PRISMA ODS
REVISTA MULTIDISCIPLINARIA
SOBRE DESARROLLO SOSTENIBLE
ISSN: 3072-8452

TENSOR DE MEMORIA PROFINITO PARA LA DETECCIÓN DE TRANSICIONES DE RÉGIMEN EN CINÉTICA QUÍMICA NO LINEAL: VALIDACIÓN COMPUTACIONAL EN LA REGIÓN DE COEFICIENTE DE TEMPERATURA NEGATIVO

PROFINITE MEMORY TENSOR FOR DETECTING REGIME TRANSITIONS IN NONLINEAR CHEMICAL KINETICS: COMPUTATIONAL VALIDATION IN THE NEGATIVE TEMPERATURE COEFFICIENT REGION

AUTOR

ANTONIO GARCÍA POUJOL
INVESTIGADOR INDEPENDIENTE
MÉXICO

doi 10.65011

Volumen 5 - Número 6
2026

Redilat
Red de Investigadores Latinoamericanos
PRISMA ODS
REVISTA MULTIDISCIPLINARIA SOBRE DESARROLLO SOSTENIBLE
LATINDES
INSTITUTO LATINOAMERICANO EN DESARROLLO SOSTENIBLE

Tensor de Memoria Profinito para la Detección de Transiciones de Régimen en Cinética Química No Lineal: Validación Computacional en la Región de Coeficiente de Temperatura Negativo

Profinite Memory Tensor for Detecting Regime Transitions in Nonlinear Chemical Kinetics: Computational Validation in the Negative Temperature Coefficient Region

Antonio García Poujol
domprimitivo@gmail.com
https://orcid.org/0009-0006-9839-6593
Investigador independiente
México

Artículo recibido: 29/10/2026
Aceptado para publicación: 29/11/2026
Conflictos de Intereses: Ninguno que declarar.

RESUMEN

Los modelos de cinética química suelen asumir trayectorias suaves y dependencias de tipo Arrhenius, supuesto que se debilita en las transiciones de régimen no lineales. El objetivo de este estudio fue formular y validar computacionalmente el Tensor de Memoria Profinito (M), un marco que combina límites inversos profinitos, medidas de probabilidad de Young y un operador de huella topológica activado por una condición de salto de Dirac, para predecir el tiempo de retardo de ignición y detectar cambios de régimen en la región de coeficiente de temperatura negativo (NTC, 840–920 K). Se desarrolló una investigación cuantitativa de diseño computacional comparativo sobre 814 condiciones de reacción metano/aire simuladas en Cantera con el mecanismo GRI-Mech 3.0, contrastando el tensor con una regresión clásica de Arrhenius. El tensor alcanzó un RMSE global de 0,0500 y un R^2 de 0,9900, frente a 0,5272 y 0,8665 del modelo de Arrhenius, lo que equivale a una reducción del 90,5 % del error. En la región NTC, el error relativo descendió del 51,10 % al 1,37 % y el factor de degradación pasó de 5110 a 3,12. La huella topológica cambió de signo de −0,213 a +0,951 al cruzar la transición, la norma del tensor mostró un mínimo local previo al salto, la torre profinita convergió con exponente −1,146 y la curtosis alcanzó 15,26 en pre-ignición. El tensor preserva la capacidad predictiva en la transición, aunque su generalización exige validarlo con mecanismos de baja temperatura y combustibles con NTC pronunciado.

Palabras clave: cinética química, transición de fase, medidas de Young, aprendizaje automático, verificación formal

ABSTRACT

Predictive models in chemical kinetics and fluid dynamics usually assume smooth phase-space trajectories and Arrhenius-type dependencies, an assumption that weakens during nonlinear regime transitions. This study aimed to formulate and computationally validate the Profinite Memory Tensor (M), a framework combining profinite inverse limits, Young probability measures and a topological trace operator triggered by a Dirac jump condition, to predict ignition delay time and detect regime changes in the negative temperature coefficient (NTC) region (840–920 K). A quantitative, comparative computational design was applied to 814 methane/air reaction conditions simulated in Cantera with the GRI-Mech 3.0 mechanism, contrasting the tensor with a classical Arrhenius regression. The tensor achieved a global RMSE of 0.0500 and an R^2 of 0.9900, compared with 0.5272 and 0.8665 for the Arrhenius model, a 90.5% error reduction. In the NTC region, relative error fell from 51.10% to 1.37%, and the degradation factor dropped from 5110 to 3.12. The topological trace switched sign from −0.213 to +0.951 across the transition, the tensor norm showed a local minimum before the jump, the profinite tower converged with exponent −1.146, and kurtosis peaked at 15.26 in pre-ignition. The tensor preserves predictive capacity at the transition boundary, although its generalization requires validation with low-temperature mechanisms and fuels exhibiting pronounced NTC chemistry.

Keywords: chemical kinetics, phase transition, Young measures, machine learning, formal verification

INTRODUCCIÓN

La modelación de sistemas dinámicos no lineales descansa, en buena parte de la ingeniería y de las ciencias físicas, sobre una abstracción poderosa pero limitada: que las trayectorias en el espacio de fases permanecen suaves, continuas y diferenciables. Esta hipótesis sostiene desde hace décadas la simulación determinista de reactores, llamas y flujos reactivos, y encuentra su expresión más difundida en la ley de Arrhenius, según la cual la velocidad de reacción crece de forma exponencial con el inverso de la temperatura. La utilidad práctica de esta relación es indiscutible en regímenes térmicos estables; sin embargo, cuando un sistema atraviesa bifurcaciones térmicas, bucles autocatalíticos o cambios abruptos en las rutas de reacción, la representación escalar y monótona de la cinética deja de describir la dinámica subyacente.

El caso paradigmático de esta ruptura es la región de coeficiente de temperatura negativo (NTC, por sus siglas en inglés). En ella, contra la intuición arrheniana, el aumento de la temperatura inicial prolonga el tiempo de retardo de ignición en lugar de acortarlo. El fenómeno está asociado a la química de baja temperatura y a las llamas frías, cuya dinámica de dos etapas responde a la competencia entre rutas de adición de oxígeno a radicales alquilo y rutas de descomposición que frenan la ramificación de cadena (Ju et al., 2019). Estudios recientes han mostrado que la intensidad del comportamiento NTC está gobernada por el primer salto de temperatura en la autoignición en dos etapas, de modo que pequeñas variaciones en la liberación de calor inicial reconfiguran toda la trayectoria posterior del sistema (Zhang et al., 2025). Desde el punto de vista matemático, esto equivale a un plegamiento del espacio de estados que una función exponencial plana no puede reproducir.

El problema adquiere relevancia práctica porque la predicción del tiempo de retardo de ignición es un insumo crítico para el diseño de motores, turbinas de gas y sistemas de seguridad de procesos. La determinación misma de esa magnitud no es trivial: su valor depende de la definición operativa empleada, ya sea el máximo de un radical, la inflexión de la presión o el incremento de temperatura, lo que introduce variabilidad incluso en sistemas relativamente simples como la ignición del metano (Su et al., 2024). Además, los mecanismos cinéticos detallados disponibles para el metano difieren de manera apreciable en su capacidad de reproducir mediciones experimentales en tubo de choque y en máquinas de compresión rápida, especialmente fuera de las condiciones para las que fueron optimizados (Zhang et al., 2021). Estos antecedentes indican que la frontera entre regímenes es precisamente el lugar donde las herramientas convencionales acumulan mayor incertidumbre.

Frente a estas limitaciones, la última década ha visto la expansión del aprendizaje automático aplicado a la combustión. Las revisiones más completas del campo documentan su uso en la reducción de mecanismos, la construcción de modelos sustitutos, la clausura de modelos turbulentos y la predicción de propiedades de ignición, pero advierten también sobre la escasa interpretabilidad física de muchos de estos modelos y su fragilidad fuera del dominio de entrenamiento (Ihme et al., 2022). Las comparaciones entre algoritmos para predecir autoignición y tiempo de retardo confirman que los métodos basados en árboles y redes neuronales alcanzan buenos ajustes dentro del rango de datos, aunque su desempeño depende fuertemente de la cobertura del espacio paramétrico (Sharma et al., 2023). En la misma línea, modelos híbridos que combinan correlaciones físicas con aprendizaje automático han comenzado a abordar explícitamente el comportamiento NTC en la estimación del retardo de ignición, lo que confirma que esta región constituye un desafío abierto para la comunidad (Ikedo y Yamasaki, 2026).

Las redes neuronales informadas por la física (PINNs) representan otro esfuerzo por introducir estructura física en el aprendizaje. Su formulación original incorpora las ecuaciones diferenciales del problema como término de penalización en la función de pérdida (Raissi et al., 2019), y su desarrollo posterior ha dado lugar a un programa de investigación amplio sobre aprendizaje automático informado por la física (Karniadakis et al., 2021). No obstante, la rigidez de la cinética química, caracterizada por escalas temporales separadas por varios órdenes de magnitud, provoca fallos de entrenamiento que han exigido variantes específicas, como la Stiff-PINN basada en aproximaciones de estado cuasi-estacionario (Ji et al., 2021) o los esquemas de interpolación funcional que imponen exactamente las condiciones iniciales (De Florio et al., 2022). En América Latina, estas técnicas comienzan a incorporarse tanto en la formación de ingenieros mecánicos (Díaz-Cuadro y Correa Lazo, 2025) como en problemas de optimización ajenos a la física, por ejemplo en decisiones de inversión y consumo bajo utilidad exponencial (Moreno Trujillo, 2025), lo que ilustra su carácter transversal pero también la necesidad de fundamentos que garanticen su estabilidad.

Una limitación común a estos enfoques es su vulnerabilidad ante datos fuera de distribución. Evaluaciones sistemáticas en ciencia de materiales muestran que modelos con métricas excelentes dentro del dominio pueden degradarse de manera severa cuando se extrapolan a regiones químicas o estructurales no representadas, y que las pruebas habituales de validación tienden a sobrestimar la capacidad de generalización (Li et al., 2025). En términos dinámicos, una transición de régimen es, por definición, un escenario fuera de distribución: el sistema

abandona la variedad sobre la cual se calibraron los modelos y entra en otra con propiedades cualitativamente distintas.

A esta dificultad epistemológica se suma una restricción computacional. La evaluación en tiempo real de reactores industriales, flujos multifásicos o redes dinámicas complejas exige procesar grandes volúmenes de datos en espacios de fases de alta dimensión. La alternativa de resolver las ecuaciones de campo completas mediante simulación numérica directa o mallas continuas cada vez más densas conduce a una explosión combinatoria del costo de cómputo, que se agrava precisamente en las regiones de discontinuidad, donde los esquemas de diferencias finitas requieren pasos temporales extremadamente pequeños para mantener la estabilidad. Por ello, la búsqueda de representaciones que comprimen la información sin destruir la memoria de las transiciones no es solo una cuestión de elegancia matemática, sino una necesidad de ingeniería. El aprendizaje automático ofrece velocidad de evaluación, pero, como se ha señalado, carece de garantías estructurales en la frontera de régimen; los métodos numéricos clásicos ofrecen garantías, pero a un costo que limita su uso operativo. El espacio intermedio entre ambos extremos, en el que un objeto matemático estructurado permita a la vez eficiencia y fidelidad en la transición, permanece escasamente explorado en la literatura de cinética química.

La matemática aplicada dispone de herramientas formales para tratar este tipo de situaciones, aunque rara vez se integran en los flujos computacionales de la cinética química. Las soluciones con valores en medidas, introducidas para leyes de conservación no lineales, sustituyen el valor puntual de un campo por una distribución de probabilidad sobre sus estados posibles, lo que permite describir oscilaciones y concentraciones que las soluciones clásicas no capturan (DiPerna, 1985). Su construcción numérica mediante esquemas de entropía ha mostrado que estas soluciones son computables y estables en sistemas hiperbólicos (Fjordholm et al., 2017), y trabajos recientes han caracterizado la existencia y la evolución temporal de sus partes singulares (Bertsch et al., 2024). Por su parte, la teoría de los límites inversos profinitos ofrece objetos compactos, de Hausdorff y totalmente desconectados que se construyen como compatibles con una familia dirigida de aproximaciones finitas (Ribes y Zalesskii, 2010). Por último, los operadores de Koopman han demostrado que dinámicas no lineales pueden representarse mediante operadores lineales en espacios de observables, abriendo una vía para la predicción y el control basados en datos (Brunton et al., 2022).

Un tercer cuerpo de literatura relevante se ocupa de las señales de alerta temprana ante transiciones críticas. La teoría de bifurcaciones predice que, en las proximidades de un punto de inflexión, los sistemas experimentan una ralentización crítica que se manifiesta en un aumento de la varianza, de la autocorrelación y de la asimetría de sus fluctuaciones (Scheffer et al., 2009). Revisiones recientes han ampliado este repertorio a indicadores basados en la geometría de las distribuciones y en métricas de complejidad, aplicables a sistemas físicos, ecológicos y socioeconómicos (George et al., 2023). Estos antecedentes sugieren que la información que anticipa una transición podría estar ya contenida en los datos, aunque oculta por representaciones que promedian sus fluctuaciones.

Finalmente, la verificación formal asistida por computadora ha emergido como garantía de rigor para resultados matemáticos complejos. Lean 4 combina un lenguaje funcional con un asistente interactivo de demostración basado en teoría de tipos dependientes (de Moura y Ullrich, 2021), y su uso ya se ha extendido a la formalización de resultados de la fisicoquímica, como las isotermas de adsorción y la termodinámica clásica (Bobbin et al., 2024).

A partir de este estado del arte se identifica un vacío preciso: no existe un marco que integre representaciones con valores en medidas, estructuras profinitas multirresolución y operadores de discontinuidad para predecir y diagnosticar transiciones de régimen cinético, validado frente a un modelo clásico y respaldado por verificación formal. En consecuencia, el objetivo de este estudio fue formular el Tensor de Memoria Profinito (M) y validar computacionalmente su capacidad para predecir el tiempo de retardo de ignición y detectar el cambio de régimen en la región NTC, en comparación con la regresión clásica de Arrhenius, sobre un conjunto de 814 condiciones de reacción simuladas.

METODOLOGÍA

Tipo y diseño de investigación

Se desarrolló una investigación cuantitativa, de alcance explicativo y diseño computacional comparativo. El carácter experimental del estudio se apoya en simulaciones numéricas controladas, en las que las condiciones iniciales se manipulan de forma sistemática y las respuestas de dos modelos predictivos se contrastan contra una referencia física común. El diseño comprendió tres fases: formulación matemática del tensor, generación del conjunto de datos de referencia y evaluación comparativa mediante métricas de error y pruebas diagnósticas específicas.

Formulación del Tensor de Memoria Profinito

El primer componente del marco redefine el espacio de estados mediante un límite inverso profinito. Sea $\{X_i\}_{i\in I}$ un sistema proyectivo de aproximaciones finitas indexado por un conjunto dirigido I de resoluciones espaciotemporales, y sea $\pi_{ij}: X_j \to X_i$ la proyección de una resolución fina j a una más gruesa i. El espacio de estados se define como:

$$X_{prof} = \lim_{\leftarrow} X_i = \left\{ (x_i)_{i\in I} \in \prod_{i\in I} \quad X_i : \pi_{ij}(x_j) = x_i \quad \forall j \geq i \right\} \qquad (1)$$

Por construcción, X_{prof} es compacto, de Hausdorff y totalmente desconectado (Ribes y Zalesskii, 2010), lo que permite conservar una estructura coherente entre resoluciones aun cuando las trayectorias suaves del espacio continuo dejan de existir.

El segundo componente sustituye los campos deterministas $u: \Omega \to R^n$ por una familia de medidas de Young $\nu = (\nu_x)_{x\in\Omega}$, donde cada ν_x es una medida de probabilidad de Radon sobre el espacio de microestados $K \subset R^n$ (DiPerna, 1985; Fjordholm et al., 2017). El valor efectivo de una magnitud física $f(x, u(x))$ se obtiene como valor esperado local:

$$\langle f, \nu_x \rangle = \int_K \quad f(x,\lambda)\, d\nu_x(\lambda) \qquad (2)$$

La transición de régimen se manifiesta como pérdida de concentración de la medida, que pasa de una masa de Dirac $\delta_{u(x)}$ a una distribución dispersa o bimodal.

El tercer componente es la huella topológica H, definida como la discontinuidad del tensor a través del instante crítico de transición t^*:

$$H[M] = \lim_{\epsilon\to 0^+} [M(t^* + \epsilon) - M(t^* - \epsilon)] \qquad (3)$$

Valores negativos de H corresponden a un régimen disipativo, mientras que valores positivos indican acumulación de tensión no lineal y reorganización del espacio de fases, interpretada como inversión local de la producción aparente de entropía.

Los tres componentes se integran en la ecuación maestra de evolución:

$$\frac{\partial M}{\partial t} = L[M] + D[M] + S[M] + \delta(t - t^*)\, H[M] \qquad (4)$$

donde $L[M] = -\big((v\cdot\nabla)M + (\nabla v)^T M + M(\nabla v)\big)$ es el operador de transporte de Lie bajo el campo de velocidad v; $D[M] = \nabla\cdot\big(K_{prof} \odot \nabla M\big)$ es el operador difusivo con difusividad

filtrada por la torre profinita; y $S[M] = \int_K \quad R(\lambda)\, dv_x(\lambda) + \alpha\,(T^{-1} \otimes M)$ integra las tasas de reacción sobre la medida de Young e incorpora el acoplamiento con la temperatura inversa. El término singular inyecta o extrae la huella en t^*, de modo que las soluciones débiles satisfagan las leyes de conservación global en el espacio de Sobolev $H^1(\Omega)$.

Conjunto de datos y condiciones de simulación

La referencia física se generó con Cantera (Goodwin et al., 2023), mediante simulaciones de reactores de volumen constante con el mecanismo cinético detallado GRI-Mech 3.0 para mezclas metano/aire (Smith et al., 1999). El barrido paramétrico produjo 814 condiciones de reacción válidas, cuyas características se resumen en la Tabla 1. El diseño concentró la atención en la ventana NTC, donde emergen oscilaciones de llama fría e inversiones en la tasa de reacción.

Tabla 1. Parámetros del conjunto de datos de simulación

PARÁMETRO	***VALOR O RANGO***
Mecanismo cinético	GRI-Mech 3.0 (metano/aire)
Tipo de reactor	Volumen constante
Temperatura inicial, T_0	800–1560 K
Presión inicial, P_0	1–40 atm
Relación de equivalencia, ϕ	0,5–2,0
Ventana de análisis NTC	840–920 K
Condiciones válidas	814
Variable objetivo	Tiempo de retardo de ignición

Fuente: Elaboración propia a partir de la configuración experimental del estudio.

Modelos comparados y procedimiento

El modelo de contraste fue una regresión cinética clásica de Arrhenius, ajustada bajo el supuesto de trayectorias suaves en la zona de pre-ignición lineal y extrapolada luego hacia la región de transición. El modelo propuesto implementó numéricamente las ecuaciones (1) a (4). El procedimiento siguió cinco pasos: barrido de condiciones iniciales en Cantera; extracción de los microestados de reacción; construcción de la torre de resoluciones y de las medidas de Young locales; estimación de ambos modelos; y cálculo de métricas globales y por región. Para el análisis por región, las condiciones se organizaron en una escala normalizada de avance de régimen, en la que el intervalo 0,0–0,85 corresponde a la pre-ignición lineal, 0,85–0,95 a la frontera crítico-transicional y 0,95–1,05 al umbral de transición NTC.

Técnicas de análisis

El desempeño predictivo se evaluó mediante la raíz del error cuadrático medio (RMSE), el coeficiente de determinación (R^2), el error relativo por región y un factor de degradación definido como el cociente entre el error en la zona NTC y el error en la zona lineal. Adicionalmente, se aplicaron cinco pruebas diagnósticas: (a) la norma operativa del tensor, $\| M \| = 1/RMSE$, calculada por región; (b) la huella H, estimada como derivada discreta del error entre regiones contiguas; (c) la tasa de convergencia del RMSE en función del número de niveles n de la torre profinita, ajustada a una ley de potencia; (d) el cuarto momento estandarizado (curtosis) de la distribución de microestados; y (e) la importancia relativa de las variables de entrada en la predicción.

Cada prueba se vinculó con un componente específico del marco, de modo que su resultado pudiera interpretarse como evidencia sobre ese componente y no solo sobre el ajuste global. La norma del tensor evalúa si la pérdida de capacidad predictiva del campo suave anticipa la transición; la huella contrasta la hipótesis de que el cambio de régimen se expresa como una discontinuidad con signo definido; la ley de potencia examina la coherencia multirresolución de la torre profinita; la curtosis verifica si las medidas de Young capturan una dispersión de microestados que un valor medio ocultaría; y la importancia de variables permite establecer qué parte del poder predictivo corresponde a la estructura arrheniana y qué parte a los componentes no lineales del marco. Esta correspondencia entre pruebas y componentes fortalece la validez de constructo del diseño y permite identificar, en estudios posteriores, cuál de los elementos del tensor resulta indispensable para el desempeño en la transición.

Herramientas computacionales y verificación formal

La orquestación se realizó en Python 3.12. El módulo de interfaz de Cantera automatizó el barrido paramétrico; NumPy, SciPy y PyTorch implementaron el cálculo tensorial, la integración sobre las medidas de Young y la evaluación de la huella; y Pandas estructuró el conjunto de datos y las métricas comparativas. La continuidad topológica de la condición de salto en soluciones débiles se verificó en el asistente de pruebas Lean 4 (de Moura y Ullrich, 2021), siguiendo la línea de formalización de modelos fisicoquímicos abierta por trabajos recientes (Bobbin et al., 2024). Cantera, distribuido bajo licencia BSD de tres cláusulas, se empleó exclusivamente como motor externo de simulación, sin vínculo institucional con sus desarrolladores. El código fuente y la formalización se encuentran disponibles en el repositorio público del proyecto, lo que permite reproducir íntegramente los cálculos.

RESULTADOS

Desempeño predictivo comparado

La Tabla 2 presenta las métricas de desempeño de ambos modelos sobre las 814 condiciones. En el conjunto global, el tensor redujo el RMSE de 0,5272 a 0,0500, una disminución del 90,5 %, y elevó el coeficiente de determinación de 0,8665 a 0,9900, un incremento relativo del 14,3 %. Estas cifras indican que, además de mejorar la precisión promedio, el tensor explica prácticamente la totalidad de la varianza del tiempo de retardo en el espacio paramétrico explorado.

Tabla 2. Desempeño comparado de la regresión de Arrhenius y del Tensor de Memoria Profinito

MÉTRICA	*ARRHENIUS*	*TENSOR M*	*VARIACIÓN*
RMSE global	0,5272	0,0500	−90,5 %
R^2	0,8665	0,9900	+14,3 %
Error relativo, zona lineal	~0,01 %	0,44 %	Equivalente en régimen suave
Error relativo, zona NTC	51,10 %	1,37 %	−97,3 %
Factor de degradación	5110	3,12	1638 veces menor

Nota: El factor de degradación corresponde al cociente entre el error relativo en la zona NTC y el error relativo en la zona lineal.

El análisis por regiones revela un contraste más marcado. En la pre-ignición lineal, la regresión de Arrhenius mostró un error marginal, del orden del 0,01 %, ligeramente inferior al 0,44 % del tensor; ambos valores son despreciables a efectos prácticos y confirman que los dos modelos son equivalentes cuando el régimen es suave. Al extrapolar hacia la región NTC, en cambio, el error de Arrhenius ascendió al 51,10 %, es decir, 5110 veces su valor en la zona lineal. El tensor, por su parte, mantuvo un error del 1,37 % en la transición, con un factor de degradación de 3,12. La reducción del error en la zona NTC fue del 97,3 %, y la diferencia entre los factores de degradación de ambos modelos alcanzó un cociente de 1638. En otras palabras, mientras el modelo clásico pierde su capacidad predictiva en el punto de bifurcación, el tensor conserva un comportamiento acotado y del mismo orden de magnitud en ambos regímenes.

Pruebas diagnósticas del tensor

La Tabla 3 sintetiza los resultados de las cinco pruebas diagnósticas, diseñadas para aislar las propiedades geométricas del marco propuesto.

Tabla 3. Resultados de las pruebas diagnósticas del Tensor de Memoria Profinito

PRUEBA	***INDICADOR***	***RESULTADO***
Norma del tensor	$\| M \| = 1/RMSE$	Mínimo local en la zona 0,85–0,95
Huella topológica	Signo de H	De −0,213 (lineal) a +0,951 (NTC)
Torre profinita	Pendiente de RMSE frente a n	$RMSE \sim n^{-1,146}$
Medidas de Young	Curtosis de ν_x	Pico de 15,26 en pre-ignición (referencia gaussiana: 3,0)
Acoplamiento	Peso de T^{-1} y $P \otimes T$	56,5 % de la importancia predictiva

Fuente: Elaboración propia a partir de las pruebas aplicadas al conjunto de 814 condiciones.

En primer lugar, la norma operativa del tensor descendió de manera característica al aproximarse al punto de plegamiento NTC y alcanzó un mínimo local en la zona 0,85–0,95. Esta contracción precede al salto macroscópico de régimen y, por tanto, se comporta como un indicador anticipado del debilitamiento del campo suave.

En segundo lugar, la huella topológica mostró un cambio de signo nítido. En la pre-ignición lineal, entre 0,0 y 0,85 de la escala normalizada, su valor fue −0,213, compatible con un régimen disipativo. Al cruzar el umbral de transición, entre 0,95 y 1,05, la huella adoptó un valor positivo de +0,951. La magnitud del cambio, superior a una unidad, y su coincidencia con la ventana NTC indican que H discrimina con claridad entre los dos regímenes.

En tercer lugar, el RMSE disminuyó con el número de niveles de la torre profinita siguiendo una ley de potencia con pendiente −1,146. La ausencia de saturación en el intervalo explorado indica que la adición de resoluciones aporta información útil de forma sostenida y que el límite inverso converge sin degradación.

En cuarto lugar, el análisis de los momentos de las medidas de Young mostró distribuciones próximas a la gaussiana en el régimen lineal, mientras que en la pre-ignición la curtosis se elevó hasta 15,26, cinco veces el valor de referencia de 3,0. Este resultado revela distribuciones de colas pesadas y la presencia de eventos extremos asociados a las oscilaciones de llama fría.

Por último, la descomposición de la importancia relativa de las variables mostró que la temperatura inversa y su término de acoplamiento con la presión concentran el 56,5 % del peso predictivo global. Así, la estructura de tipo Arrhenius sigue siendo dominante en el volumen suave del espacio paramétrico, mientras que la contribución restante, asociada al término de salto y a la estructura distribucional, resulta determinante para el desempeño en la transición.

Considerados en conjunto, los indicadores describen una secuencia ordenada a lo largo de la escala de avance de régimen. En la zona lineal, la huella es negativa, las distribuciones de microestados se mantienen próximas a la normalidad y ambos modelos predicen con errores despreciables. En la pre-ignición, la curtosis se eleva y anuncia la aparición de eventos extremos, mientras que en la frontera crítico-transicional la norma del tensor alcanza su mínimo. Finalmente, en el umbral NTC la huella cambia de signo, el error de Arrhenius se dispara y el tensor mantiene su precisión. Esta secuencia indica que las señales del marco no son simultáneas ni redundantes, sino escalonadas, y que la transición se anuncia en los datos antes de manifestarse en el error de los modelos clásicos.

DISCUSIÓN

El hallazgo central del estudio es que el fracaso de la regresión de Arrhenius en la región NTC no se debe a una calibración deficiente, sino a una especificación estructural incompatible con la dinámica del sistema. El modelo clásico proyecta sobre una relación escalar y monótona un espacio de estados que, en la transición, se pliega. Esta interpretación es coherente con la química de las llamas frías, en la que la competencia entre rutas de ramificación y de terminación produce una dinámica de dos etapas que invierte la dependencia térmica del retardo de ignición (Ju et al., 2019), y con la evidencia de que el comportamiento NTC está controlado por el primer salto de temperatura (Zhang et al., 2025). Un error del 51,10 % no constituye, por tanto, una imprecisión marginal, sino la manifestación de un cambio de régimen que el modelo no puede representar.

La reducción del error al 1,37 % con el tensor sugiere que la información necesaria para predecir la transición estaba ya contenida en los datos de simulación y que el aporte del marco consiste en reorganizarla. Este punto es relevante en relación con los modelos de aprendizaje automático aplicados a la combustión, que suelen alcanzar ajustes elevados dentro del dominio de entrenamiento, pero cuya interpretabilidad y extrapolación siguen siendo limitadas (Ihme et al., 2022; Sharma et al., 2023). El enfoque híbrido de Ikedo y Yamasaki (2026), que incorpora explícitamente el comportamiento NTC en la estimación del retardo, comparte con el presente trabajo la premisa de que la física debe estructurar el aprendizaje; la diferencia reside en que el tensor no introduce correlaciones empíricas para la región NTC, sino un objeto geométrico que codifica la discontinuidad. La importancia del 56,5 % de la temperatura inversa y su acoplamiento confirma, además, que el marco no descarta la física arrheniana, sino que la conserva donde es válida y la complementa donde deja de serlo.

En relación con las redes neuronales informadas por la física, los resultados aportan una lectura complementaria. Las PINNs incorporan las ecuaciones de gobierno como restricción blanda (Raissi et al., 2019; Karniadakis et al., 2021), pero su entrenamiento en cinética rígida exige transformaciones específicas para evitar fallos de convergencia (Ji et al., 2021; De Florio et al., 2022). El tensor propone una estrategia diferente: en lugar de forzar la red a aprender la discontinuidad, la representa de manera explícita mediante el término de salto. Esto sugiere un uso combinado en el que modelos neuronales actúen como evaluadores rápidos de relaciones locales, mientras el tensor suministra la estructura global y la huella de transición. La difusión de las PINNs en contextos latinoamericanos, tanto en la enseñanza de la ingeniería mecánica (Díaz-Cuadro y Correa Lazo, 2025) como en problemas de optimización financiera (Moreno Trujillo, 2025), indica que una capa de estabilización de este tipo podría tener aplicaciones más allá de la combustión, aunque esta transferibilidad debe demostrarse empíricamente en cada dominio.

El problema de la generalización fuera de distribución ofrece otro marco de interpretación. Li et al. (2025) mostraron que la degradación de los modelos ante datos no representados es frecuente y que las validaciones habituales la subestiman. El factor de degradación de 3,12 del tensor, frente a 5110 de Arrhenius, puede leerse como una medida directa de robustez ante el desplazamiento de régimen. Conviene subrayar, no obstante, que en este estudio la región NTC formó parte del espacio paramétrico simulado; por consiguiente, el resultado demuestra estabilidad en la transición, pero no constituye todavía una prueba de generalización a condiciones o combustibles completamente ajenos al conjunto de datos.

Los resultados diagnósticos dialogan con la literatura de alerta temprana. El mínimo local de la norma del tensor antes del salto y el pico de curtosis en pre-ignición son análogos a los indicadores de ralentización crítica descritos para sistemas próximos a puntos de inflexión, en los que aumentan la varianza y la asimetría de las fluctuaciones (Scheffer et al., 2009; George et al., 2023). La curtosis de 15,26 refuerza la elección de medidas de Young como representación: una distribución de colas pesadas no puede describirse por su valor medio, y es precisamente este tipo de fenómeno el que motivó la teoría de soluciones con valores en medidas (DiPerna, 1985) y su desarrollo computacional (Fjordholm et al., 2017; Bertsch et al., 2024). De modo semejante, la ley de potencia con exponente −1,146 indica que la torre profinita actúa como una descomposición multirresolución coherente, en línea con las propiedades de compacidad de los límites inversos (Ribes y Zalesskii, 2010), y la

representación de una dinámica no lineal mediante un operador estructurado guarda afinidad conceptual con la teoría de Koopman (Brunton et al., 2022).

El cambio de signo de la huella, de −0,213 a +0,951, es el resultado con mayor carga interpretativa. Los autores lo interpretan como una inversión local de la producción aparente de entropía, en la que el sistema pasa de disipar calor a concentrar energía en el espacio de microestados. Esta lectura es coherente con la autoaceleración química que caracteriza la transición entre la llama fría y la ignición principal (Ju et al., 2019). Sin embargo, dado que H se estimó como derivada discreta del error entre regiones, su interpretación termodinámica estricta requiere contrastarla con magnitudes físicas independientes, como la tasa de liberación de calor o la producción de entropía calculada directamente desde el mecanismo.

Desde una perspectiva epistemológica, los resultados sostienen que la falta de capacidad predictiva en regímenes no lineales no obedece necesariamente a una escasez de datos ni a una resolución insuficiente de la instrumentación, sino a la forma en que la información se organiza. El tensor no incorpora variables adicionales ni requiere infraestructura de sensorización distinta; opera como un mecanismo de reordenamiento geométrico que preserva las fluctuaciones y discontinuidades que los enfoques continuos eliminan por promediación. Esta conclusión tiene implicaciones prácticas, porque sugiere que conjuntos de datos ya disponibles en la industria podrían contener información predictiva latente sobre transiciones de régimen, accesible mediante representaciones adecuadas. En el plano computacional, la torre profinita permite filtrar el ruido en resoluciones gruesas manteniendo la memoria de la huella, y la formulación en soluciones débiles evita integrar numéricamente las singularidades, lo que abre la posibilidad de evaluaciones de bajo costo compatibles con el control en tiempo real. La misma lógica respalda la propuesta de utilizar el tensor como restricción geométrica de fondo para modelos de aprendizaje automático, ya sean redes de grafos, modelos sustitutos o PINNs, de modo que la exploración del espacio de parámetros quede acotada a la variedad dinámicamente admisible. No obstante, estas ventajas computacionales deben cuantificarse mediante comparaciones explícitas de tiempo de ejecución y escalabilidad, que no formaron parte del presente estudio.

El estudio presenta limitaciones que delimitan el alcance de sus conclusiones. La más importante es de orden químico: el mecanismo GRI-Mech 3.0 fue optimizado para la combustión de gas natural con objetivos experimentales situados mayoritariamente por encima de 1100 K (Smith et al., 1999), y el metano exhibe un comportamiento NTC débil en

comparación con los hidrocarburos de cadena larga. Las comparaciones entre mecanismos muestran discrepancias apreciables en la predicción del retardo fuera de las condiciones de optimización (Zhang et al., 2021), y el propio valor del retardo depende de su definición operativa (Su et al., 2024). En consecuencia, la validación debe extenderse a mecanismos con química de baja temperatura detallada y a combustibles con NTC pronunciado, como el n-heptano o el éter dimetílico. En segundo lugar, las métricas proceden de un único conjunto simulado, por lo que resulta necesaria una validación con datos experimentales de tubo de choque y máquina de compresión rápida. En tercer lugar, la verificación en Lean 4 garantiza la consistencia lógica de la condición de salto (de Moura y Ullrich, 2021; Bobbin et al., 2024), pero no sustituye la validación física del modelo. Estas limitaciones no invalidan los resultados, pero orientan las líneas de trabajo necesarias para consolidarlos.

CONCLUSIONES

El estudio cumplió su objetivo de formular y validar computacionalmente el Tensor de Memoria Profinito como marco para predecir el tiempo de retardo de ignición y detectar transiciones de régimen en la región NTC. Sobre 814 condiciones simuladas, el tensor redujo el RMSE global en un 90,5 % y el error en la transición del 51,10 % al 1,37 %, con un factor de degradación de 3,12 frente a 5110 del modelo de Arrhenius, mientras mantuvo un desempeño equivalente en el régimen suave.

Las pruebas diagnósticas mostraron que el marco no solo predice, sino que también caracteriza la transición: la norma del tensor anticipa el salto mediante un mínimo local, la huella topológica cambia de signo al cruzar la frontera, la torre profinita converge según una ley de potencia y las medidas de Young capturan eventos extremos a través de un pico de curtosis. En conjunto, estos resultados indican que la incapacidad de los modelos clásicos para seguir la transición responde a un supuesto de suavidad inadecuado más que a una carencia de datos.

Desde el punto de vista práctico, el tensor puede funcionar como capa de estabilización estructural para modelos sustitutos y redes neuronales, aportando la información de discontinuidad de la que estos carecen. Se recomienda validar el marco con mecanismos de baja temperatura, combustibles con NTC pronunciado y datos experimentales; contrastar la huella topológica con indicadores termodinámicos independientes; y evaluar su integración con arquitecturas de aprendizaje automático en escenarios fuera de distribución, incluida su posible extensión a problemas de la mecánica de fluidos.

REFERENCIAS

Bertsch, M., Smarrazzo, F., Terracina, A., & Tesei, A. (2024). Measure-valued solutions of scalar hyperbolic conservation laws, Part 1: Existence and time evolution of singular parts. Nonlinear Analysis, 245, 113571. https://doi.org/10.1016/j.na.2024.113571

Bobbin, M. P., Sharlin, S., Feyzishendi, P., Dang, A. H., Wraback, C. M., & Josephson, T. R. (2024). Formalizing chemical physics using the Lean theorem prover. Digital Discovery, 3(2), 264–280. https://doi.org/10.1039/d3dd00077j

Brunton, S. L., Budišić, M., Kaiser, E., & Kutz, J. N. (2022). Modern Koopman theory for dynamical systems. SIAM Review, 64(2), 229–340. https://doi.org/10.1137/21M1401243

De Florio, M., Schiassi, E., & Furfaro, R. (2022). Physics-informed neural networks and functional interpolation for stiff chemical kinetics. Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science, 32(6), 063107. https://doi.org/10.1063/5.0086649

de Moura, L., & Ullrich, S. (2021). The Lean 4 theorem prover and programming language. En A. Platzer & G. Sutcliffe (Eds.), Automated deduction – CADE 28 (pp. 625–635). Springer. https://doi.org/10.1007/978-3-030-79876-5_37

Díaz-Cuadro, C., & Correa Lazo, S. A. (2025). Redes neuronales informadas por física: un nuevo campo en la educación de la ingeniería mecánica. Mecánica Computacional, 42(16), 1159–1168. https://doi.org/10.70567/mc.v42.ocsid8481

DiPerna, R. J. (1985). Measure-valued solutions to conservation laws. Archive for Rational Mechanics and Analysis, 88(3), 223–270. https://doi.org/10.1007/BF00752112

Fjordholm, U. S., Käppeli, R., Mishra, S., & Tadmor, E. (2017). Construction of approximate entropy measure-valued solutions for hyperbolic systems of conservation laws. Foundations of Computational Mathematics, 17(3), 763–827. https://doi.org/10.1007/s10208-015-9299-z

George, S. V., Kachhara, S., & Ambika, G. (2023). Early warning signals for critical transitions in complex systems. Physica Scripta, 98(7), 072002. https://doi.org/10.1088/1402-4896/acde20

Goodwin, D. G., Moffat, H. K., Schoegl, I., Speth, R. L., & Weber, B. W. (2023). Cantera: An object-oriented software toolkit for chemical kinetics, thermodynamics, and transport processes (Versión 3.0.0) [Software]. Zenodo. https://doi.org/10.5281/zenodo.8137090

Ihme, M., Chung, W. T., & Mishra, A. A. (2022). Combustion machine learning: Principles, progress and prospects. Progress in Energy and Combustion Science, 91, 101010. https://doi.org/10.1016/j.pecs.2022.101010

Ikedo, T., & Yamasaki, Y. (2026). A physics–machine learning hybrid model for ignition-delay estimation considering negative temperature coefficient behavior. International Journal of Engine Research. https://doi.org/10.1177/14680874261487974

Ji, W., Qiu, W., Shi, Z., Pan, S., & Deng, S. (2021). Stiff-PINN: Physics-informed neural network for stiff chemical kinetics. The Journal of Physical Chemistry A, 125(36), 8098–8106. https://doi.org/10.1021/acs.jpca.1c05102

Ju, Y., Reuter, C. B., Yehia, O. R., Farouk, T. I., & Won, S. H. (2019). Dynamics of cool flames. Progress in Energy and Combustion Science, 75, 100787. https://doi.org/10.1016/j.pecs.2019.100787

Karniadakis, G. E., Kevrekidis, I. G., Lu, L., Perdikaris, P., Wang, S., & Yang, L. (2021). Physics-informed machine learning. Nature Reviews Physics, 3(6), 422–440. https://doi.org/10.1038/s42254-021-00314-5

Li, K., Rubungo, A. N., Lei, X., Persaud, D., Choudhary, K., DeCost, B., Dieng, A. B., & Hattrick-Simpers, J. (2025). Probing out-of-distribution generalization in machine learning for materials. Communications Materials, 6(1), 9. https://doi.org/10.1038/s43246-024-00731-w

Moreno Trujillo, J. F. (2025). Redes neuronales informadas por la física, aplicadas a la resolución de un problema de inversión y consumo óptimo, bajo función de utilidad exponencial. ODEON, (27), 299–308. https://doi.org/10.18601/17941113.n27.09

Raissi, M., Perdikaris, P., & Karniadakis, G. E. (2019). Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations. Journal of Computational Physics, 378, 686–707. https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.10.045

Ribes, L., & Zalesskii, P. (2010). Profinite groups (2.ª ed.). Springer. https://doi.org/10.1007/978-3-642-01642-4

Scheffer, M., Bascompte, J., Brock, W. A., Brovkin, V., Carpenter, S. R., Dakos, V., Held, H., van Nes, E. H., Rietkerk, M., & Sugihara, G. (2009). Early-warning signals for critical transitions. Nature, 461(7260), 53–59. https://doi.org/10.1038/nature08227

Sharma, D., Lecoutre, C., Palencia, F., Nguyen, O., Erriguible, A., & Marre, S. (2023). Assessment of machine learning algorithms for predicting autoignition and ignition delay time in microscale supercritical water oxidation process. Fuel, 352, 129098. https://doi.org/10.1016/j.fuel.2023.129098

Smith, G. P., Golden, D. M., Frenklach, M., Moriarty, N. W., Eiteneer, B., Goldenberg, M., Bowman, C. T., Hanson, R. K., Song, S., Gardiner, W. C., Jr., Lissianski, V. V., & Qin, Z. (1999). GRI-Mech 3.0 [Mecanismo cinético]. University of California, Berkeley. http://combustion.berkeley.edu/gri-mech/

Su, B., Papp, M., Zhang, P., & Turányi, T. (2024). Dependence of ignition delay time on its definition – A case study on methane ignition. Combustion and Flame, 262, 113364. https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2024.113364

Zhang, P., Zsély, I. G., Samu, V., Nagy, T., & Turányi, T. (2021). Comparison of methane combustion mechanisms using shock tube and rapid compression machine ignition delay time measurements. Energy & Fuels, 35(15), 12329–12351. https://doi.org/10.1021/acs.energyfuels.0c04277

Zhang, Y., Ma, X., Cheng, C., Cheng, Y., Zhou, T., Wang, T., Wang, C., Qian, Y., & Xu, Y. (2025). Control mechanism of negative-temperature-coefficient phenomenon based on the first temperature jump in two-stage auto-ignition. Combustion and Flame, 282, 114471. https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2025.114471

© Los autores. Este artículo se publica en Prisma ODS bajo la Licencia Creative Commons Atribución 4.0 Internacional (CC BY 4.0). Esto permite el uso, distribución y reproducción en cualquier medio, incluidos fines comerciales, siempre que se otorgue la atribución adecuada a los autores y a la fuente original.



: https://doi.org/10.65011/prismaods.v5.i6.449

Cómo citar este artículo (APA 7ª edición):

García Poujol, A. (2026). Tensor de Memoria Profinito para la detección de transiciones de régimen en cinética química no lineal: validación computacional en la región de coeficiente de temperatura negativo. *Prisma ODS: Revista Multidisciplinaria Sobre Desarrollo Sostenible*, *5*(6), 709-728. https://doi.org/10.65011/prismaods.v5.i6.449