \Delta F. \quad (3.9)$$

Este resultado implica que el trabajo que realiza sobre el sistema va a ser mayor que la energía de Helmholtz en promedio, implicando que el cambio de entropía va a ser mayor a cero únicamente en promedio. La existencia de procesos particulares para los cuales este cambio sea menor que cero recae en la presencia de procesos para los cuales la flecha del tiempo va en dirección reversa, lo cual es posible gracias a la naturaleza estocástica de los procesos microscópicos y mesoscópicos [1].

3.3. Teorema de fluctuaciones de Crooks

Uno de los teoremas que permiten relacionar procesos termodinámicos con procesos estocásticos está dado por el teorema de fluctuaciones de Crooks, también conocido como la relación de Crooks. Este teorema utiliza la noción de tasa de producción de entropía para relacionarla a la probabilidad de que diferentes procesos que se dan en dirección hacia adelante o reversa puedan suceder, los cuales no necesariamente tienen que pertenecer a un proceso en equilibrio [3]. Particularmente, el concepto de tasa de producción de entropía corresponde a una forma de cuantificar el estado de un sistema fuera del equilibrio, en el cual se incluyen posibles fuentes que permitan cambiar el estado de un sistema, como lo puede

ser el calor, la energía libre o el potencial químico [4]. En el campo de la física estadística, la producción de entropía debida a un estado particular del sistema es similar a la entropía de Shannon, utilizada frecuentemente en teoría de la información. Con esto en mente, la producción de entropía de un estado x está dada por

$$\omega = \ln p(x),$$

donde $p(x)$ representa la probabilidad de que ese estado sea encontrado [4].

En este teorema, se asume que las acciones del sistema a analizar no deben depender del estado previamente anterior, lo cual es equivalente a decir que el sistema no tiene memoria, por lo que se puede describir con una cadena de Markov. Asimismo, todos los procesos tienen una probabilidad de ser reversibles, en donde dicha probabilidad depende del calor aplicado al sistema a analizar. Particularmente, se asume que si los pasos del tiempo están en equilibrio, el sistema puede volver a su estado de equilibrio cuando un parámetro externo lo perturba [3]. Con todo lo anterior en mente, al tener partículas realizando procesos hacia adelante, denotados por x_f , y partículas realizando procesos reversos (con su flecha del tiempo en dirección reversa) denotados por x_r , la producción de entropía de un proceso global hacia adelante ω_f está dada por

$$\omega_f = \ln p(x_r) - \ln p(x_f) - \beta Q, \quad (3.10)$$

donde p_f y p_r indican la distribución de probabilidad de obtener un proceso hacia adelante o reverso, respectivamente. La ecuación (3.10) muestra la tasa de producción de entropía que un sistema consume, lo cual indica que los procesos inversos en un sistema consumen entropía, mientras que los procesos hacia adelante y el calor ingresado al sistema funcionan como fuentes de entropía del sistema. A partir de la ecuación (3.10), se puede llegar a una versión más amigable de la tasa de producción de entropía dada por

$$e^{-\beta Q} = \frac{p(x_f)}{p(x_r)} e^{-\omega_f}. \quad (3.11)$$

Se considera la probabilidad de tener una trayectoria hacia adelante debido a un parámetro en dirección hacia adelante $p(x_f|\lambda_f)$, y la probabilidad de tener una trayectoria reversa debido a un parámetro en dirección reversa $p(x_r|\lambda_r)$. Debido a las suposiciones mencionadas anteriormente, una de las relaciones que se tiene que cumplir es la condición de reversibilidad microscópica dada por [3]

$$\frac{p(x_f|\lambda_f)}{p(x_r|\lambda_r)} = e^{-\beta Q}. \quad (3.12)$$

Al reemplazar lo encontrado en la ecuación (3.11) en la ecuación (3.12), se llega a

$$\frac{p(x_r)p(x_f|\lambda_f)}{p(x_f)p(x_r|\lambda_r)} = e^{\omega_f}, \quad (3.13)$$

lo cual indica que una trayectoria hacia adelante va a tener una producción de entropía que depende tanto de los procesos hacia adelante como de los procesos reversos. Con esto en

mente, la probabilidad de encontrar un proceso en dirección hacia adelante o hacia atrás en función de su producción de entropía se puede encontrar de la siguiente manera:

$$P_{f,r} = \langle \delta(\omega - \omega_{f,r}) \rangle. \quad (3.14)$$

Esta expresión indica que la probabilidad de obtener dichos procesos depende únicamente de las producciones de entropía que cumplan la condición encontrada en la ecuación (3.13), o su versión en donde todos los subíndices de esta ecuación son intercambiados dada por $P_r(\omega)$. Después de un proceso de integración de la ecuación (3.14) utilizando los resultados obtenidos en la ecuación (3.13) y siguiendo los cálculos hechos en [3], se llega al teorema de fluctuaciones dado por

$$\frac{P_f}{P_r} = e^\omega, \quad (3.15)$$

el cual indica que la producción de entropía de un sistema es la que dicta cuál es la dirección temporal más probable que puede tener un proceso. Finalmente, para un sistema termodinámico usual, su producción de entropía está dada por [2, 3]

$$\omega = \beta(W - \Delta F),$$

de modo que la probabilidad de encontrar un proceso en dirección hacia adelante está relacionada a la probabilidad de encontrar un proceso reverso según la siguiente ecuación:

$$\frac{P_f}{P_r} = e^{\beta(W - \Delta F)}. \quad (3.16)$$

3.4. Estimación teórica de la dirección de la flecha del tiempo termodinámica

Con las herramientas teóricas desarrolladas en las secciones anteriores, es posible estimar de manera teórica la dirección de la flecha del tiempo termodinámica a partir de primeros principios. De manera intuitiva, a priori se puede decir que un proceso en dirección hacia adelante es aquel que cumple $W > \Delta F$, ya que este proceso particular no viola la segunda ley de la termodinámica clásica. Asimismo, se puede decir que un proceso en dirección reversa debe ser tal que $W < \Delta W$ por el hecho de que sí viola la segunda ley de la termodinámica clásica.

Para esto, se utiliza una descripción bayesiana de la probabilidad de obtener cada proceso. Particularmente, la probabilidad de que una trayectoria dada tenga una dirección hacia adelante o reversa se define como $P(f|x)$ y $P(r|x)$, respectivamente. Utilizando el teorema de Bayes, cada una de estas probabilidades está dada por

$$P(f|x) = \frac{P(x|f)P(f)}{P(x)} = \frac{P_f P(f)}{P(x)}, \quad (3.17)$$

$$P(r|x) = \frac{P(x|r)P(r)}{P(x)} = \frac{P_r P(r)}{P(x)}, \quad (3.18)$$

en donde se pueden cambiar $P(x|f)$ y $P(x|r)$ como P_f y P_r , respectivamente, dado que la probabilidad de tener una trayectoria dada una orientación de la flecha del tiempo depende únicamente de la producción de entropía, lo cual fue descrito utilizando la ecuación (3.14) en la sección anterior.

Debido a que no se conoce la distribución que tiene la naturaleza de clasificar si un proceso tiene dirección hacia adelante o reversa, se asume que la probabilidad $P(f)$ y $P(r)$ de que un proceso tenga una dirección particular es $1/2$ para cada caso ¹. Teniendo en cuenta que la suma de las probabilidades condicionales $P(f|x)$ y $P(r|x)$ es igual a uno, al imponer esta condición a las ecuaciones (3.17) y (3.18), se llega a

$$\frac{P_f/P_r + 1}{2} = \frac{P(x)}{P_r}. \quad (3.19)$$

Utilizando el resultado obtenido en la ecuación (3.16) en la ecuación (3.19), se llega a que

$$P(x) = P_r \left(\frac{1 + e^{\beta(W-\Delta F)}}{2} \right), \quad (3.20)$$

la cual, al ser reemplazada en la ecuación (3.17), muestra que la probabilidad de que la dirección de la flecha del tiempo termodinámica sea hacia adelante dada una trayectoria cualquiera está dada por [1]

$$P(f|x) = \frac{1}{1 + e^{-\beta(W-\Delta F)}}. \quad (3.21)$$

Este resultado indica que la dirección de la flecha del tiempo puede ser estimada únicamente sabiendo la diferencia entre el trabajo realizado por la partícula analizada y su cambio de energía libre. Teniendo en cuenta la ecuación (3.9), el concepto de flecha del tiempo termodinámica está completamente ligado a la segunda ley de la termodinámica estocástica, ya que esta asegura que pueden haber procesos que violan la segunda ley de la termodinámica clásica, los cuales por la ecuación (3.21) tienen una flecha del tiempo en dirección reversa.

Para procesos en los que $W \gg \Delta F$, la probabilidad de que el proceso sea hacia adelante es prácticamente 1; mientras que en el caso en que $W \ll \Delta F$, la probabilidad de que el proceso sea reverso es prácticamente 1 también. Asimismo, si $W \approx \Delta F$, la probabilidad de que el proceso sea reverso es igual a la probabilidad de que el proceso sea hacia adelante, lo cual indica que en este régimen (el cual es equivalente al régimen en que $\Delta S \approx 0$) la flecha del tiempo es borrosa, por lo que no se puede distinguir su dirección con facilidad, o simplemente no se puede distinguir [5].

¹Le agradezco a Diego Rengifo por este comentario, el cual fue hecho en uno de los seminarios del grupo de física estadística.

3.5. Movimiento browniano en un potencial cuadrático dependiente del tiempo

El movimiento browniano es un tipo de movimiento el cual se rige por medio de una fuerza estocástica, por lo que no es completamente predecible en el tiempo. Este movimiento se suele dar en sistemas microscópicos que son susceptibles al ruido térmico y que viven en medios con alta fricción, lo cual lleva a que se pueda tener un equilibrio térmico entre el medio y la partícula browniana (partícula en movimiento). Este se puede definir de distintas maneras, pero en esta propuesta se definirá por medio de la ecuación de Langevin, la cual es una formulación equivalente a la segunda ley de Newton con la diferencia de que se aplica un término de ruido estocástico que modela la fuerza estocástica característica del movimiento [6]. De forma general, la ecuación de Langevin en una dimensión para una única partícula está dada por

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -\frac{\partial U}{\partial x} - \gamma \frac{dx}{dt} + \zeta(t), \quad (3.22)$$

donde $\zeta(t)$ representa la fuerza estocástica mencionada previamente. El potencial a tratar en este proyecto está dado por

$$U[x, \lambda(t)] = \frac{1}{2} k [x - \lambda(t)]^2, \quad (3.23)$$

en donde el parámetro $\lambda(t)$ es el mismo parámetro que modula la dirección de la flecha del tiempo termodinámica mencionado en la sección 3.1. Al reemplazar la ecuación (3.23) en la ecuación (3.22), y asumiendo que el sistema se encuentra en el límite sobreamortiguado, de modo que el término de inercia pueda ser ignorado, la ecuación (3.22) se convierte en

$$\frac{dx}{dt} = \frac{k}{\gamma} [x - \lambda(t)] - \frac{1}{\gamma} \zeta(t),$$

y al definir $-\zeta(t)/\gamma \equiv \xi(t)$, la ecuación de movimiento de la partícula browniana está dada por

$$\frac{dx}{dt} = \frac{k}{\gamma} [x - \lambda(t)] + \xi(t). \quad (3.24)$$

En movimiento browniano, el término $\xi(t)$ se suele tratar como ruido blanco, de modo que este término tiene las siguientes propiedades:

$$\langle \xi(t) \xi(t') \rangle = \frac{2}{\beta \gamma} \delta(t - t'), \quad (3.25)$$

$$\langle \xi(t) \rangle = 0. \quad (3.26)$$

La ecuación (3.26) indica que la influencia de la fuerza estocástica no es realmente relevante cuando se mira de manera macroscópica, mientras que la ecuación (3.25) indica que los valores de dicha influencia solo están relacionados de alguna manera cuando la fuerza es producida y en ningún otro punto del tiempo. Al tener en cuenta la ecuación (3.26), se puede

ver que al tomar el promedio sobre muchas partículas o iteraciones del sistema, la solución de la ecuación diferencial (3.24) se convierte en

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{k}{\gamma} [\langle x \rangle - \lambda(t)]. \quad (3.27)$$

Finalmente, y teniendo en cuenta la alta dependencia del trabajo realizado por cada trayectoria en la determinación de la dirección de la flecha del tiempo, este se encuentra dado por

$$W = - \int_0^\tau k \dot{\lambda} (x - \dot{\lambda} t) dt. \quad (3.28)$$

3.6. Regresión logística en Machine Learning

Un modelo de Machine Learning consiste de diferentes operaciones matemáticas aplicadas a un conjunto de parámetros que son capaces de tomar una serie de datos de cualquier naturaleza y hacer predicciones sobre ellos. Las predicciones hechas por un modelo dependen de los parámetros del mismo, y estos dependen fuertemente de los datos con los que se entrena el modelo. Al medir el error de la predicción del modelo, se pueden optimizar los parámetros para reducir dicho error por medio de diferentes funciones según el tipo de problema que se quiera resolver [7]. Con esto en mente, uno de los problemas que suele atacar el Machine Learning es la clasificación binaria de datos, la cual toma una serie de datos y regresa la probabilidad de que el dato tenga una u otra etiqueta.

Para implementar un modelo de Machine Learning que clasifique trayectorias que solamente pueden tener dos etiquetas, se usa un modelo de regresión logística. En este tipo de modelos, se hace una regresión lineal a los datos para luego reemplazar el resultado de la regresión lineal a una función sigmoide (equivalente a una función logística) y así pueda asignar la etiqueta correspondiente a cada trayectoria [7]. De forma matemática, una trayectoria numérica se puede representar por medio de un vector de posiciones \vec{X} que puede corresponder a una trayectoria hacia adelante o en dirección reversa. La regresión lineal a este vector implica la operación

$$z = W^T \vec{X} + b, \quad (3.29)$$

donde W es un vector de pesos, la cual corresponde a la pendiente ajustada en una regresión lineal usual; y b es el bias de la regresión (término tomado del inglés para indicar el sesgo estadístico de una muestra) correspondiente al intercepto de la regresión. A partir de esto, el modelo hará predicciones en base a la función sigmoide de la forma

$$S(z) = \frac{1}{1 + e^{-z}}, \quad (3.30)$$

la cual estimará la probabilidad de que dada una trayectoria, la etiqueta de dicha trayectoria sea 0 o 1 únicamente al evaluar z [5].

4

Metodología

4.1. Metodología de simulación

Para lograr simular las trayectorias de la partícula browniana para diferentes direcciones de la flecha del tiempo termodinámica, se soluciona la ecuación (3.24) por medio del lenguaje de programación Python junto con librerías de cálculo numérico como lo son `numpy` y `scipy`. Utilizando el algoritmo de Euler para solucionar ecuaciones diferenciales de manera numérica adaptado para funcionar con términos estocásticos, la posición x en el i -ésimo punto de tiempo para N puntos totales de tiempo está determinada por

$$x_{i+1} = x_i + \left[\frac{dx}{dt}(x_i, t_i) + \zeta(t) \right] \Delta t, \quad (4.1)$$

con las condiciones

$$(x_0, t_0) = (0, 0).$$

Aún así, la ecuación (4.1) únicamente es válida para trayectorias hacia adelante. Para lograr simular las trayectorias en dirección reversa x^R , se modifica la ecuación (4.1) para obtener

$$x_{i+1}^R = x_i^R + \left[\frac{dx}{dt}(x_i^R, t_i^R) + \zeta(t) \right] \Delta t, \quad (4.2)$$

en donde se tienen que tener en cuenta las siguientes reglas y condiciones:

$$\begin{aligned} x_i^R &= x_{N-1}, \\ t_i^R &= \tau - t_i, \\ (x_0^R, t_0^R) &= (x_f, \tau). \end{aligned}$$

Para obtener la trayectoria deseada, se necesita invertir la trayectoria dada por la sucesión de x^R recorriéndola al revés dentro de una lista o array. El tiempo τ corresponde al tiempo final de simulación y x_f es la posición final determinada por la solución analítica de la ecuación (3.27). El hecho de que las trayectorias hacia adelante y las trayectorias hacia atrás se simulen de manera diferente permite asignar una etiqueta a cada una de estas para poderla distinguir de los demás y así hacer un entrenamiento guiado por medio de Machine Learning.

Particularmente, se le asigna la etiqueta 1 a trayectorias hacia adelante y la etiqueta 0 a trayectorias en dirección reversa.

Para hallar el trabajo realizado por cada trayectoria, se integra la ecuación (3.3) de manera numérica por medio del método de Simpson, el cual se implementa por medio de la librería `scipy.integrate` usando la función `scipy.integrate.simps()`. Finalmente, por medio de la librería `pandas` se almacenan 12000 trayectorias con diferentes direcciones de la flecha del tiempo termodinámica (la dirección se determina de manera aleatoria) en un archivo `.csv` con su respectivo índice y trabajo realizado.

4.2. Implementación y entrenamiento del modelo de Machine Learning

Para implementar el modelo de regresión logística, se utiliza la librería `PyTorch`, la cual incluye todas las funciones necesarias para implementar cualquier tipo de modelo de Machine Learning y Deep Learning. El modelo implementado toma las 12000 aleatorias y toma el 80 % de estas para entrenarse y el 20 % para probar su eficacia al hacer estimaciones nuevas. El modelo se basa en una capa lineal, la cual aplica la ecuación (3.29); y en una función de paso, la cual aplica la ecuación (3.30) para realizar una predicción. Para medir la pérdida y la precisión de la predicción hecha con respecto a los datos de entrenamiento, se utiliza la función de pérdida de entropía cruzada (BCE, por sus siglas en inglés); mientras que para optimizar los parámetros internos del modelo, de modo que nuevas predicciones puedan ser más precisas, se utiliza la función de estimación de momento adaptativa (ADAM, por sus siglas en inglés). Se utiliza una tasa de aprendizaje (LR, por sus siglas en inglés) de 0.01 y se itera el modelo por 500 épocas.

Al realizar el ciclo de entrenamiento del modelo, se obtienen las gráficas de pérdida y de precisión mostradas en las figuras 4.1 y 4.2, respectivamente. De la figura 4.1, se puede ver las pérdidas del modelo tienden a cero, lo cual es un indicio de que el modelo cada vez tiene una precisión más alta. Esto último se comprueba con la figura 4.2, en el cual se observa que el modelo tiende a una precisión por encima del 80 %, pero se queda oscilando entre 75 % y 80 % después de 300 épocas. Por tanto, con el modelo ya entrenado, y con una precisión relativamente alta, se pueden hacer predicciones desde cero sin ningún inconveniente.

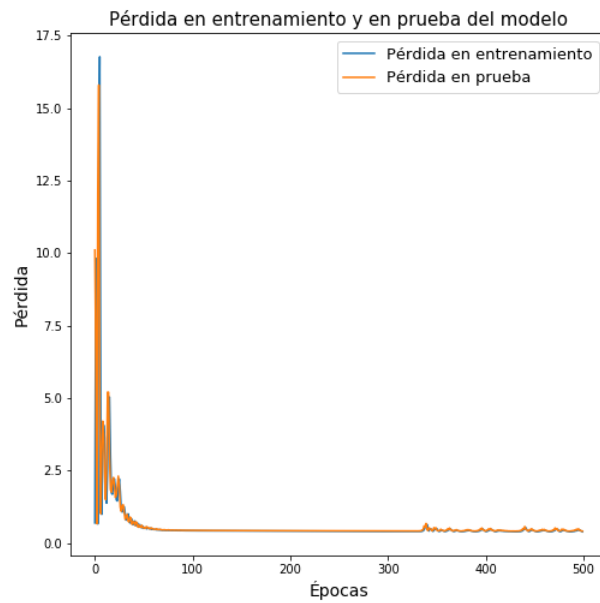


Figura 4.1: Pérdidas del modelo en función de las épocas utilizadas para entrenar y probar el modelo. La línea azul indica las pérdidas en la fase de entrenamiento y la línea amarilla las pérdidas en la fase de pruebas.

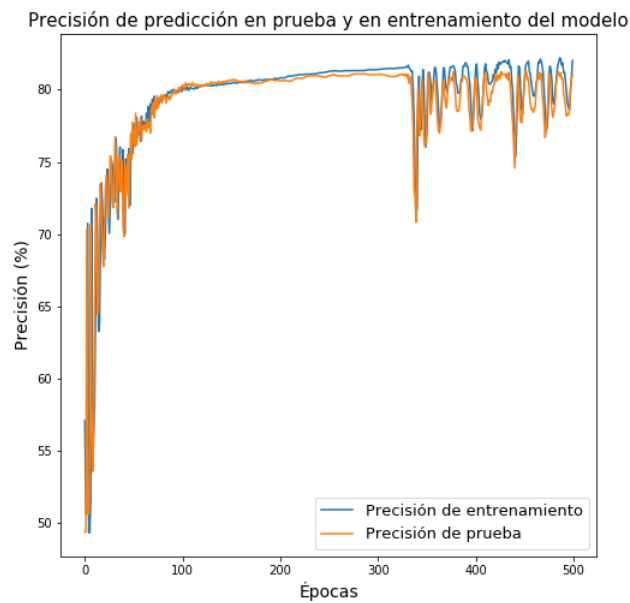


Figura 4.2: Precisión del modelo en función de las épocas utilizadas para entrenar y probar el modelo. La precisión final del modelo es de 79.5%. La línea azul indica las pérdidas en la fase de entrenamiento y la línea amarilla las pérdidas en la fase de pruebas.

5

Resultados

Usando la metodología descrita en la sección 4.1, una muestra de 100 trayectorias hacia adelante junto con su respectiva trayectoria promedio se muestra en la figura 5.1, mientras que una muestra similar de trayectorias en dirección reversa se muestra en la figura 5.2. En este proyecto, todas las trayectorias se simularon usando los parámetros $\Delta t = 0.01$, $\beta = \gamma = k = 1$, $\tau = 10s$ y $\lambda = 0.5$. A partir de los comportamientos promedio se puede distinguir cada tipo de trayectoria, ya que la trayectoria hacia adelante comienza con una curva convexa y se estabiliza rápidamente hasta llegar a un régimen lineal; mientras que la trayectoria en dirección reversa comienza en un régimen lineal y termina de manera cóncava. Lo anterior indica que la dirección de la flecha del tiempo termodinámica puede determinarse al encontrar un punto en la trayectoria promedio en donde se encuentre un punto con derivada igual a cero. Aún así, esto solo es válido para la trayectoria promedio, por lo que el criterio anterior tiene que extrapolarse para cubrir una trayectoria particular. Una comparación más directa entre las trayectorias promedio hacia adelante y en dirección reversa se encuentra en la figura 5.3, en la cual se muestra que el punto de estabilidad (derivada de la posición igual a 0) es aquel que intercepta al punto en donde el potencial de la ecuación (3.23) se vuelve cero.

Otra de las cantidades físicas de interés para determinar la dirección de la flecha del tiempo termodinámica es el trabajo realizado por cada partícula, equivalente al trabajo realizado por la fuerza estocástica del medio. Por medio de integración numérica, la distribución de trabajo de las trayectorias hacia adelante y de las trayectorias en dirección reversa se encuentran en la figura 5.4. En esta, se puede ver que la distribución de trabajos depende mucho de la dirección de la flecha del tiempo, ya que la distribución de las trayectorias hacia adelante tiene un promedio positivo, mientras que la distribución de las trayectorias en dirección reversa tienen un promedio negativo.

En consecuencia a lo anterior, las distribuciones se encuentran orientadas de manera opuesta pero simétrica alrededor de $\beta W = 0$. Aún así, se puede ver que estas distribuciones se solapan en el intervalo $-3.75 < \beta W < 3.75$, mostrando que alrededor de estos trabajos es difícil identificar cuál es la dirección de la flecha del tiempo con certeza. Particularmente, es más difícil identificar esta dirección en $\beta W = 0$ debido en este punto las distribuciones se solapan perfectamente, mientras que en los demás puntos hay posibilidades de que se pueda determinar la dirección de la flecha del tiempo ya que las distribuciones no se solapan

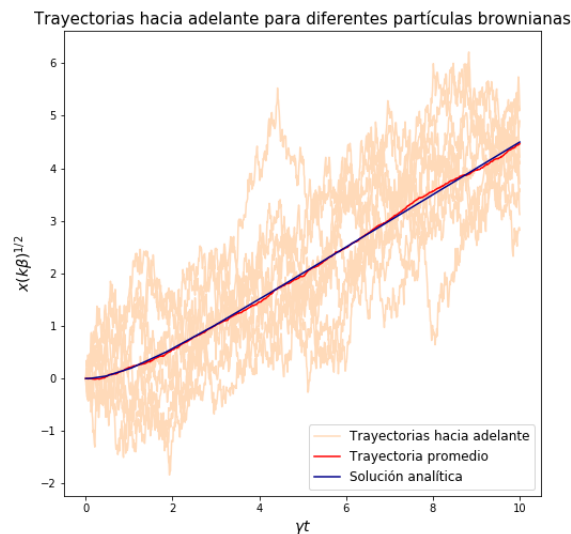


Figura 5.1: Muestra de 100 trayectorias (en unidades adimensionales de posición $x(k\beta)^{1/2}$ y tiempo γt) hacia adelante junto con la trayectoria promedio y la solución analítica a la ecuación (3.24). Las trayectorias color rojo claro corresponden a la muestra de 100 trayectorias, la trayectoria roja corresponde a la trayectoria promedio de las 100 trayectorias y la trayectoria azul corresponde a la solución analítica a la ecuación (3.27). Todas las trayectorias se simularon utilizando $\Delta t = 0.01s$, $\beta = \gamma = k = 1$, $\tau = 10s$ y $\lambda = 0.5$.

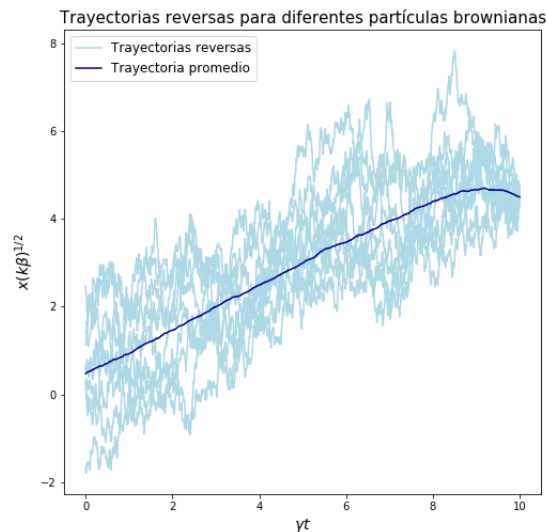


Figura 5.2: Muestra de 100 trayectorias (en unidades adimensionales de posición $x(k\beta)^{1/2}$ y tiempo γt) en dirección reversa junto con la trayectoria promedio. Las trayectorias de color azul claro corresponden a la muestra de 100 trayectorias y la trayectoria azul oscuro corresponde a la trayectoria promedio de las 100 trayectorias. Todas las trayectorias se simularon utilizando $\Delta t = 0.01s$, $\beta = \gamma = k = 1$, $\tau = 10s$ y $\lambda = 0.5$.

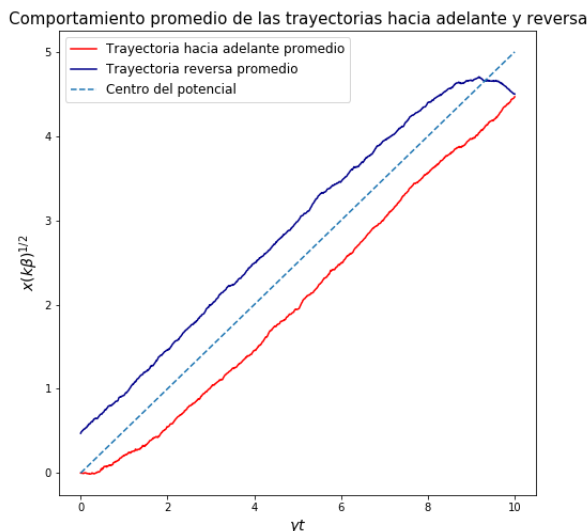


Figura 5.3: Trayectorias promedio (en unidades adimensionales de posición $x(k\beta)^{1/2}$ y tiempo γt) obtenidas para las dos direcciones de la flecha del tiempo termodinámica (ver figuras 5.1 y 5.2) junto con el centro del potencial descrito en la ecuación (3.23).

perfectamente.

Finalmente, por medio del modelo de Machine Learning entrenado con 12000 trayectorias con dirección de la flecha del tiempo aleatoria (ver sección 4.2), se estimó la dirección de la flecha del tiempo para 1000 nuevas trayectorias con dirección aleatoria, lo cual se muestra en la curva de validación mostrada en la figura 5.5 ¹, en la cual se obtuvo una precisión de 79.5 %. Teniendo en cuenta que la ecuación (3.21) contiene el término de energía libre ΔF , el modelo pudo concluir que el cambio de energía libre es cero para el sistema estudiado, por lo cual el trabajo juega el papel más importante para determinar la dirección de la flecha del tiempo. Cabe aclarar que no se reportan coeficientes de correlación o incertidumbres de medición ya que la curva de validación no corresponde a un ajuste de curva, de modo que lo anterior no es necesario.

A partir de estas estimaciones, se puede ver que el modelo hace predicciones muy similares a las que se esperan desde la estimación teórica, ya que las predicciones de trayectorias con trabajos altos son muy propensas a ser clasificadas como trayectorias hacia adelante, mientras que las predicciones de trayectorias con trabajos muy negativos tienen una alta probabilidad de ser clasificadas como trayectorias hacia atrás. Asimismo, se concuerda con la teoría al ver que al modelo le cuesta estimar la dirección de la flecha del tiempo cuando el trabajo es muy cercano a 0, ya que teóricamente no hay una diferencia apreciable entre la dirección hacia adelante y la dirección reversa que permita distinguirlas. Según Jarzynski [1], en este régimen la flecha del tiempo se encuentra borrosa por la razón mencionada anteriormente, lo cual

¹Le agradezco al profesor Julián Rincón por mostrarme que esta curva se suele conocer como curva de validación del modelo.

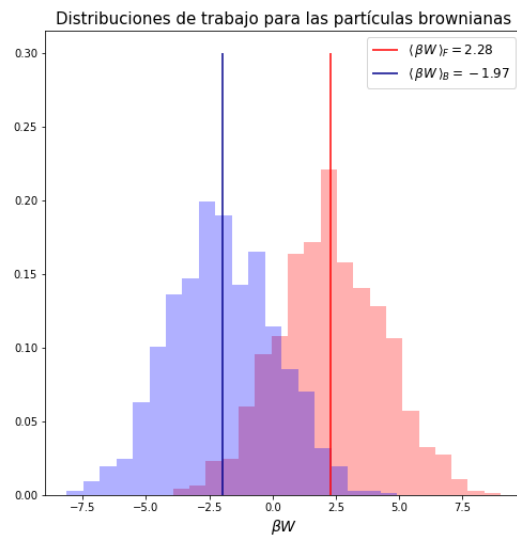


Figura 5.4: Distribución de trabajo (en unidades adimensionales βW) de las trayectorias hacia adelante y en dirección reversa simuladas. El histograma rojo corresponde a las trayectorias hacia adelante, el histograma azul corresponde a las trayectorias en dirección reversa y las líneas marcan el trabajo promedio realizado por las trayectorias. El histograma morado corresponde a la superposición de los histogramas rojo y azul.

justifica el hecho de que la estimación hecha por el modelo no esté tan definida en dicho régimen.

Aún así, puede verse que las estimaciones no siguen exactamente la estimación teórica. Esto se debe principalmente a que la precisión del modelo no es perfecta, lo cual se suele atribuir a una cantidad baja de trayectorias de entrenamiento o a funciones de error y de optimización mal elegidas. Sin embargo, las funciones utilizadas en el modelo son las funciones estándar que se utilizan en modelos de clasificación, por lo que se debieron usar más trayectorias para obtener una precisión aún más alta de la que se obtuvo. Al comparar con los resultados de Seif et al. con los mismos parámetros utilizados, la precisión del modelo entrenado con respecto al modelo presentado en [5] difiere en un 4.5 %, lo cual muestra en sus resultados unas estimaciones menos dispersas y mejor ajustadas a la estimación teórica. Por tanto, se puede ver una pequeña mejora en la precisión del modelo puede mejorar muy drásticamente la similitud de las predicciones hechas con la estimación teórica.

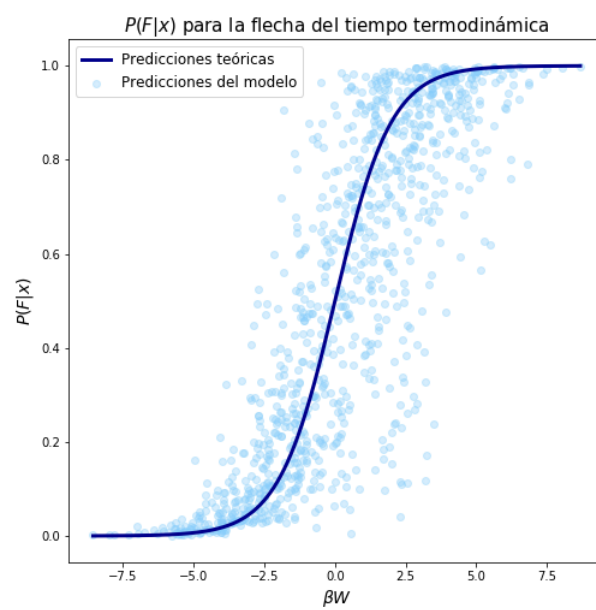


Figura 5.5: Estimación del modelo de la probabilidad de obtener una trayectoria hacia adelante ($P(f|x)$) en función del trabajo realizado por cada trayectoria. Los puntos de color azul claro indican las predicciones hechas por el modelo, mientras que la curva azul oscura indica la estimación teórica en la ecuación (3.21). El modelo realizó las predicciones con una precisión del 79.5%.

6

Conclusiones

El modelo de Machine Learning basado en regresión logística implementado fue capaz de reproducir los resultados esperados según la teoría de manera precisa. Esto tiene gran relevancia, teniendo en cuenta que el modelo no tiene acceso a ninguna cantidad física de los procesos analizados o a teoría que le permita describir dicho fenómeno, por lo que se evidencia que el Machine Learning (o el Deep Learning, dependiendo de la aplicación) tiene un potencial muy grande de entender el mundo físico de manera diferente a la usual. En un futuro, la implementación de modelos con mejor entrenamiento o con una estructura nueva (red neuronal, modelo no supervisado, etc.) pueden ser cruciales para mejorar la precisión de las predicciones y para permitir clasificar nuevas variables, como lo pueden ser el tipo de ruido o el estado de equilibrio de un sistema arbitrario.

Por otra parte, el modelo fue capaz de relacionar el trabajo realizado por la partícula browniana con la probabilidad de que la dirección de la flecha del tiempo sea hacia adelante, aún cuando esta no tenía acceso a dicho trabajo. Esto implica que el modelo fue capaz de entender, de una manera u otra, que el trabajo realizado es el dato más importante para darle una dirección específica a la flecha del tiempo de un proceso. Aún así, las predicciones hechas por el modelo no fueron perfectas y tuvieron un comportamiento más disperso al esperado, por lo que se debe seguir trabajando en una mejor adaptación del modelo para así poder extrapolarlo a sistemas más complejos de relevancia actual.

No obstante, los modelos de inteligencia artificial solo son conjuntos de datos y operaciones matemáticas, por lo que estos deben ser entendidos únicamente como un tipo de caja negra y no como un intérprete de resultados real. Es por esto mismo que la interpretación física de los resultados debe ser hecha por un humano, el cual entiende las implicaciones de los resultados y traduce las predicciones del modelo a física real, por lo cual la interpretación humana es la parte más importante de esta propuesta.

Consideraciones éticas

En la presente propuesta, toda la información que corresponda a otros autores será debidamente citada y se podrá encontrar en el apartado de referencias al final del documento. Asimismo, el código utilizado para generar todos los resultados y los datos obtenidos se encontrarán en el siguiente repositorio de GitHub: https://github.com/JeSandovalG/ProyectoTeorico2023_1. En consecuencia, también se asegura que todos los datos obtenidos serán analizados e interpretados sin ninguna eliminación arbitraria, y en caso de que lo anterior suceda, será debidamente reportado junto con la prueba estadística correspondiente que soporte dicha eliminación.

Por la naturaleza de la presente propuesta, en la cual se debe entrenar un modelo de inteligencia artificial, se asegura que este únicamente será utilizada para cumplir los objetivos de la propuesta, por lo que los datos con los que esta será entrenada serán publicados en el repositorio de GitHub mencionado anteriormente para asegurar la transparencia de la misma. Adicionalmente, todo el código utilizado en esta propuesta que corresponda a otros autores será debidamente reconocido y agradecido en el apartado correspondiente, a la vez que será adjuntado su repositorio correspondiente en caso de que exista.

Por último, la presente propuesta está únicamente destinada a fines académicos dentro de la Universidad de los Andes, de modo que no se utilizarán los resultados obtenidos en esta para favorecer a terceros involucrados o ajenos a la universidad. También se asegura que ninguna de las personas involucradas en el proyecto tiene algún vínculo que comprometa lo anteriormente mencionado.

Agradecimientos

En primera instancia, quiero agradecer profundamente al profesor Gabriel Téllez por abrirme las puertas al grupo de física estadística, por guiarme sobre cómo se lleva a cabo una investigación teórica y por ayudarme a entender los conceptos necesarios que, por mi cuenta, serían muy difíciles de entender. Admiro mucho al profesor Gabriel como científico y como persona, realizar este proyecto con él solamente reafirma dicha admiración y me inspira a seguir el camino académico. Asimismo, quiero agradecer al profesor Alejandro García por la guía que nos ha dado en el curso de proyecto teórico y por sus grandes aportes en cuanto a experiencia y conocimiento.

Por otra parte, también me gustaría agradecer a John Mateus y a Diego Rengifo, miembros del grupo de física estadística, por sus comentarios sobre los avances presentados y por siempre darme retroalimentación en lo que está bien y en lo que se puede mejorar. Gracias a ambos, puedo entender que tener errores es parte de aprender, y a pesar de que las cosas pueden no salir como se planean, siempre se puede salir adelante y mejorar como científico. En particular, quiero agradecer a John por su guía en cuanto a los códigos requeridos para simular movimiento browniano en potenciales variables.

Por último, me gustaría agradecer a mi familia junto con todos mis amigos y todas mis amigas por ser un gran apoyo en mi vida, por motivarme a ser una mejor persona y por ayudarme a ver los problemas desde diferentes perspectivas, sea en la vida académica o en mi vida personal. Sin todos ustedes, no hubiera sido capaz de seguir el camino de la ciencia, por lo que les agradezco de todo corazón. En particular me gustaría agradecer a Iván, a Daniel, a Sebastián y a Viviana por su apoyo en este proyecto, por estar en mis seminarios, por corregirme y por darme ideas.

Referencias

1. Jarzynski, C. Equalities and inequalities: Irreversibility and the Second Law of thermodynamics at the nanoscale. *Time*, 145-172 (2012).
2. Téllez, G. *Mecánica Estadística* (Universidad de los Andes, 2021 (versión revisada), por publicar).
3. Crooks, G. E. Entropy production fluctuation theorem and the nonequilibrium work relation for free energy differences. *Physical Review E* **60**, 2721-2726 (1999).
4. Otsubo, S., Manikandan, S. K., Sagawa, T. y Krishnamurthy, S. Estimating time-dependent entropy production from non-equilibrium trajectories. *Communications Physics* **5** (2022).
5. Seif, A., Hafezi, M. y Jarzynski, C. Machine learning the thermodynamic arrow of Time. *Nature Physics* **17**, 105-113 (2020).
6. Sekimoto, K. *Stochastic Energetics* 1st ed. 2010. eng. ISBN: 9786613559944 (Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2010).
7. Chandramouli, S. *Machine Learning* 1st edition. eng. ISBN: 93-89588-13-8 (Pearson Education India, 2018).