



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL
ESTADO DE MORELOS

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS

INSTITUTO DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS BÁSICAS Y
APLICADAS

CENTRO DE INVESTIGACIÓN EN CIENCIAS

Entropía de transferencia y causalidad en fenómenos de transporte de calor

TESIS

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE
DOCTOR EN CIENCIAS

PRESENTA
Antonio Iván Rivera Islas

Director de Tesis
Dr. Federico Vazquez Hurtado

Co-director de Tesis
Dr. Aldo Figueroa Lara

Cuernavaca, Morelos

Noviembre, 2022

Antonio Iván Rivera Islas

Entropía de transferencia y causalidad en fenómenos de transporte de calor
Doctor en Ciencias, Física.

Esta tesis fue evaluada por el siguiente jurado:

- Dr. Markus Müller Bender (Presidente)
- Dr. Rolando Pérez Álvarez (Secretario)
- Dr. Mariano López de Haro (Vocal)
- Dra. Ruth Estephania Gonzalez Narváez (Vocal)
- Dr. Raúl Salgado García (Vocal)
- Dr. Mario Alberto Abarca Sotelo (Suplente)
- Dr. Federico Vazquez Hurtado (Suplente)

Esta tesis fue desarrollada en conjunto con el comité tutorial:

- Dr. Federico Vazquez Hurtado
- Dr. Raúl Salgado García
- Dr. Mariano López de Haro
- Dr. Aldo Figueroa Lara

Centro de Investigación en Ciencias, Instituto de Investigación en Ciencias Básicas y Aplicadas
Universidad Autónoma del Estado de Morelos

Tesis realizada gracias al apoyo económico de la beca número 713736 otorgada por el CONACYT.

Esta obra está licenciada bajo la Licencia Creative Commons Atribución-NoComercial-CompartirIgual 4.0 Internacional. Para ver una copia de esta licencia, visita <http://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/>.



AGRADECIMIENTOS

A M.L., A.[†], M.C., C.V. y A.I.
A todos aquellos que dijeron “buen trabajo”.
A todos aquellos que leen este manuscrito.

RESUMEN

La estructura de las ecuaciones de la física teórica clásica usualmente se describen con una estructura tal que todos sus términos, salvo ciertas constantes, están parametrizados respecto a un mismo tiempo. Sin embargo, esta estructura, es en ciertas ocasiones obtenida mediante aproximaciones lineales que se toman en el tiempo, por lo cual, aparecen términos dependientes de coeficientes temporales conocidos como *tiempos de retardo* o *lag*. Un ejemplo de esto son los modelos de transporte de calor donde los gradientes de temperatura producen flujos de calor.

Se presenta la interpretación de la relación *causal lineal* entre *variables* presentes en los modelos teóricos clásicos del transporte de calor. Partiendo de las ideas y herramientas de la teoría de la información, en concreto, de la *entropía de transferencia*, originalmente formulada por Schreiber [1], se desarrolla la metodología que permite caracterizar numéricamente las relaciones causales en cada modelo.

OBJETIVOS

- Establecer una descripción, al principio cualitativa, de la estructura causal entre variables en cada modelo de transporte de calor
- Mediante las herramientas de simulación numérica y empleando estadística, construir un sistema experimental para cada modelo del cual se puedan obtener series de tiempo para el posterior análisis
- Desarrollar una metodología basada en las herramientas de la teoría de la información para caracterizar las relaciones causales embebidas en los modelos
- Obtener una descripción cuantitativa de las relaciones causales en los modelos de transporte de calor

NOTAS RÁPIDAS PARA AL LECTOR

- En el texto se emplea indistintamente *causalidad*, *relación causal*, *relación de causalidad*, y *relación de causa y efecto*
- Por *variables causales* se debe entender que se habla de las variables que guardan una relación de causa y efecto. No necesariamente coinciden con las variables físicas
- En este trabajo se aborda el problema de la *caracterización* de la causalidad. El problema de la *detección* de la causalidad es otro distinto y no se aborda en ningún momento

Índice general

1. Introducción	1
2. Propuesta del concepto causalidad para los modelos de la física teórica	2
2.1. El elusivo concepto de la causalidad	2
2.2. Definiciones de causalidad	3
2.3. Esquema general para la caracterización de la causalidad	6
3. Descripción causal de los modelos físicos	7
3.1. Modelo de Fourier	7
3.2. Modelo de Maxwell-Cattaneo-Vernotte (MCV)	8
3.3. Modelo de Jeffreys-Guyer-Krumhansl (JGK)	9
3.4. Relaciones y variables causales de los modelos de conducción de calor	10
3.5. Ensamble de realizaciones y condiciones de frontera	11
3.6. Calibración del método de solución	12
3.7. Resumen	12
4. Metodología y Validación	17
4.1. Información y Entropía de Shannon	17
4.2. Causalidad y Entropía de Transferencia	18
4.3. Cálculo numérico y Entropía de Transferencia Simbólica	20
4.4. Validación metodológica: descripción experimental	21
4.5. Validación metodológica: evaluación experimental	23
4.6. Aplicación de la metodología a los modelos de transporte de calor	26
4.7. Gráficas de resultados de la validación metodológica	27
5. Resultados	33
5.1. Discusión	34
5.2. Gráficas	36
6. Conclusiones	45
6.1. Trabajo a futuro	45
Apéndice A. Modelos físicos: manipulación algebraica	46
Apéndice B. Equivalencia entre los modelos de Jeffreys y Guyer-Krumhansl (GK)	51
Apéndice C. Ejemplos de procesos correlacionados sin un posible acoplamiento	53
Apéndice D. Notación para los algoritmos de solución numérica	55
Apéndice E. Perfil estacionario de los modelos de conducción de calor	57
Apéndice F. Detalles de la implementación de la simulación numérica	59
Apéndice G. Diccionarios de símbolos	61
Bibliografía	64

Introducción

El estudio del problema de determinar las relaciones causales que ocurren en algún sistema en particular en las ciencias naturales y sociales es fascinante. Granger [2], inspirado en el trabajo de Wiener [3], fue uno de los primeros en estudiar el problema e introdujo el concepto de relación causal en el análisis de las series de tiempo. Granger, considerando el caso en que el efecto depende linealmente de las causas, desarrolló un *test* estadístico para detectar la posible causalidad entre series de tiempo en modelos econométricos, el cual se puede aplicar incluso en los casos donde las series de tiempo se ven influenciadas por ruido externo. Desde el trabajo de Granger, se han introducido distintas maneras de estudiar el problema de determinar la causalidad entre las que destacan las técnicas basadas en *teoría de la información* [4, 5, 6, 7, 8], las propiedades recurrentes del sistema [9] y la mejora de la predictibilidad [10], solo por mencionar algunas.

Es claro que contar con la técnica adecuada para probar las relaciones de causalidad embebidas dentro de un sistema tiene un gran potencial para diversas aplicaciones en un número considerable de disciplinas. En particular, existe un reciente interés en el estudio de la relación del principio de causalidad y el acoplamiento entre diferentes fuerzas termodinámicas para la termodinámica fuera del equilibrio debido a que podría conducir a realizar cambios en las respectivas ecuaciones constitutivas [11]. Esto último muestra la importancia en determinar las influencias causales a partir de las observaciones entre dos o más procesos dentro del sistema.

Entre las técnicas basadas en la teoría de la información para probar las relaciones de causalidad se encuentra la *entropía de transferencia*, la cual se define como la cantidad de información transferida entre procesos [1, 4, 12]. Esta técnica permite detectar la magnitud y dirección de dicha información. Esta última es de suma importancia en el análisis de las series de tiempo debido a que se relaciona con la interacción y acoplamiento entre procesos, lo cual permite el estudio de las interacciones complejas observadas en una variedad de sistemas de diversas disciplinas, como son la física [13, 14], neurociencias [15, 16] y ciencias financieras [17].

Dada la capacidad de la entropía de transferencia para determinar la magnitud y dirección del flujo de información entre dos series de tiempo, se propone en este trabajo *caracterizar* la relación causal entre dos procesos. Es decir, se propone la aplicación de la entropía de transferencia para estudiar las relaciones causales descritas *a priori* en un sistema. La idea es la siguiente: dado un fenómeno, se tienen distintos modelos que lo describen, y cada uno de estos modelos involucra una serie de variables acopladas que deben guardar alguna relación causal. Si las variables, sus relaciones causales y los modelos son dados, entonces al aplicar la entropía de transferencia se deben obtener resultados contrastantes entre sí, lo que permitirá caracterizar la causalidad en cada caso.

Para este trabajo, el fenómeno a tratar es la conducción de calor en un material rígido en una dimensión con difusividad térmica constante [18]. En particular, se elijen tres modelos que lo describen: *Fourier*, *Maxwell-Cattaneo-Vernotte* (MCV), y *Jeffreys-Guyer-Krumhansl* (JGK). Para este caso, los modelos de Guyer-Krumhansl y Jeffreys coinciden. Ver Apéndices A y B). Estos tres modelos son descritos por un par de ecuaciones en derivadas parciales respectivamente: una ecuación constitutiva y una de tipo transporte. Ambas ecuaciones están dadas en términos de la temperatura y el flujo de calor, por tanto, se debe describir en forma precisa los acoplamientos y relaciones de causalidad presentes en los modelos. Por tanto, el trabajo inicia con la descripción de las relaciones causales presentes en los modelos.

Propuesta del concepto causalidad para los modelos de la física teórica

El concepto de la causalidad no es trivial [19, 20] y a generado una serie de controversias y discusión ontológica que va más allá del alcance de este trabajo [21, 22, 23, 24]. Por tanto, se debe dejar claro que no existe una definición general que sea aplicable a toda disciplina. Sin embargo, esto motiva a precisar una definición en particular para el estudio, justo como ha ocurrido en otros estudios de otras disciplinas, como lo son el derecho [25], las ciencias sociales [26] y la medicina [27].

Así, este capítulo esta dedicado a formular un concepto de causalidad que perfectamente describa las relaciones presentes en los modelos de conducción de calor, para posteriormente, describir el esquema general para caracterizar la causalidad.

2.1 El elusivo concepto de la causalidad

Tomando las ideas propuestas por Granger [2] y la estructura lineal de los modelos de conducción de calor [18], se busca desarrollar un concepto de causalidad que se aplique al estudio.

Así, el primer paso es describir lo que es un *acoplamiento*. Para una relación de acoplamiento se tiene la siguiente definición:

Definición 1 (*Acoplamiento*). Sean dos variables, procesos o eventos **A** y **B**, se establece una *relación de acoplamiento* si se cumple la siguiente condición:

1. Existe un modelo descriptivo formal que involucre **A** y **B**.

Así, se dice que **A** está acoplado con **B**.

La definición 1 es bastante *relajada*. Solo hay que establecer un modelo descriptivo entre **A** y **B**, no importando si existe algún **C** que también tenga relación con **A** y/o **B**. Tampoco es necesario establecer algún tipo de desfase temporal entre las variables, bien pueden ser simultaneas (con una misma evolución temporal) o bien, una puede tener un *retraso* temporal respecto a la otra. El punto es especificar el modelo descriptivo que las involucra entre si. Un ejemplo es simplemente una ecuación diferencial donde ambas variables estén involucradas, o determinar **A** como una variable aleatoria caracterizada por una distribución de probabilidad dada en términos de **B**.

Como primera propuesta de notación, si se tiene que las variables **A** y **B** no presentan un acoplamiento, es decir, que no cuentan con un modelo descriptivo, entonces se escribe

$$\mathbf{A} \nleftrightarrow \mathbf{B}. \quad (2.1)$$

Dado que en este trabajo el objetivo es la caracterización más no la detección de la causalidad, si se llega a considerar el caso en que dos procesos **A** y **B** guarden una fuerte correlación (o anticorrelación) pero *a priori* no se tenga su acoplamiento, no se considerara como parte del objeto de estudio. Ejemplos un tanto *extremos* de estos casos se pueden encontrar en el Apéndice C.

A continuación se tiene la definición de causalidad

Definición 2 (*Causalidad*). Sean dos variables o eventos **A** y **B**, se establece una relación de causalidad si se cumplen las siguientes condiciones:

1. En el tiempo, **A** precede a **B**
2. Existe un modelo descriptivo que involucre **A** y **B**
3. No existen otros factores ajenos a **A** que intervengan para la producción de **B**

Así, se dice que **A** es la *causa* y **B** el *efecto*.

Esta definición se construye sobre la definición de acoplamiento, es pragmática y empírica; en la vida cotidiana, así como en el laboratorio, permite el entendimiento de muchas situaciones las cuales posteriormente se describen subconscientemente como una secuencia finita de eventos (formalizables) con una entrada y una salida, es decir, un algoritmo. Un ejemplo ilustrativo es *la expansión libre adiabática de un gas ideal*:

A El gas ideal se encuentra confinado por una constricción a un volumen V_A . Se retira la constricción

B Se expande el gas $V_B = V_B(t)$, con $\Delta Q = 0$ y $\Delta W = \Delta U$

C Alcanza el volumen final V_C

Este algoritmo es suficiente para comprender la situación y expresarla en términos de la relación de causalidad que se ha definido: la expansión adiabática de un gas cuenta con un modelo descriptivo; el evento **A** precede a **B** y no existe otro evento que intervenga, por tanto **A** es causa de **B**. Siguiendo esta lógica, se argumenta que **B** es causa del evento final **C**. Sin embargo, en este algoritmo es posible refinar el evento **B**, es decir que se pueden tener $\mathbf{B}_1, \mathbf{B}_2, \dots, \mathbf{B}_n$ para cada $t = t_1, t_2, \dots, t_n$, con $n < \infty$, tal que el algoritmo puede ser tan fino como se deseé.

Surge un inconveniente. Tener la capacidad de insertar o refinar más eventos en el algoritmo rompe con la relación de causalidad: si entre la causa **A** y el efecto **B** se inserta un evento **X**, ¿Realmente **A** sigue siendo causa de **B**? Es necesario superar esta deficiencia.

No todo está perdido. Aunque la definición 2 por si misma presenta deficiencias, aún representa un buen punto de partida. En este caso, lo mejor es definir un concepto práctico de relación de casualidad con el cual, apoyándose en los fundamentos adecuados, permita realizar los análisis pertinentes limitándose al campo de estudio.

Así, para definir el concepto de relación de causalidad que se requiere para el estudio es necesario voltrear a ver los modelos físicos.

2.2 Definiciones de causalidad

En física experimental frecuentemente es natural dar por hecho las relaciones de causalidad. No es complicado ver la razón: el diseño experimental está basado en una serie de hipótesis que *a priori* ya contemplan las posibles relaciones de causalidad que se presentan entre las variables del sistema. Así, dependiendo el éxito del experimento se aceptan, rechazan o reformulan las hipótesis y consigo, las relaciones de causalidad. Sin embargo, esto no ocurre así en la física teórica.

Un primer paso hacia la definición de causalidad en los modelos de la física teórica sería partir de la definición 2; si bien por ella misma presenta deficiencias, los conceptos de precedencia y la existencia del modelo descriptivo permiten establecer cierta directriz que sirva de guía para encontrar una definición aplicable.

En general, las ecuaciones dependientes del espacio y el tiempo suelen escribirse así

$$a(\vec{r}_1) \cdot \mathbf{X}(\vec{r}_2, t) = b(\vec{r}_3) \cdot \mathbf{Y}(\vec{r}_4, t), \quad (2.2)$$

donde \cdot representa el producto tensorial adecuado para la ecuación y las cantidades a y b se consideran constantes en el tiempo.

Sin embargo, en una buena parte de los campos de la física clásica, la mayoría de las leyes y ecuaciones que permiten describir un sistema tienen su dependencia espacial restringida a $\vec{r} = \vec{r}_1 = \vec{r}_2 = \vec{r}_3 = \vec{r}_4$, por tanto, se tiene

$$a(\vec{r}) \cdot \mathbf{X}(\vec{r}, t) = b(\vec{r}) \cdot \mathbf{Y}(\vec{r}, t). \quad (2.3)$$

Por otra parte, las variables \mathbf{X} y \mathbf{Y} en general pueden ser construidas como una combinación lineal de otras variables

$$\mathbf{X}(\vec{r}, t) = \sum x_i(\vec{r}, t), \quad \mathbf{Y}(\vec{r}, t) = \sum y_i(\vec{r}, t). \quad (2.4)$$

Dadas las ecuaciones (2.3) y (2.4), se empiezan a cumplir los puntos 2 y 3 de la definición 2: dada la estructura que en particular tenga (2.3) se describe como una variable produce a la otra mientras que por (2.4) deja en claro que las variables relevantes son \mathbf{X} y \mathbf{Y} al ser únicos, mientras que x_i y y_i son factores acoplados (1) que tienen cierta contribución en la construcción de \mathbf{X} y \mathbf{Y} , pero no tienen peso causal por sí solos.

Las variables \mathbf{X} y \mathbf{Y} se parametrizan respecto al mismo tiempo, es decir, que los cambios en ambas variables son simultáneos. Empleando la notación compacta $\mathbf{X}(\vec{r}, t) = \mathbf{X}_t$, se construye el conjunto

$$S_{\mathbf{X}, \mathbf{Y}} = \{ \{ \mathbf{X}_t, \mathbf{Y}_t \} \mid t \in [t_0, t_n] \}, \quad (2.5)$$

donde t_0 y t_n son el tiempo inicial y final donde el modelo descrito por la estructura (2.3) es válido, respectivamente. Cada pareja $\{ \mathbf{X}_t, \mathbf{Y}_t \}$ se dice que es un evento del sistema.

Los sistemas descritos con la estructura (2.3) pueden leerse en ambos sentidos: tanto \mathbf{X} produce \mathbf{Y} , así como \mathbf{Y} produce \mathbf{X} . Esto permite proponer una notación compacta que denote la simultaneidad de las variables

$$\mathbf{X}_t \leftrightarrow \mathbf{Y}_t. \quad (2.6)$$

La estructura (2.3) no presenta precedencia entre las variables, su simultaneidad lo imposibilita. Por tanto, la falta de precedencia entre variables las hace incompatibles con la definición 2. Así, las variables del sistema no presentan una relación de causalidad. Así, se presenta la definición de simultaneidad para variables.

Definición 3 (Simultaneidad). Dos variables \mathbf{A} y \mathbf{B} presentan una relación de simultaneidad si:

1. Las variables \mathbf{A} y \mathbf{B} se evalúan al mismo tiempo
2. Las variables \mathbf{A} y \mathbf{B} siguen la estructura (2.3)
3. Las variables \mathbf{A} y \mathbf{B} son únicas para el sistema y están construidas por (2.4)

Por otra parte, para eventos sí se puede definir una relación causal.

Definición 4 (Causalidad entre eventos). Para dos tiempos t_1 y t_2 , se define la causalidad entre eventos $\{ \mathbf{A}_t, \mathbf{B}_t \}$ si

1. Para $t_1 < t_2$ el evento $\{ \mathbf{A}_{t_1}, \mathbf{B}_{t_1} \}$ precede a $\{ \mathbf{A}_{t_2}, \mathbf{B}_{t_2} \}$
2. Existe un algoritmo para producir $\{ \mathbf{A}_{t_2}, \mathbf{B}_{t_2} \}$ a partir $\{ \mathbf{A}_{t_1}, \mathbf{B}_{t_1} \}$
3. No existen otros factores ajenos a \mathbf{A} y \mathbf{B} en el sistema y están construidas por (2.4)

Así, aunque las variables de estructura (2.3) solo presenten simultaneidad, sus eventos sí presentan una relación causal. Con lo cual, en general, siguiendo las definiciones 3 y 4 se tiene que para los modelos físicos la causalidad entre variables no es lo mismo a la causalidad entre eventos.

Para establecer relaciones causales entre variables en un modelo físico, se debe tener la siguiente estructura

$$a \cdot \mathbf{X}(\vec{r}, t + \Delta t_{\mathbf{X}}) = b \cdot \mathbf{Y}(\vec{r}, t + \Delta t_{\mathbf{Y}}), \quad (2.7)$$

tal que $\Delta t_{\mathbf{X}}$ y $\Delta t_{\mathbf{Y}}$ son los tiempos de retardo del sistema y cumplen $\Delta t_{\mathbf{X}} \neq \Delta t_{\mathbf{Y}}$.

Los tiempos de retardo son ordenables, por lo cual, con su inserción permite establecer la precedencia de los efectos de una variable respecto a la otra. Para entender a qué se refiere esta precedencia, se analiza lo siguiente. Suponiendo $\Delta t_X < \Delta t_Y$, se tiene la transformación

$$t = t^* - \Delta t_X, \quad (2.8)$$

así se reescribe 2.7 como

$$a \cdot \mathbf{X}(\vec{r}, t) = b \cdot \mathbf{Y}(\vec{r}, t + \Delta t), \quad (2.9)$$

donde se han retirado el asterisco y $\Delta t = \Delta t_Y - \Delta t_X$.

Se propone la aproximación en series de Taylor a primer orden de estas variables, esto es

$$\mathbf{Y}(\vec{r}, t + \Delta t) \approx \mathbf{Y} + \Delta t \frac{\partial \mathbf{Y}}{\partial t}. \quad (2.10)$$

Esta aproximación permite cambiar las estructuras (2.7) y (2.9) por una del tipo (2.3). Esto motiva la construcción de dos conjuntos: uno de simultaneidad para (2.7)

$$S_{\mathbf{X} + \Delta t_X \partial_t \mathbf{X}, \mathbf{Y} + \Delta t_Y \partial_t \mathbf{Y}} = \{ \{ \mathbf{X}_t + \Delta t_X \partial_t \mathbf{X}_t, \mathbf{Y}_t + \Delta t_Y \partial_t \mathbf{Y}_t \} \mid t \in [t_0, t_n] \}, \quad (2.11)$$

o su equivalente para (2.9)

$$S_{\mathbf{X}, \mathbf{Y} + \Delta t \partial_t \mathbf{Y}} = \{ \{ \mathbf{X}_t, \mathbf{Y}_t + \Delta t \partial_t \mathbf{Y}_t \} \mid t \in [t_0, t_n] \}, \quad (2.12)$$

y otro que se define como conjunto de precedencia

$$P_{\Delta t; \mathbf{X} \rightarrow \mathbf{Y}} = \{ \{ \mathbf{X}_t, \mathbf{Y}_{t+\Delta t} \} \mid 0 < \Delta t \ll t_n - t_0; t \in [t_0, t_n] \}. \quad (2.13)$$

La existencia del conjunto de simultaneidad (2.11) o (2.12) es consecuencia de establecer la relación de causalidad entre eventos del sistema, y, a su vez, la existencia del conjunto de precedencia (2.13) es consecuencia de establecer *la causalidad entre variables*.

Entonces, para la estructura (2.9) la notación de simultaneidad es

$$\mathbf{X}_t \leftrightarrow \mathbf{Y}_t + \Delta t \frac{\partial \mathbf{Y}}{\partial t}. \quad (2.14)$$

En esta notación, la producción simultanea entre variables ya no es directa, es necesaria además la contribución de la derivada a primer orden en el tiempo de una de las variables modulada por su respectivo tiempo de retardo.

Por completez, si no se tomara la transformación (2.8) con lo cual se mantiene la forma (2.7), la notación de simultaneidad equivalente con los tiempos de retardo es

$$\mathbf{X}_t + \Delta t_X \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial t} \leftrightarrow \mathbf{Y}_t + \Delta t_Y \frac{\partial \mathbf{Y}}{\partial t}, \quad (2.15)$$

con lo cual la producción simultanea de variables es expresada de forma aún más complicada.

Para denotar la causalidad entre variables se propone la notación

$$\mathbf{X}_t \rightarrow \mathbf{Y}_{t+\Delta t}, \quad (2.16)$$

o para la estructura (2.7) con $\Delta t_X < \Delta t_Y$, la notación

$$\mathbf{X}_{t+\Delta t_X} \rightarrow \mathbf{Y}_{t+\Delta t_Y}. \quad (2.17)$$

Ambas notaciones de causalidad solo puede leerse en un sentido: \mathbf{X} *causa* \mathbf{Y} . Así, solo resta condensar toda esta descripción en una definición de causalidad para variables.

Definición 5 (Causalidad entre variables (lineal)). Se tiene una relación de causalidad entre variables **A** y **B** si se cumple

1. Existe Δt (o Δt_a y Δt_b) tal que **A** precede a **B**
2. La producción de **B** a partir de **A** está descrita por la estructura (2.9) (o (2.7))
3. Las variables **A** y **B** son únicas para el sistema y están construidas por (2.4)

Así, se concluye que todos los modelos físicos descritos por (2.3), (2.7), o (2.9) cuentan con relaciones causales entre eventos del sistema (definición 4). Mientras tanto, solo los modelos físicos descritos por (2.9) (o (2.7)), cuentan con relaciones causales entre variables (definición 5).

Esto describe una interpretación cualitativa de la causalidad para eventos y variables, con lo cual los resultados que se obtengan con la metodología basada en la entropía de transferencia podrán tener un significado que contribuirá con la interpretación cuantitativa. Por tanto, el siguiente paso es establecer un esquema para los modelos físicos que permita aplicar la entropía de transferencia, y que, junto a las definiciones de causalidad establecidas, permita realizar su caracterización en los modelos físicos a tratar.

2.3 Esquema general para la caracterización de la causalidad

En la sección anterior se mencionó que para establecer la producción causal entre eventos es necesaria la descripción de un algoritmo iterativo que permita el cálculo de un evento a partir de su antecesor. Esto fue un adelanto del primer paso necesario para establecer el esquema de medición de la causalidad: cambiar el dominio temporal del continuo al discreto. De tal modo, el dominio temporal $t \in [t_0, t_n]$ se convierte en un conjunto finito de $n + 1$ valores para el tiempo, tal que $t = t_0, \dots, t_i, \dots, t_n$, con el índice $i = 0, \dots, n$. Al discretizar el tiempo y precisar *a priori* su conjunto finito de valores permitidos por el algoritmo se supera el inconveniente de la inserción de eventos arbitraria mencionada para la definición 2.

Si las variables **X** y **Y**, ahora consideradas causales, pasan a su forma discreta, entonces $\mathbf{X}(t_i) = \mathbf{X}_i$ y $\mathbf{Y}(t_i) = \mathbf{Y}_i$ pasan a ser *series de tiempo*.

Con las variables causales descritas como series de tiempo, y considerando que sean variables aleatorias, los conjuntos de precedencia y/o simultaneidad pasan a ser las *realizaciones* del modelo. Al ser estas realizaciones construidas a partir de variables aleatorias, existe un conjunto infinito de realizaciones; a este conjunto infinito se le llama *ensamble* de realizaciones del sistema.

Para aplicar una metodología fundamentada en la entropía de transferencia, es necesario solo tomar una *muestra* del ensamble, ya que en la práctica es imposible trabajar sobre un conjunto infinito de datos. La muestra del ensamble entonces pasa a ser generada por la implementación de los algoritmos en una simulación numérica.

Una vez generada la muestra del ensamble de realizaciones se aplicarán la entropía de transferencia para proceder con el análisis de la causalidad, el cual se interpretará apoyándose en las definiciones 2, 3, 4 y 5. Al complementar el análisis con esta interpretación, se logrará caracterizar cuantitativamente las relaciones de causalidad.

Esto describe el esquema general que permite la caracterización de la causalidad en modelos físicos teóricos, lo cual concluye esta sección. A continuación, se describen los modelos físicos de interés donde se realizará la caracterización cuantitativa de las relaciones de causalidad.

Descripción causal de los modelos físicos

Existen una serie de modelos [18] que describen la conducción de calor en materiales rígidos en una sola dimensión. En este capítulo se describen varios de ellos con lo cual se podrá definir en particular para cada uno sus respectivas relaciones de causalidad. Para definir las relaciones de causalidad en los modelos se describirán las ecuaciones; y su respectivo algoritmo para su implementación en simulación numérica.

En general, los modelos de conducción de calor en una dimensión se describen con una ecuación de tipo transporte y una ecuación constitutiva. La ecuación de transporte correspondiente a cada modelo debe derivarse al combinarse la ecuación constitutiva y la ecuación de conservación de la energía

$$C(x) \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} = \zeta(x, t), \quad (3.1)$$

definiendo T como la temperatura y q como el flujo de calor; con $C(x) = \rho(x)C_v(x)$ donde $\rho(x)$ es la densidad y $C_v(x)$ la capacidad calorífica del material; por otra parte $\zeta(x, t)$ es la interacción energética que tiene el sistema con el ambiente.

Para este estudio se considera el caso en que el material es uniforme y aislado del ambiente, es decir que $C(x)$ es una constante tal que $C(x) \neq 0$ y $\zeta(x, t) = 0$. Además, otra consecuencia de esta suposición es que la conductividad térmica $k(x) = \text{cte}$ y la longitud libre media de los fonones $l(x) = \text{cte}$ las cuales están presentes en sus respectivas ecuaciones constitutivas.

Antes de comenzar a describir cada modelo, para evitar redundancias al repetir el discurso, se hace notar que todos modelos ya están descritos siguiendo alguna de las estructuras causales (2.3), (2.7) o (2.9), por lo tanto, son interpretables en términos de las definiciones 3, 4 y/o 5 según sea el caso.

Al implementarse la simulación numérica en este estudio, es conveniente presentar los modelos de la forma adimensional, las cuales se obtienen al aplicar las siguientes variables adimensionales

$$x^* = \frac{x}{L}, \quad t^* = \frac{t}{t_c}, \quad T^* = \frac{T}{T_0}, \quad q^* = \left(\frac{kT_0}{L}\right)^{-1} q,$$

donde L es la longitud del material, t_c es el tiempo característico, y T_0 es la temperatura inicial.

Por claridad, la manipulación algebraica necesaria para derivar la correspondiente ecuación de tipo transporte y la respectiva transformación del modelo de su forma dimensional a la adimensional está presentada en el Apéndice A, mientras que la demostración de la equivalencia del modelo de Jeffreys con el modelo de Guyer-Krumhansl está descrita en el Apéndice B.

Por otra parte, la notación presente en los algoritmos puede necesitar cierta explicación. Dicha explicación se encuentra detallada en el Apéndice D.

Así pues, se describen los cuatro modelos de conducción de calor en materiales en una dimensión: *Fourier*, *Maxwell-Cattaneo-Vernotte*, y *Jeffreys-Guyer-Krumhansl*.

3.1 Modelo de Fourier

La ecuación constitutiva es la *ley de Fourier*

$$q = -\frac{\partial T}{\partial x}. \quad (3.2)$$

Realizando el álgebra adecuada se obtiene la *ecuación de difusión*

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}, \quad (3.3)$$

donde $\alpha = Dt_c L^{-2}$ es el número de Fourier.

Ambas ecuaciones 3.2, y 3.3 siguen la estructura causal 2.3, por tanto solo presenta causalidad entre eventos, mientras que para las variables solo presenta una relación de simultaneidad descrita por la definición 3.

El algoritmo de solución numérica del modelo de Fourier está expresado por la Figura 3.1.

Algoritmo 1: SolF

Datos: $\alpha, x, t, T_0, u_0, q_0, FT$

Resultado: T, u, q

para $i = 0, \dots, n - 1$ **hacer**

$$\left[\begin{array}{l} T_{i+1} \Leftarrow \mathbf{RK4} \left(T_i, \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \Big|_i, FT_i \right); \\ u_{i+1} \Leftarrow \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \Big|_{i+1}; \\ q_{i+1} \Leftarrow -\frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{i+1}; \end{array} \right.$$

Figura 3.1: Algoritmo para la solución numérica del modelo de Fourier.

La notación $\mathbf{RK4}(\cdot, \cdot, \cdot)$ expresa la aplicación del método de *Runge-Kutta de cuarto orden*, mientras que las derivadas parciales espaciales de primer y segundo orden son construidas empleando diferencias finitas. El subíndice $i \in [0, \dots, n - 1]$ representa el número de paso correspondiente al tiempo $t_i \in [t_0, \dots, t_{n-1}]$, por lo tanto, T_0, u_0 y q_0 son las condiciones iniciales del sistema, mientras que FT son las condiciones de frontera para la temperatura. Por completez en los resultados, se define $u = \frac{\partial T}{\partial t}$.

3.2 Modelo de Maxwell-Cattaneo-Vernotte (MCV)

La ecuación constitutiva de MCV introduce el tiempo de retardo efectivo τ_q a la ley de Fourier

$$q(t + \tau_q) = -\frac{\partial T}{\partial x}; \quad q + \tau_q \frac{\partial q}{\partial t} = -\frac{\partial T}{\partial x} \quad (3.4)$$

y realizando la manipulación algebraica en combinación con la ecuación de conservación de la energía, se obtiene la correspondiente ecuación de transporte

$$\frac{\partial T}{\partial t} (t + \tau_q) = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}; \quad \frac{\partial T}{\partial t} + \tau_q \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}. \quad (3.5)$$

Se puede notar rápidamente que si $\tau_q = 0$, el modelo de MCV se reduce a Fourier.

Los pares de ecuaciones 3.4 y 3.5 conforman el modelo adimensional de MCV. La diferencia entre las ecuaciones del lado izquierdo y derecho consiste en la aplicación del traductor (2.10), y cada lado tiene su utilidad: el lado izquierdo permitirá realizar el análisis de causalidad entre variables causales mientras el lado derecho da lugar al algoritmo de producción causal entre eventos, lo cual a su vez da lugar a la simulación numérica.

Una vez expresada la estructura matemática del modelo de MCV, se muestra su respectivo algoritmo de simulación numérica en la Figura 3.2.

Algoritmo 2: SolMCV**Datos:** $\alpha, \tau_q, x, t, T_0, q_0, u_0, FT$ **Resultado:** T, u, q **para** $i = 0, \dots, n - 1$ **hacer**

$$\begin{cases} u_{i+1} \Leftarrow \mathbf{RK4} \left(u_i, \frac{1}{\tau_q} \left[\alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \Big|_i - u_i \right] \right); \\ T_{i+1} \Leftarrow \mathbf{Euler} (T_i, u_{i+1}, FT_i); \\ q_{i+1} \Leftarrow \mathbf{RK4} \left(q_i, -\frac{1}{\tau_q} \left[\frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{i+1} + q_i \right] \right); \end{cases}$$

Figura 3.2: Algoritmo para la solución numérica del modelo de MCV

Aquí $u = \frac{\partial T}{\partial t}$ se emplea para reducir el orden en las derivadas parciales temporales de la ecuación 3.5, lo cual permite aplicar $\mathbf{RK4}(\cdot, \cdot, \cdot)$ para su solución en u . Por otra parte $\mathbf{Euler}(\cdot, \cdot, \cdot)$ representa la aplicación del método de *Euler*. Finalmente, para que el algoritmo tenga sentido se debe cumplir $\tau_q > \Delta t$, con $\Delta t = t_{i+1} - t_i$, el tamaño de paso del tiempo de simulación, para cualquier i válida.

3.3 Modelo de Jeffreys-Guyer-Krumhansl (JGK)

En el Apéndice C se muestra que para las condiciones de estudio, los modelos de Jeffreys y de Guyer son equivalentes con $\tau_{\partial_x T} = \beta$, y por tanto, se reducen a un solo modelo el cual se le llamará Jeffreys-Guyer-Krumhansl (JGK).

El modelo está dado por

$$q(t + \tau_q) = -\frac{\partial T}{\partial x}(t + \beta); \quad q + \tau_q \frac{\partial q}{\partial t} = -\left[\frac{\partial T}{\partial x} + \beta \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right) \right] \quad (3.6)$$

y

$$\frac{\partial T}{\partial t}(t + \tau_q) = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(t + \beta); \quad \frac{\partial T}{\partial t} + \tau_q \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} = \alpha \left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \beta \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right) \right], \quad (3.7)$$

donde

$$\beta = \frac{\lambda^2}{\alpha} = \frac{l^2}{t_c D}, \quad (3.8)$$

con $\lambda = lL^{-1}$ es el número de Knudsen.

En el modelo de JGK, aparecen dos tiempos de retardo efectivo, τ_q y β , correspondientes al flujo de calor q y al número de Knudsen λ . Si se hace $\tau_q = 0$ y $\beta = 0$, se devuelve el modelo de Fourier.

En este modelo, se presenta la oportunidad para aplicar una reducción al modelo de MCV empleando la transformación (2.8), lo cual eliminaría uno de los tiempos de retardo. Sin embargo se opta por no hacerlo para ofrecer un análisis más completo y contrastar la causalidad con el resto de los modelos.

El algoritmo de solución numérica del modelo de JGK se muestra en la Figura 3.3. Comparado con el algoritmo 3.2, la diferencia principal es la introducción de β y los términos correspondientes.

En la siguiente sección se describen las relaciones y variables causales de cada modelo.

Algoritmo 3: SolJGK**Datos:** $\alpha, \tau_q, \beta, x, t, T_0, q_0, u_0, FT$ **Resultado:** T, u, q **para** $i = 0, \dots, n - 1$ **hacer**

$$\left[\begin{array}{l} u_{i+1} \leftarrow \text{RK4} \left(u_i, \frac{1}{\tau_q} \left[\alpha \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \Big|_i + \beta \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \Big|_i \right) - u_i \right] \right); \\ T_{i+1} \leftarrow \text{Euler} (T_i, u_{i+1}, FT_i); \\ q_{i+1} \leftarrow \text{RK4} \left(q_i, -\frac{1}{\tau_q} \left[\frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{i+1} + \beta \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{i+1} + q_i \right] \right); \end{array} \right.$$

Figura 3.3: Algoritmo para la solución numérica del modelo de JGK

3.4 Relaciones y variables causales de los modelos de conducción de calor

El análisis de la causalidad en los modelos de conducción de calor se realizará principalmente entre las variables causales. Para ello, es necesario identificar estas variables que no necesariamente corresponden a las variables físicas de interés usuales. Para su identificación, se hace referencia a las estructuras causales (2.3), (2.7), y (2.9) descritas en el capítulo 2.

Para los modelos de Fourier, MCV, y JGK, siguiendo las ecuaciones (3.2), (3.3), (3.4), (3.5), (3.6), y (3.7) las variables causales, son las mismas. Estas son

$$\mathbf{A} = \frac{\partial T}{\partial t}; \quad \mathbf{B} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}; \quad \mathbf{C} = q; \quad \mathbf{D} = \frac{\partial T}{\partial x}. \quad (3.9)$$

Sin embargo, estas son solo las variables causales, el tipo de relación causal que presentan también debe describirse. Empleando la notación (2.6), y (2.16), recordando que $\Delta t = t_{i+1} - t_i$ y empleando la notación $\mathbf{X}_{t_i} = \mathbf{X}_i$, se tiene para cada caso:

Fourier Solo se presenta simultaneidad debido a la carencia de precedencia entre variables

$$\mathbf{A}_i \rightleftharpoons \mathbf{B}_i; \quad \mathbf{C}_i \rightleftharpoons \mathbf{D}_i. \quad (3.10)$$

MCV Se da una causalidad con el tiempo de retardo es τ_q . Si $\tau_q = m\Delta t$, con m un entero positivo, entonces

$$\mathbf{B}_i \rightarrow \mathbf{A}_{i+m}; \quad \mathbf{D}_i \rightarrow \mathbf{C}_{i+m}. \quad (3.11)$$

JGK Presenta causalidad con dos tiempos de retardo τ_q y β . Si $\tau_q = m_q\Delta t$, y $\beta = m_\beta\Delta t$, con ambos m_q y m_β enteros positivos y además, $m_\beta < m_q$, se tiene

$$\mathbf{B}_{i+m_\beta} \rightarrow \mathbf{A}_{i+m_q}; \quad \mathbf{D}_{i+m_\beta} \rightarrow \mathbf{C}_{i+m_q}. \quad (3.12)$$

Al revisar las relaciones de cada modelo, se observa que las relaciones solo se dan en dos parejas: **A** con **B**, y **C** con **D**. Para otra pareja, por ejemplo, **A** con **C**, es un tanto complicado el planteamiento de algún tipo de relación debido a que para este estudio no se contempla una ecuación que siga cualquiera de las estructuras (2.2), (2.3), (2.7), o (2.9), por tanto, se desconoce si presentan algún tipo de precedencia, la producción de una respecto a la otra, o si existen otros factores que intervengan en su producción. Por tanto, al no contar con una descripción de su causalidad, se imposibilita su caracterización.

Habiendo identificado y descrito las variables y relaciones causales presentes en cada modelo, se procede a discutir un punto importante sobre el esquema para la caracterización de la causalidad que hasta el momento se había ignorado: el ensamble de realizaciones.

3.5 Ensamble de realizaciones y condiciones de frontera

Los algoritmos de los modelos (Figuras 3.1, 3.2 y 3.3), una vez implementados en un código numérico, permiten obtener una solución dadas las condiciones iniciales y de frontera. En el caso de las condiciones iniciales, para este estudio siempre son las mismas, y son

$$T(x, t = 0) = T_0 = 1 + \mu_T(1 - x); \quad u(x, t = 0) = u_0 = 0; \quad q(x, t = 0) = q_0 = -\mu_T. \quad (3.13)$$

Por otro lado, para el estudio se eligen condiciones de frontera de tipo Dirichlet. Estas son

$$T(x = 0, t) \sim \tilde{\mathcal{N}}(\mu_T, \sigma_T^2; [T_{min}, T_{max}]); \quad T(x = 1, t) = 1. \quad (3.14)$$

La frontera en $x = 0$ para cada valor de t está dada por $\tilde{\mathcal{N}}$ la cual es una distribución de probabilidad normal truncada, donde μ_T es el promedio y σ_T es la desviación estándar de la temperatura en $x = 0$. La distribución se trunca en los límites $T_{min} = 1$ y $T_{max} = 1 + 4\sigma_T$. De tal modo, la notación compacta empleada en los algoritmos, usando ambas condiciones de frontera (3.14), se tiene

$$\mathbb{F}\mathbb{T} = \begin{cases} T(x = 0, t) \\ T(x = 1, t) \end{cases}. \quad (3.15)$$

Dado que el ensamble tiene un número infinito de realizaciones, se define la muestra de realizaciones del ensamble de las condiciones de frontera

$$\mathbb{E}\mathbb{F} = \{\text{ef}_r = \{\mathbb{F}\mathbb{T}\}_r \mid r \in [1, R]\}, \quad (3.16)$$

donde, r es el número de realización y R el número total de realizaciones tal que $R < \infty$.

Dada la muestra (del ensamble) de realizaciones de la frontera $\mathbb{E}\mathbb{F}$, entonces se genera la muestra de realizaciones de variables causales, la cual está definido por

$$\mathbb{E}\mathbb{V} = \{\text{ev}_r = \{\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}, \mathbf{D}, \mathbf{E}\}_r \mid r \in [1, R]\}, \quad (3.17)$$

donde $\mathbf{E} = T$. Aunque T no aparece como variable causal en ninguno de los modelos, se agrega como extra para propósitos del posterior análisis.

Usando la notación **Sol** para indicar el uso de **SolF**, **SolMCV** o **SolJGK** según sea el caso, se define el algoritmo para generar $\mathbb{E}\mathbb{V}$ a partir de $\mathbb{E}\mathbb{F}$ en la Figura 3.4.

Algoritmo 4: GenVariablesCausales

Datos: $\alpha, \tau_q, \beta, x, t, T_0, q_0, u_0, \mathbb{E}\mathbb{F}$

Resultado: $\mathbb{E}\mathbb{V}$

para $r = 1, \dots, R$ **hacer**

$$\left[\begin{array}{l} T, u, q \leftarrow \mathbf{Sol}(\alpha, \tau_q, \beta, x, t, T_0, q_0, u_0, \text{ef}_r); \\ \mathbf{A} \leftarrow u; \\ \mathbf{B} \leftarrow \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}; \\ \mathbf{C} \leftarrow q; \\ \mathbf{D} \leftarrow \frac{\partial T}{\partial x}; \\ \mathbf{E} \leftarrow T; \end{array} \right.$$

Figura 3.4: Algoritmo para la generación de $\mathbb{E}\mathbb{V}$

Fijando el algoritmo de solución en particular, se obtiene $\mathbb{E}\mathbb{V}$ para su respectivo modelo, por tanto, se tiene completa la representación cualitativa de la causalidad para cada modelo de conducción de calor y, el primer paso para proceder con su análisis numérico.

3.6 Calibración del método de solución

Se definieron los algoritmos 3.1, 3.2 y 3.3 para la solución numérica de cada modelo de conducción de calor. Dados que estos métodos están en el núcleo de la generación de las muestras de realizaciones $\mathbb{E}V$ por 3.4, es de suma importancia tener siempre en cuenta su respectiva *calibración*.

Dadas las condiciones iniciales y de frontera (3.13), (3.14), la simulación numérica se realiza a partir del estado estacionario y se mantiene fluctuando alrededor de éste para los tres modelos. En el Apéndice E se muestra el álgebra del estado estacionario y su respectiva gráfica para cada modelo. En cada caso, se observa que la solución numérica se ajusta muy bien a la analítica. Los detalles de la implementación de la solución numérica se tienen en Apéndice F.

Dado que para el análisis de causalidad se requiere una muestra $\mathbb{E}V$ generada por valores FT dados por (3.14), se muestra en la Figura 3.5 las gráficas con todas las realizaciones de la temperatura para cada uno de los modelos. Se debe recordar que las series de tiempo de las variables \mathbf{A} , \mathbf{B} , \mathbf{C} , \mathbf{D} , y $\mathbf{E} = T$ se capturan en el punto de interés $x_p = 0.2$.

Se observa en las tres gráficas como para la muestra del ensamble la temperatura para cada uno de los modelos varía entre cierto rango de valores. Las gráficas son muy similares entre sí, esto se debe a que las tres se construyen de manera independiente con su respectiva simulación pero usando la misma muestra del ensamble de fronteras $\mathbb{E}F$. Sin embargo, en teoría debido a la existencia de los tiempos de retardo τ_C y τ_D , deben existir ciertas diferencias entre las series de tiempo de cada modelo entre sí.

En la Figura 3.6 se muestra la comparación entre el promedio numérico y la solución analítica para el caso con frontera fija μ_T . Dado el *teorema del límite central* [28], este promedio aproxima al promedio real del ensamble (con infinitas realizaciones), el cual es justamente el caso analítico con frontera fija μ_T . Si bien esto no dice nada sobre la distribución de las realizaciones de la muestra del ensamble, sí refleja que al menos para esta muestra el promedio se aproxima al promedio analítico de frontera fija. En el sombreado azul se tiene entre que valores máximos y mínimos están todas las realizaciones mostradas en la Figura 3.5 por cada paso en el tiempo.

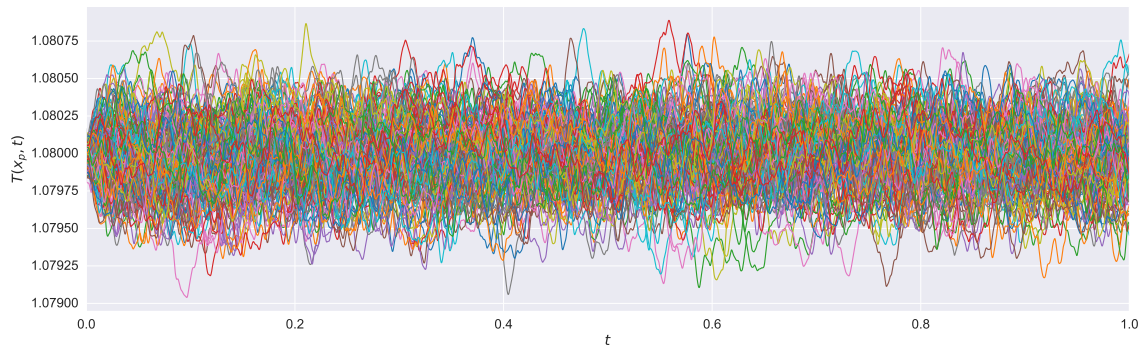
Para estudiar la distribución de la muestra del ensamble de realizaciones, se debe voltear a ver a la implementación de la simulación. La generación de realizaciones de la frontera $\mathbb{E}F$ se genera a partir de la *API* correspondiente de Numpy (ver Apéndice F). Se emplea una función para generar las R realizaciones del ruido, el cual está dado por una distribución normal que corresponda con (3.14), la cual se aprecia en la Figura 3.7.

Con la muestra $\mathbb{E}F$, se aplica el correspondiente algoritmo de solución 3.1, 3.2 y 3.2 para obtener las realizaciones de $\mathbf{E} = T$ mostradas en la Figura 3.5. Finalmente, se obtiene su respectivo histograma el cual se muestra en la Figura 3.8. En los tres modelos, se muestra una aproximación a una distribución normal y más aún, se alcanzan a apreciar las pequeñas diferencias entre ellas. Así se tiene de forma precisa como está dada la distribución de la temperatura $T(x = x_p)$.

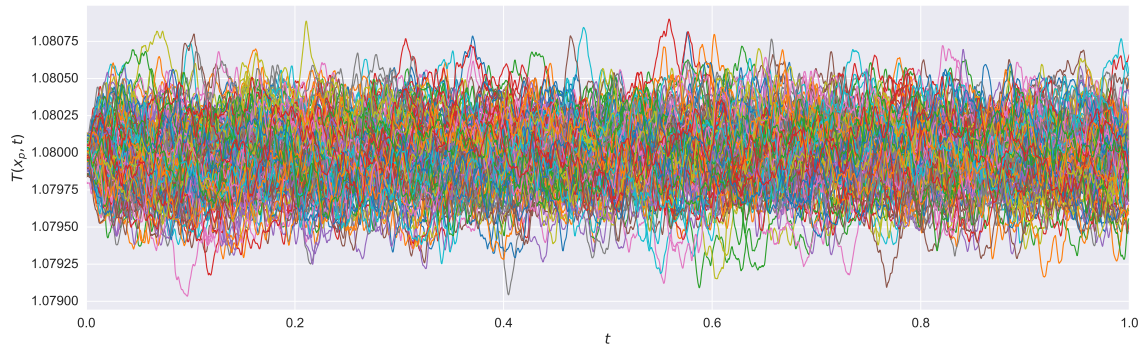
Dado este ejercicio de calibración, ahora se tiene una idea de que tan confiable es la implementación numérica de los algoritmos 3.1, 3.2 y 3.3. Por lo cual, se puede continuar con el cálculo de $\mathbb{E}V$ para cada modelo.

3.7 Resumen

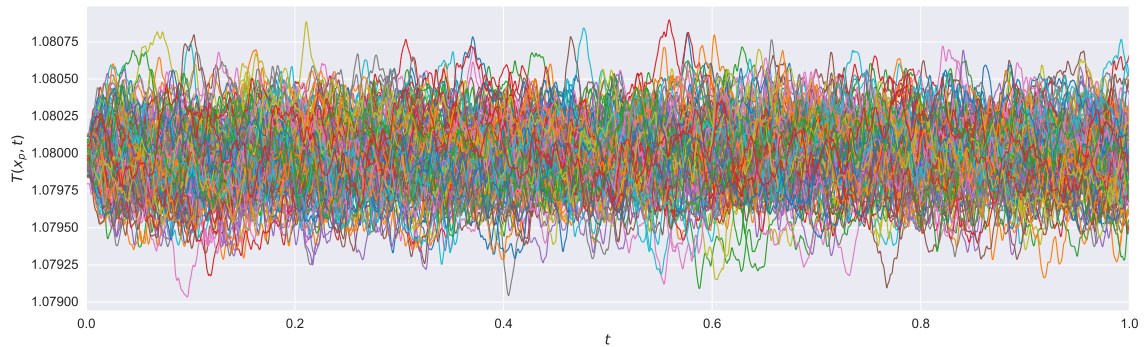
Se toman una serie de modelos de conducción de calor para materiales sólidos simples en una dimensión. Estos modelos están descritos matemáticamente por un par de ecuaciones diferenciales: la ecuación constitutiva y la ecuación de tipo transporte. Al escribir ambas, se puede determinar el tipo de causalidad entre variables siguiendo el esquema de caracterización descrito en el capítulo 2 y, además, permite determinar un algoritmo de simulación numérica.



(a) Caso 2 (con tamaño de paso en el tiempo $\Delta t = 1.0 \times 10^{-5}$) de Fourier



(b) Caso 2a (con tamaño de paso en el tiempo $\Delta t = 1.0 \times 10^{-5}$ y tiempo de retardo $\tau_C \tau = 10\Delta t$) de MCV

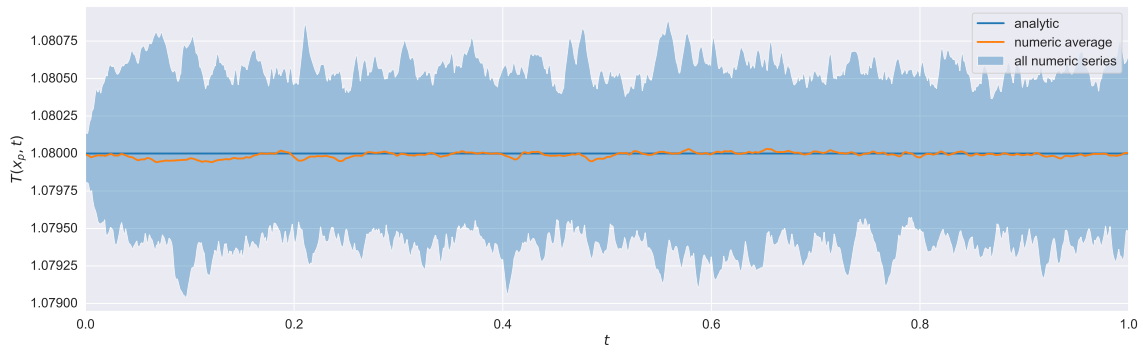


(c) Caso 2a (con tamaño de paso en el tiempo $\Delta t = 1.0 \times 10^{-5}$, tiempos de retardo $\tau_C = 15\Delta t$ y $\tau_D = 5\Delta t$) de JGK

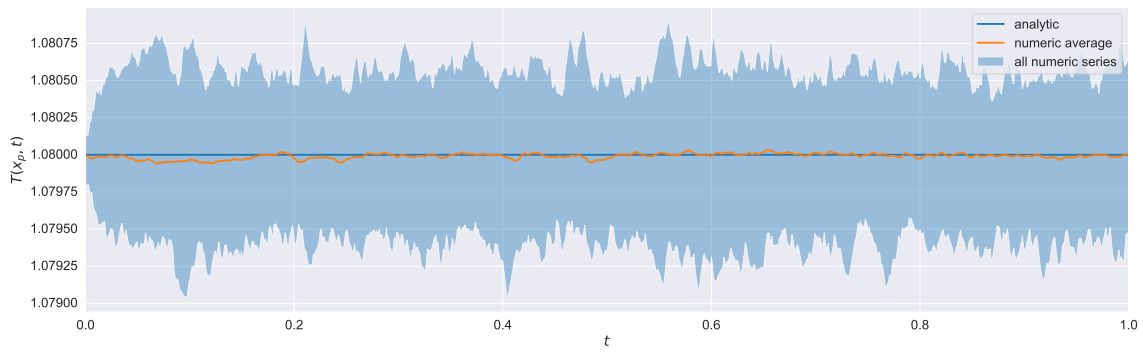
Figura 3.5: Promedio numérico de la muestra del ensamble de realizaciones para la temperatura

Empleando los algoritmos de simulación numérica se generan los ensambles $\mathbb{E}V$ a partir de $\mathbb{E}F$ para cada modelo de conducción de calor.

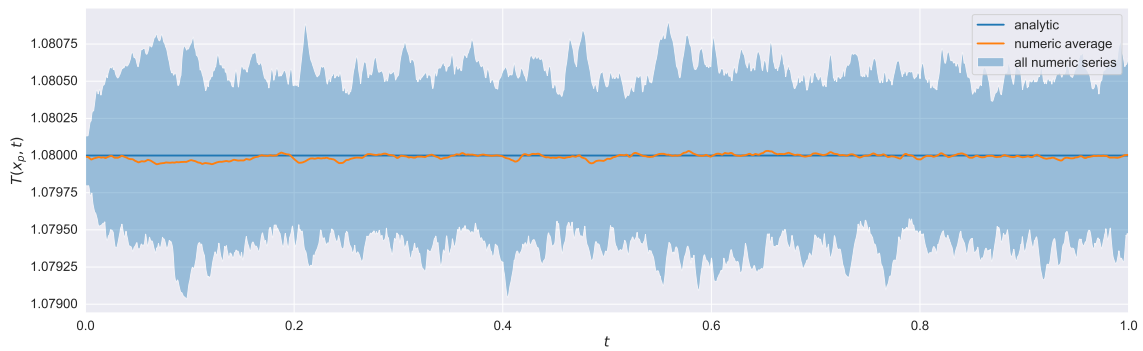
El ensamble $\mathbb{E}V$ es un conjunto de series de tiempo perfectamente etiquetado, por lo tanto, se toma de punto de partida para alimentar a la metodología de análisis de la causalidad basada en la teoría de la información, la cual se describe en el siguiente capítulo.



(a) Caso 2 (con tamaño de paso en el tiempo $\Delta t = 1.0 \times 10^{-5}$) de Fourier

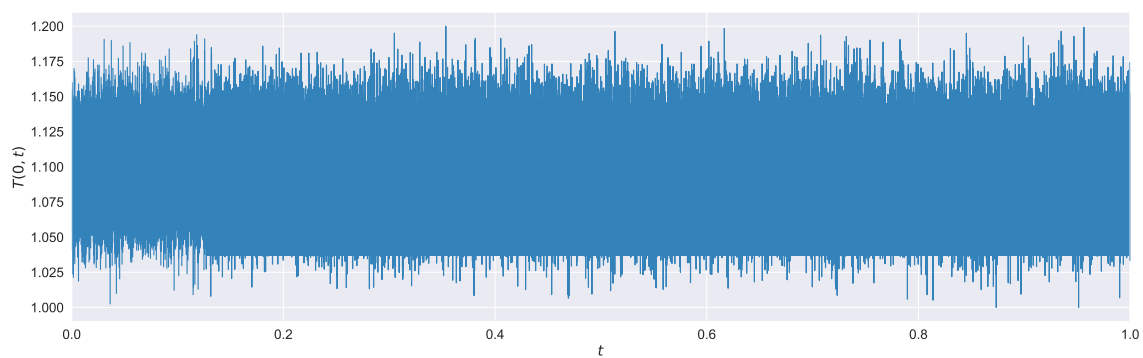


(b) Caso 2a (con tamaño de paso en el tiempo $\Delta t = 1.0 \times 10^{-5}$ y tiempo de retardo $\tau_C \tau = 10\Delta t$) de MCV

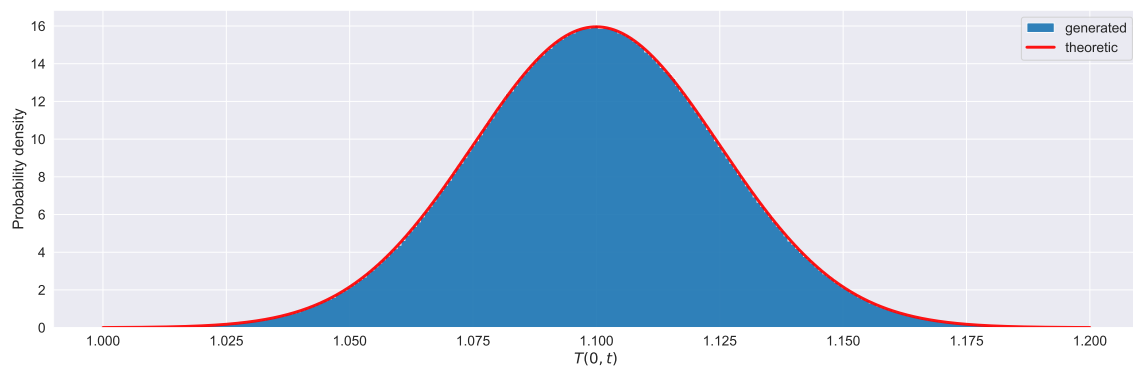


(c) Caso 2a (con tamaño de paso en el tiempo $\Delta t = 1.0 \times 10^{-5}$ y tiempos de retardo $\tau_C = 15\Delta t$ y $\tau_D = 5\Delta t$) de JGK

Figura 3.6: Muestra del ensamble de realizaciones para la temperatura

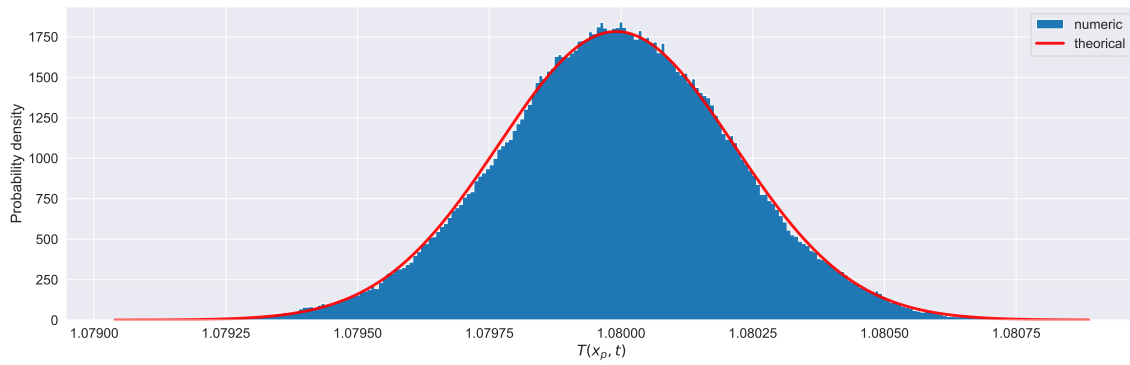


(a) Serie de tiempo de una realización de la frontera para el caso 2 (con tamaño de paso en el tiempo $\Delta t = 1.0 \times 10^{-5}$)

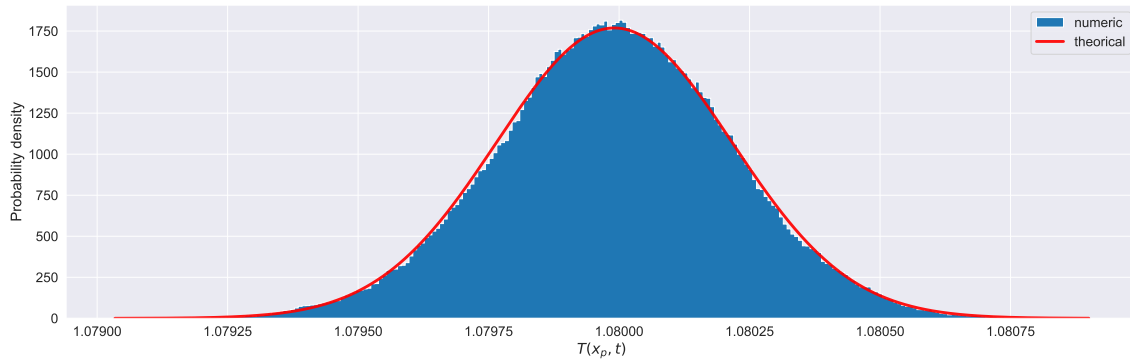


(b) Distribución de la muestra del ensemble de la frontera para el caso 2 (con tamaño de paso en el tiempo $\Delta t = 1.0 \times 10^{-5}$)

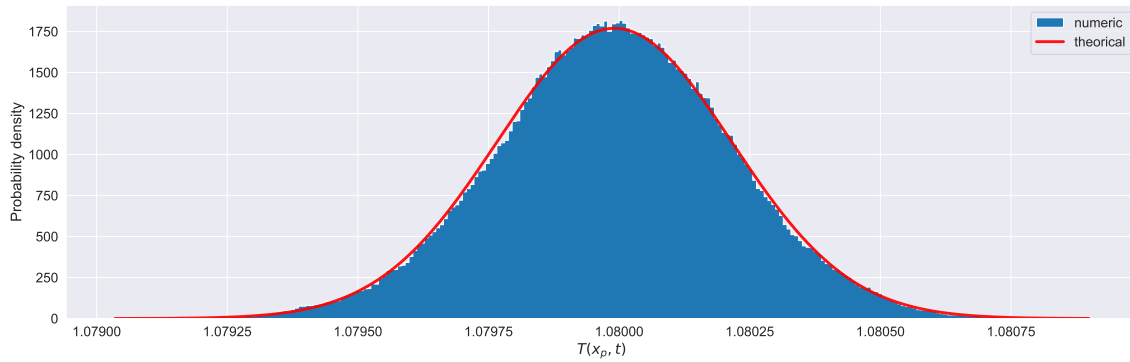
Figura 3.7: Caracterización del ensemble de la frontera IEF



(a) Caso 2 (con tamaño de paso en el tiempo $\Delta t = 1.0 \times 10^{-5}$) de Fourier



(b) Caso 2a (con tamaño de paso en el tiempo $\Delta t = 1.0 \times 10^{-5}$ y tiempo de retardo $\tau_C \tau = 10\Delta t$) de MCV



(c) Caso 2a (con tamaño de paso en el tiempo $\Delta t = 1.0 \times 10^{-5}$ y tiempos de retardo $\tau_C = 15\Delta t$ y $\tau_D = 5\Delta t$) de JGK

Figura 3.8: Histogramas de la muestra del ensamble de realizaciones para la temperatura

Metodología y Validación

En el capítulo anterior, se describió las relaciones de causalidad entre variables presentes en los modelos de conducción de calor basándose en el esquema de caracterización establecido en el capítulo 2. Ahora siguen los cálculos. La cuestión es entonces cómo representar o por lo menos, reflejar, la causalidad numéricamente. La respuesta que se propone para este estudio es cálculos de la *entropía de transferencia simbólica* $\mathcal{E}TS$.

4.1 Información y Entropía de Shannon

La *teoría de la información*, o cómo fue concebida por Shannon [29], la *teoría matemática de la comunicación*, es la teoría encargada del estudio de la *cuantificación, almacenamiento y transmisión* de la información, la cual es tratada como un conjunto o secuencias de datos medibles, finitos y estructurados por alguna sintaxis.

La información usualmente se mide en *bits*. Para calcular el número de bits contenidos en una pieza de información \mathbf{X} se emplea la entropía de Shannon

$$\mathcal{E}(\mathbf{X}) = - \sum_{x_i} P(x_i) \log_2(P(x_i)), \quad (4.1)$$

donde $P(x_i)$ es la probabilidad de que la variable aleatoria x tome el valor x_i .

Para ilustrar la definición de la entropía de Shannon se toma el caso de una moneda justa **MJ**. Para la moneda justa x solo puede tomar los valores de águila a o sol s , y ambos tienen la misma probabilidad $P(a) = P(s) = 0.5$, por tanto, el cálculo de entropía de transferencia devuelve

$$\mathcal{E}(\mathbf{MJ}) = -P(a) \log_2(P(a)) - P(s) \log_2(P(s)) = \frac{1}{2} \log_2(2) + \frac{1}{2} \log_2(2) = 1.$$

La información contenida por la moneda justa es de 1 bit. Si se toman n monedas justas e independientes, se tienen n bits, con los cuales se pueden formar 2^n de combinaciones o secuencias de a y s de longitud n . Dejando de lado de que se habla de monedas justas, se tiene que a mayor número de bits, se tiene un mayor número de secuencias binarias accesibles.

Estas secuencias binarias al ser codificadas mediante una sintaxis adecuada (software), permiten generar estructuras tales como números, caracteres, programas, imágenes, sonido, vibraciones, etc. las cuales para el usuario pueden tener *significado* o no. Este hecho, junto a la idea de que \mathbf{X} puede ser cualquier pieza de información, deja ver que la entropía de Shannon no acarrea el significado de \mathbf{X} , solo mide el número de bits que contiene. Si se plantea el uso de la entropía de Shannon, o cualquier otra medida de entropía de la teoría de la información, siempre debe tenerse en cuenta el significado de \mathbf{X} .

Ahora se toma el caso de una moneda totalmente “injusta” **MI**. Para este caso, la moneda solo puede tomar un valor, por ejemplo s , de tal modo que su probabilidad es $P(s) = 1$. Entonces, la entropía de Shannon devuelve

$$\mathcal{E}(\mathbf{MI}) = -P(s) \log_2(P(s)) = 1 \log_2(1) = 0.$$

La moneda totalmente injusta contiene cero bits, por lo tanto es una pieza de información totalmente *ambigua*.

Dado que para la entropía de Shannon le es irrelevante el significado de \mathbf{X} , la moneda injusta, en el dominio de la teoría de la información, es equivalente a un loro que solo sabe decir “Hola”.

No importa que se le pregunte al loro, siempre responderá “Hola”, si se pretende preguntarle a este loro cual es el estado del clima o si sabe donde están las llaves, él jamás podrá arrojar una respuesta satisfactoria.

Si la ambigüedad total es representada por cero bits, ¿qué se interpreta de una pieza de información que contenga $n > 0$ bits? Para 1 bit es sencillo: puede interpretarse simplemente como los estados encendido y apagado, y dependiendo el contexto de la variable, tiene su significado. Ejemplo, suponiendo que \mathbf{X} sea un led indicador del aceite en un automóvil, el encendido y apagado representa si se necesita cambiar o no el aceite del vehículo. Esto es con tan solo un bit, para $n > 1$ bits se pueden describir ideas u objetos más complejos. Estas ideas u objetos al aumentar su complejidad, van reduciendo su ambigüedad, por tanto, la información vista como un número $n > 0$ de bits se interpreta como la reducción en la ambigüedad.

Esto es una pequeña descripción de la entropía de Shannon y algunos conceptos importantes que se tienen respecto a la información. La información como objeto de estudio, es un concepto mucho más complejo que llega a tener relevancia en otras disciplinas del conocimiento [30, 31, 32, 33, 34]. Sin embargo, esta breve descripción es suficiente para este trabajo y para abordar la herramienta principal para este estudio: la entropía de transferencia.

4.2 Causalidad y Entropía de Transferencia

Se consideran dos procesos estocásticos descritos por las series de tiempo $\mathbf{X} = \{X_i \mid i \in [0, n - 1]\}$ e $\mathbf{Y} = \{Y_i \mid i \in [0, n - 1]\}$ definido en un espacio de estado discreto \mathcal{S} . Se definen los vectores aleatorios

$$\mathbf{X}_i^{(j)} = \{X_{i-j}, \dots, X_i \mid j \leq i \leq n - 1\}, \quad (4.2)$$

e

$$\mathbf{Y}_i^{(k)} = \{Y_{i-k}, \dots, Y_i \mid k \leq i \leq n - 1\}. \quad (4.3)$$

Aquí, $\mathbf{X}_i^{(j)}$ y $\mathbf{Y}_i^{(k)}$ se interpretan como las trayectorias que siguen los procesos \mathbf{X} y \mathbf{Y} en los tiempos $[i - j, i]$ y $[i - k, i]$, respectivamente.

Ahora, se denota con $P(y_{i+1}, y_i^{(k)}, x_i^{(j)})$ a la *probabilidad conjunta* de que la variable aleatoria Y_{i+1} (el proceso Y en el momento $i + 1$) tome el valor y_{i+1} y que las trayectorias $\mathbf{Y}_i^{(k)}$ y $\mathbf{X}_i^{(j)}$ tomen los valores

$$y_i^{(k)} = \{y_{i-k}, \dots, y_i \mid k \leq i \leq n - 1\}, \quad (4.4)$$

y

$$x_i^{(j)} = \{x_{i-j}, \dots, x_i \mid j \leq i \leq n - 1\}, \quad (4.5)$$

respectivamente.

También es necesario denotar $P(y_{i+1} | y_i^{(k)}, x_i^{(j)})$ y $P(y_{i+1} | y_i^{(k)})$, como las probabilidades *condicionales*. Esta notación expresa que, se tiene la probabilidad de que Y_{i+1} tome el valor y_{i+1} dados los valores (condiciones) $y_i^{(k)}, x_i^{(j)}$. El cálculo de ambas probabilidades condicionales está dado por

$$P(y_{i+1} | y_i^{(k)}, x_i^{(j)}) = \frac{P(y_{i+1}, y_i^{(k)}, x_i^{(j)})}{P(y_i^{(k)}, x_i^{(j)})}, \quad (4.6)$$

y

$$P(y_{i+1} | y_i^{(k)}) = \frac{P(y_{i+1}, y_i^{(k)})}{P(y_i^{(k)})}. \quad (4.7)$$

Así, habiendo definido las probabilidad conjunta y las probabilidades condicionales necesarias, se define la entropía de transferencia [1]

$$\mathcal{E}\mathcal{T}_{X \rightarrow Y} = \sum_{y_{i+1}} \sum_{y_i^{(k)}} \sum_{x_i^{(j)}} P(y_{i+1}, y_i^{(k)}, x_i^{(j)}) \log_2 \frac{P(y_{i+1} | y_i^{(k)}, x_i^{(j)})}{P(y_{i+1} | y_i^{(k)})}. \quad (4.8)$$

La entropía de transferencia, similar a la entropía de Shannon, mide información en bits. Sin embargo, hay una diferencia, la entropía de transferencia mide la información transferida de \mathbf{X} a \mathbf{Y} .

Observando su definición rápidamente, se puede notar un par de características importantes. En el caso de que \mathbf{Y} no dependa de \mathbf{X} , la probabilidad condicional $P(y_{i+1} | y_i^{(k)}, x_i^{(j)})$ se reduce a $P(y_{i+1} | y_i^{(k)})$, y por tanto

$$\mathcal{E}\mathcal{T}_{X \rightarrow Y} = 0. \quad (4.9)$$

Por otra parte, suponiendo que la dependencia entre \mathbf{X} y \mathbf{Y} no sea nula, la entropía de transferencia es una magnitud asimétrica respecto a \mathbf{X} y \mathbf{Y} , de tal modo que en general

$$\mathcal{E}\mathcal{T}_{X \rightarrow Y} \neq \mathcal{E}\mathcal{T}_{Y \rightarrow X}. \quad (4.10)$$

Tomando en cuenta la asimetría entre variables, al calcular la diferencia se obtiene uno de los posibles resultados

$$\mathcal{E}\mathcal{T}_{X \rightarrow Y} - \mathcal{E}\mathcal{T}_{Y \rightarrow X} > 0; \quad \mathcal{E}\mathcal{T}_{X \rightarrow Y} - \mathcal{E}\mathcal{T}_{Y \rightarrow X} < 0; \quad \text{o} \quad \mathcal{E}\mathcal{T}_{X \rightarrow Y} - \mathcal{E}\mathcal{T}_{Y \rightarrow X} = 0. \quad (4.11)$$

Dependiendo el sentido de la desigualdad, se puede saber dentro del sistema si hay una preferencia en el sentido de la transferencia de información, ya sea de \mathbf{X} a \mathbf{Y} , o de \mathbf{Y} a \mathbf{X} . Y, en el caso de la igualdad, se indica que la transferencia de información no tiene una preferencia en el sentido de las variables.

Para entender el papel que juega la entropía de transferencia en la detección y caracterización de la causalidad, primero se debe definir el concepto en el marco de la teoría de la información.

Definición 6 (*Causalidad en teoría de la información*). Para la teoría de la información, se tiene una relación de causalidad entre \mathbf{A} y \mathbf{B} si

1. \mathbf{A} precede a \mathbf{B}
2. El conocimiento de \mathbf{A} determina el conocimiento sobre \mathbf{B} , es decir, que la información que se tiene sobre \mathbf{A} reduce la ambigüedad que se tiene sobre \mathbf{B}

Al comparar las definiciones 2 y 6 se observa que ambas solo comparten la propiedad de precedencia, ¿Qué implica esto? ¿Ambas podrían ser equivalentes? No realmente. Suponiendo que \mathbf{X} cause \mathbf{Y} según la definición 2, se sabe que son únicos y está dado el modelo descriptivo que establece la producción de una variable respecto a la otra. Por tanto la ambigüedad sobre \mathbf{Y} se reduce al conocer \mathbf{X} , con lo cual se cumple la definición 6. Por otro lado, suponiendo que \mathbf{X} cause \mathbf{Y} según la definición 6 es imposible saber, sin información externa y limitándose solo a la teoría de la información, si se tiene una relación causal entre \mathbf{X} y \mathbf{Y} o incluso, si simplemente las variables tienen un acoplamiento (definición 1).

Así, en general, si dos variables \mathbf{X} y \mathbf{Y} tienen una relación causal descrita por la definición 2 (o un acoplamiento por definición 1), se garantiza que también tienen una relación causal según 6, sin embargo, esto no necesariamente se cumple en el sentido contrario. Esta conclusión es esperada. Para la teoría de la información no es relevante el significado que tengan las variables en su campo

del conocimiento, por tanto, lo que signifique tener una relación causal en un campo específico fuera de la teoría de la información no puede ser explicado solamente con sus herramientas.

Es también importante notar lo siguiente. Dada la definición 6, la propiedad (4.9) indica que no hay transferencia de información de una variable \mathbf{X} a \mathbf{Y} , al no recibir \mathbf{Y} información de \mathbf{X} , el conocimiento de \mathbf{X} es irrelevante y no contribuye a reducir la ambigüedad sobre \mathbf{Y} , por tanto, al menos en el sentido de \mathbf{X} a \mathbf{Y} , no se indica causalidad. Por otro lado, la propiedad (4.11) indica el sentido de la transferencia de información, y así, se sabe si el conocimiento de \mathbf{X} reduce más la ambigüedad sobre \mathbf{Y} o si es al contrario. Por tanto, indica, a nivel de la teoría de la información, cual variable causa a la otra.

En conclusión, la entropía de transferencia ofrece una excelente herramienta para detectar la posible causalidad entre variables al identificar la transferencia de información que se tiene entre ellas. Si, *a priori* se conoce el tipo de relación causal o de acoplamiento que tienen las variables, la entropía de transferencia se vuelve una herramienta para caracterizar estas relaciones, y en el caso de este trabajo, caracterizar las relaciones entre variables de los modelos de transporte de calor en materiales.

4.3 Cálculo numérico y Entropía de Transferencia Simbólica

Se ha dejado claro las “bondades” de la entropía de transferencia. Sin embargo, ahora se presenta un problema, la evaluación de (4.8) no es trivial.

En el caso de que las variables \mathbf{X} y \mathbf{Y} sean procesos de Markov de primer orden, donde los valores a futuro y_{i+1} solo dependen de los valores presentes y_i y x_i , la definición (4.8) se simplifica

$$\mathcal{E}\mathcal{T}_{\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{Y}} = \sum_{y_{i+1}} \sum_{y_i} \sum_{x_i} P(y_{i+1}, y_i, x_i) \log_2 \frac{P(y_{i+1}|y_i, x_i)}{P(y_{i+1}|y_i)}. \quad (4.12)$$

Esta simplificación es un paso hacia adelante para computar el valor de la entropía de transferencia. Sin embargo, para el propósito del cálculo numérico, puede simplificarse aún más.

Para $m \in \mathbb{N}$ de define el vector m -dimensional $\mathbf{v}_t = \{x_t, x_{t+1}, x_{t+2}, \dots, x_{t+m-1}\}$ para todo t tal que $0 \leq t \leq n - m$. Sea $P_\vartheta : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$ el operador de permutación ϑ tal que al aplicarlo al vector \mathbf{v}_t resulta en $\check{\mathbf{v}}_t = P_\vartheta(\mathbf{v}_t)$, que tiene todas sus coordenadas ordenadas en forma ascendente. Asociada a esta permutación se tiene un vector m -dimensional $\check{\mathbf{v}}_t$ cuyas coordenadas son los valores en el ranking¹ de cada coordenada del vector \mathbf{v}_t respectivamente.

Ejemplo, sea $m = 3$, y las entradas del vector \mathbf{v}_t tengan el orden $x_{t+2} < x_t < x_{t+1}$, entonces se tiene $\vartheta(\check{\mathbf{v}}_t) = \vartheta(\{2, 3, 1\}) = \{1, 2, 3\}$, y por tanto, al aplicar P_ϑ se obtiene $\check{\mathbf{v}}_t = P_\vartheta(\mathbf{v}_t) = \{x_{t+2}, x_t, x_{t+1}\}$.

Finalmente, a $\check{\mathbf{v}}_t$ se le asigna un símbolo \hat{x}_t . Entonces, dada la dimensión m , sin repetición de valores, las coordenadas de \mathbf{v}_t tienen un orden que corresponde con uno de los $m!$ posibles rankings. Por tanto, existen $m!$ posibles valores que pueden tomar el vectores $\check{\mathbf{v}}_t$, cada uno asociado a \hat{x}_t , el cual toma como valor a uno de los $m!$ posibles símbolos del diccionario $\hat{\mathbf{D}}_m$.

Entonces, dada la dimensión m de los vectores \mathbf{v}_t , la serie de tiempo $\mathbf{X} = \{x_0, \dots, x_{n-1}\}$ se reemplaza con la serie de símbolos $\hat{\mathbf{X}} = \{\hat{x}_0, \dots, \hat{x}_{n-m}\}$. Del mismo modo, \mathbf{Y} se reemplaza con la serie de símbolos $\hat{\mathbf{Y}} = \{\hat{y}_0, \dots, \hat{y}_{n-m}\}$.

Dadas las series de símbolos, se define la *entropía de transferencia simbólica* [12]

$$\mathcal{E}\mathcal{T}\mathcal{S}_{\hat{\mathbf{X}} \rightarrow \hat{\mathbf{Y}}} = \sum_i P(\hat{y}_{i+1}, \hat{y}_i, \hat{x}_i) \log_2 \frac{P(\hat{y}_{i+1}|\hat{y}_i, \hat{x}_i)}{P(\hat{y}_{i+1}|\hat{y}_i)}. \quad (4.13)$$

¹Clasificación de mayor a menor, útil para establecer criterios de valoración.

Comparando (4.13) con (4.12), la diferencia más importante se da en la simplificación de la estimación de las probabilidades conjuntas y condicionales. Para $\mathcal{E}\mathcal{T}$ se requiere emplear la estimación por densidad de kernel, por ejemplo, mientras que para $\mathcal{E}\mathcal{T}\mathcal{S}$, gracias a los valores finitos discretos que toman las variables del diccionario $\hat{\mathbf{D}}_m$, basta con simplemente calcular las probabilidades usando la técnica usual

$$P(A) = \frac{\text{No. de eventos favorables de } A}{\text{No. de eventos totales}}. \quad (4.14)$$

Computacionalmente, la entropía de transferencia simbólica es menos costosa y sencilla de calcular. Sin embargo eso conlleva un “sacrificio”. Al simbolizar las series de tiempo, se pierde información. En lugar de tener series de tiempo cuyos valores son precisos y viven en \mathbb{R} , se tienen series de símbolos que solo indican como se comporta la serie. Por ejemplo, para la serie de tiempo $\mathbf{Y}(t) = \cos(t)$, su respectiva serie de símbolos para $t \in [0, \pi]$ sería simplemente $\hat{\mathbf{Y}}(t) = \nabla, \nabla, \dots, \nabla, \nabla$, donde ∇ es el símbolo que indica decrecimiento. Eso significa que la serie de símbolos es una representación más ambigua que la serie de tiempo. Por tanto, es útil no desechar la serie de tiempo original, y la serie de símbolos solo debe emplearse para el cálculo de la $\mathcal{E}\mathcal{T}\mathcal{S}$.

En el apéndice G se muestran ejemplos de diccionarios $\hat{\mathbf{D}}$ para $m = 3$ y $m = 4$.

Habiendo definido la entropía de transferencia simbólica y descrita su función como indicador de causalidad dentro de los límites de la teoría de la información, solo falta un paso más para aplicarla a los modelos de conducción de calor y caracterizar su causalidad. Los modelos de conducción de calor, en particular los modelos de MCV y JGK, en su descripción incluyen los tiempos de retardo $\tau_q = \tau_C$ y $\tau_{\partial_x T} = \tau_D$, tal que se ha cambiado el subíndice por su respectiva etiqueta en la notación de variables causales. Estos tiempos en general, cumplen $\tau_C \geq \Delta t$ y $\tau_D \geq \Delta t$, con $\Delta t = t_{i+1} - t_i$ el tamaño de paso de la simulación. Para las series de tiempo, se ajustan los tiempo de retardo como

$$\tau_C = \nu_C \Delta t; \quad \tau_D = \nu_D \Delta t, \quad (4.15)$$

con $\nu_C, \nu_D \in \mathbb{Z}^+$. Estos ν_C y ν_D son el número de pasos de retardo asociados a sus respectivos tiempos de retardo.

Generalizando la entropía de transferencia simbólica, se tiene

$$\mathcal{E}\mathcal{T}\mathcal{S}_{\hat{\mathbf{X}} \rightarrow \hat{\mathbf{Y}}}(\nu) = \sum_i P(\hat{y}_{i+\nu}, \hat{y}_i, \hat{x}_i) \log_2 \frac{P(\hat{y}_{i+\nu} | \hat{y}_i, \hat{x}_i)}{P(\hat{y}_{i+\nu} | \hat{y}_i)}, \quad (4.16)$$

con $\nu \in \mathbb{Z}^+$.

Ahora $\mathcal{E}\mathcal{T}\mathcal{S}$ es una función de ν , por tanto, cuando $\nu = \nu_C, \nu_D$, la $\mathcal{E}\mathcal{T}\mathcal{S}$ debe devolver un valor que indique causalidad, mientras que para $\nu \neq \nu_C, \nu_D$ no. Es decir, al hacer un barrido sobre un conjunto de posibles valores para ν , que incluyan a ν_C y ν_D , se deben obtener curvas que serán características para cada modelo.

Dado que la $\mathcal{E}\mathcal{T}\mathcal{S}$ acepta cualquier par de series de símbolos, nada impide evaluarla con un par que no tengan relación causal. Esta evaluación permite calibrar la implementación computacional, lo que contribuye positivamente a la caracterización de variables causales.

Así, ya solo es necesario describir la metodología precisa para la caracterización de la causalidad en los modelos de conducción de calor. Sin embargo, primero hay que validar la implementación de $\mathcal{E}\mathcal{T}\mathcal{S}$ con sistemas más sencillos de los cuales se conozca su causalidad.

4.4 Validación metodológica: descripción experimental

Se proponen seis ejercicios de los cuales se conoce su causalidad dada por las definiciones 2, 3, y 5 para evaluar el desempeño de la entropía de transferencia simbólica. En estos seis experimentos

las series de tiempo \mathbf{X} y \mathbf{Y} toman valores x_i y y_i en $Z = [1, \dots, n]$, y su respectiva distribución está dada por el tipo de relación que tengan.

Dado el experimento, se tienen combinaciones de dos distribuciones de probabilidad: la primera, es una distribución uniforme

$$\mathbf{X}, \mathbf{Y} \sim \mathcal{U}(Z), \quad (4.17)$$

y la segunda, una distribución no-uniforme

$$\mathbf{X}, \mathbf{Y} \sim \mathcal{P}(\mathbf{p}_{t+l_{ij}}). \quad (4.18)$$

Aquí, l_{ij} representa el tiempo de retardo y los subíndices i y j indican el sentido de que variable influencia a la otra, por ejemplo, l_{xy} es el tiempo de retardo de la influencia de x sobre y . Así pues, el parámetro $\mathbf{p}_{t+l_{ij}}$ es un vector de n entradas cuyos valores son las probabilidades de que las variables tomen un valor en Z . Para construirlo, se tiene

$$\underline{\mathbf{P}} \cdot \mathbf{i}_t = \mathbf{p}_{t+l_{ij}}, \quad (4.19)$$

donde \mathbf{i}_t es una representación vectorial especial del valor que tome x_t o y_t , según sea el caso. En la Tabla 4.1 se muestra esta representación espacial.

Valor numérico	\mathbf{i}_t
1	$[1, 0, 0, \dots, 0, 0]$
2	$[0, 1, 0, \dots, 0, 0]$
3	$[0, 0, 1, \dots, 0, 0]$
\vdots	\vdots
$n - 1$	$[0, 0, 0, \dots, 1, 0]$
n	$[0, 0, 0, \dots, 0, 1]$

Figura 4.1: Representación vectorial especial de los valores en Z .

Por otro lado, $\underline{\mathbf{P}}$ es una matriz diagonal de $n \times n$ la cual es

$$\underline{\mathbf{P}} = \begin{bmatrix} p & q & \cdots & q \\ q & p & \cdots & q \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ q & q & \cdots & p \end{bmatrix}. \quad (4.20)$$

Aquí, $p \in [0, 1]$ y $q = \frac{1-p}{n-1}$.

En pocas palabras, $\mathcal{P}(\mathbf{p}_{t+l_{ij}})$ se puede entender como un dado “cargado” o no-justo para determinar el efecto j , que en cada instante de tiempo t selecciona que cara favorecer sobre las demás dependiendo la causa i .

Con las distribuciones de probabilidad descritas, los experimentos son los siguientes:

Experimento 0: X y Y son independientes causalmente

$$\mathbf{X} \leftrightarrow \mathbf{Y}. \quad (4.21)$$

Las series de tiempo \mathbf{X} y \mathbf{Y} son independientes y no tienen retroalimentación. Para este caso en particular, \mathbf{X} y \mathbf{Y} se determinan por la distribución uniforme.

Experimento 1: X y Y son simultáneos

$$\mathbf{X} \leftrightarrow \mathbf{Y} \quad (4.22)$$

La serie \mathbf{Y} se obtiene de

$$\mathbf{Y} = a\mathbf{X}, \quad (4.23)$$

donde $a \neq 0$ es una constante. No existe retroalimentación. El proceso \mathbf{X} se determina mediante la distribución uniforme.

Experimento 2: X es causa directa de Y

$$\mathbf{Y}_{t+l_{xy}} = a\mathbf{X}_t, \quad (4.24)$$

donde $a \neq 0$ es una constante y l_{xy} es el tiempo de retardo de \mathbf{X} a \mathbf{Y} . No existe retroalimentación. El proceso \mathbf{X} se determina mediante la distribución uniforme.

Experimento 3: X es causa de Y

$$\mathbf{X}_t \rightarrow \mathbf{Y}_{t+l_{xy}} \quad (4.25)$$

con l_{xy} es el tiempo de retardo de \mathbf{X} a \mathbf{Y} . No existe retroalimentación. El proceso \mathbf{X} se determina mediante la distribución uniforme mientras que \mathbf{Y} queda dado por la distribución no-uniforme.

Experimento 4: X es causa directa de Y y X se retroalimenta a sí mismo

$$\mathbf{Y}_{t+l_{xy}} = a\mathbf{X}_t, \quad \mathbf{X}_t \rightarrow \mathbf{X}_{t+l_{xx}}, \quad (4.26)$$

donde $a \neq 0$ es una constante, l_{xy} es el tiempo de retardo de \mathbf{X} a \mathbf{Y} , y l_{xx} es el tiempo de retardo para la retroalimentación de \mathbf{X} . El proceso \mathbf{X} se determina mediante la distribución no-uniforme.

Experimento 5: X es causa de Y y X se retroalimenta a sí mismo

$$\mathbf{X}_t \rightarrow \mathbf{Y}_{t+l_{xy}}, \quad \mathbf{X}_t \rightarrow \mathbf{X}_{t+l_{xx}}, \quad (4.27)$$

donde l_{xy} es el tiempo de retardo de \mathbf{X} a \mathbf{Y} , y l_{xx} es el tiempo de retardo para la retroalimentación de \mathbf{X} . Ambos procesos \mathbf{X} y \mathbf{Y} se determinan mediante la distribución no-uniforme.

Así, habiendo descrito los experimentos, se realizan a continuación.

4.5 Validación metodológica: evaluación experimental

El código se encuentra disponible en <https://github.com/tri-ntropy/causalidad-validacion>, mientras que todas gráficas se encuentran en la Sección 4.7.

Se realizan los experimentos mediante simulaciones implementadas en Python usando el generador de números aleatorios de Numpy. Para cada experimento se genera una muestra del ensamble $\{\mathbf{X}, \mathbf{Y}\}_R$ con $R = 144$ realizaciones, donde las series de tiempo están compuestas de 100001 valores. Para cada realización, primero se calcula la entropía de transferencia simbólica $\mathcal{ETS}(v)$ haciendo

un barrido de $\nu = 1, \dots, 100$ en ambos sentidos $\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{Y}$ y $\mathbf{Y} \rightarrow \mathbf{X}$ para posteriormente tomar su diferencia

$$\Delta\mathcal{ETS} = \mathcal{ETS}_{\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{Y}} - \mathcal{ETS}_{\mathbf{Y} \rightarrow \mathbf{X}} \quad (4.28)$$

Para cada pareja \mathbf{X}, \mathbf{Y} de la muestra, se obtiene una tres series $\mathcal{ETS}_{\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{Y}}$, $\mathcal{ETS}_{\mathbf{Y} \rightarrow \mathbf{X}}$, y $\Delta\mathcal{ETS}$ sobre ν . Con R series producidas por las variables aleatorias \mathbf{X} y \mathbf{Y} , son esperadas ciertas variaciones, por tanto, para cada valor de ν se toma el respectivo promedio sobre todas las realizaciones de la muestra. La serie promedio se empleará para caracterizar la causalidad de cada experimento.

Los resultados se describen a continuación.

Experimento 0: \mathbf{X} y \mathbf{Y} son independientes causalmente

En las Figuras 4.2 se tienen las gráficas del experimento 0. Al no estar relacionadas causalmente, los bits de la supuesta información transferida entre las variables son *espurios*, por lo tanto, no indican causalidad. Algo destacable de estos resultados, es que los bits medidos están en el orden de 10^{-3} , por tanto, estos resultados pueden emplearse para calibrar las mediciones de otros sistemas: si esas mediciones se ven ruidosas, y además, están en ese mismo orden de magnitud, es probable que sean espurias. Por otra parte, para el caso de 4.2a y 4.2b, las mediciones son siempre positivas, por tanto para 4.2c, la serie está aproximadamente centrada alrededor de 0 y los valores indican el sentido de la transmisión de información según su signo: los valores positivos para el sentido $\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{Y}$ y los negativos para $\mathbf{Y} \rightarrow \mathbf{X}$.

Experimento 1: \mathbf{X} y \mathbf{Y} son simultáneos

En las figuras 4.3 se tienen las gráficas del experimento 1. Las series 4.3a y 4.3b son iguales, esto como consecuencia de la simbolización: si la relación entre variables está dada por (4.23), se tiene una constante $a \neq 0$ que amplifica o reduce \mathbf{Y} , esta información se pierde al simbolizar las series \mathbf{X} y \mathbf{Y} , por tanto, se tiene

$$\hat{\mathbf{X}} = \hat{\mathbf{Y}}. \quad (4.29)$$

En consecuencia

$$\mathcal{ETS}_{\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{X}} = \mathcal{ETS}_{\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{Y}} = \mathcal{ETS}_{\mathbf{Y} \rightarrow \mathbf{X}} = \mathcal{ETS}_{\mathbf{Y} \rightarrow \mathbf{Y}}. \quad (4.30)$$

El resultado (4.30) explica entonces porque 4.3c es simplemente una horizontal en 0.

Finalmente, se debe ofrecer una interpretación a las series decrecientes 4.3a y 4.3b. Regresando a la expresión general para la entropía de transferencia simbólica (4.16), los símbolos representan el comportamiento de la series \mathbf{X} y \mathbf{Y} respecto al tiempo, por tanto al calcular la \mathcal{ETS} de una variable consigo misma, siguiendo la definición de causalidad 6, el pico indica que existe cierta causalidad de \mathbf{X}_t con los valores consecutivos. Dicho de otra manera, si se conoce \mathbf{X}_t , es posible predecir con cierta precisión algunos de los valores consecutivos. Así que este decrecimiento en particular, se le llamará *decrecimiento de predicción*.

Experimento 2: \mathbf{X} es causa directa de \mathbf{Y}

Se tienen los resultados del experimento 2 en las figuras 4.4. Para este caso en particular si se tiene causalidad y el tiempo de retardo o lag es $l_{xy} = 13\Delta t$. Con esto en consideración se analizan las figuras.

En la figura 4.4a se muestra la serie de la entropía de transferencia simbólica promedio en el sentido $\mathbf{X} \rightarrow \mathbf{Y}$. En esta se muestra un pico cuyo máximo se encuentra en $\nu = 14$, solo un paso de tiempo de diferencia con l_{xy} . Esta diferencia posiblemente se deba a la implementación de la entropía de transferencia simbólica. Dado que la relación de los valores entre las series de tiempo \mathbf{X} y \mathbf{Y} es uno a uno, al generar los símbolos se obtendrán tres contiguos donde se comparta un valor en particular, y no es hasta el cuarto valor que ya no se comparte, así, al calcular los valores de la entropía de transferencia simbólica, no es hasta que ocurre este desfase en una posición que

se evalúa adecuadamente. Esto queda sujeto a debate y necesita verificarse. Sin embargo, este “defecto” en particular es consistente en los experimentos, así que puede decirse que este error se encuentra calibrado.

Alrededor del máximo, el valor de la entropía de transferencia simbólica decrece pero no instantáneamente, por tanto, se establece que en estos puntos los valores de Y se pueden predecir con cierta precisión dado X , por lo cual, a este conjunto de puntos alrededor del máximo se le llama *pico de predicción*.

Por otra parte, en la figura 4.4b se tiene una serie similar a las obtenidas para el experimento 0, lo cual es esperado. El experimento describe una relación causal en el sentido $X \rightarrow Y$, pero no en $Y \rightarrow X$, por tanto la \mathcal{ETS} mide transmisiones espurias de información. Estas transmisiones espurias también están presentes en 4.4b fuera del pico de predicción, pero debido a la resolución de la gráfica no se alcanza a apreciar.

Por último, para la diferencia se tiene la figura 4.4c. El resultado es simplemente la Figura 4.4a trasladada un poco hacia abajo, conservando su pico de predicción. Sin embargo, como es la serie de la diferencia, la transmisión de la información se da en el sentido de $X \rightarrow Y$, por tanto, para el experimento queda caracterizada la causalidad como un solo pico de predicción cuyo máximo se encuentra en $\nu = l_{xy} + 1$.

Experimento 3: X es causa de Y

Se producen cualitativamente los resultados del experimento 2, pero con una sutil diferencia. Al comparar las gráficas de la Figura 4.5 con las de 4.4, se observa que tanto para el sentido $X \rightarrow Y$ como para la diferencia, el promedio de la entropía de transferencia simbólica es un orden de magnitud menor para el experimento 3 que en el experimento 2. Para el sentido $Y \rightarrow X$ se vuelve a obtener información transferida espuria

Experimento 4: X es causa directa de Y y X se retroalimenta a sí mismo

Para este experimento, el tiempo de retardo de la retroalimentación para X es $l_{xx} = 23\Delta t$. Los resultados se encuentran en la Figura 4.6.

La principal cualidad notable de estas gráficas es que ya no solamente llegan a producir un pico, una curva decreciente monótona o ruido, ahora se producen una serie de picos que decrecen y siempre tienen la misma separación. La separación entre máximo y máximo es de $\Delta\nu = 23$ pasos de tiempo, lo cual corresponde con los pasos del tiempo de retardo de la retroalimentación para X . En el sentido $X \rightarrow Y$, el primer pico alcanzó su máximo en $\nu = 14$, con lo cual se repite esa cualidad de los experimentos 2 y 3. Mientras tanto, en el sentido $Y \rightarrow X$ el primer pico alcanza su máximo en $\nu = 11$. Siguiendo el patrón de los anteriores casos, indicaría un tiempo de retardo ficticio $l_{yx} = 10\Delta t$, el cual coincide con la diferencia de los otros dos tiempos de retardo, es decir que $l_{xx} - l_{xy} = l_{yx}$.

Sin embargo, aunque la retroalimentación de X justifica la existencia de la serie de picos, no justifica porque el sentido $Y \rightarrow X$ los presenta en primer lugar. El experimento no indica ninguna relación en el sentido $Y \rightarrow X$, y dados los experimentos anteriores, se debería producir mediciones espurias. Probablemente se requiera diseñar otro experimento donde no exista retroalimentación para X pero si exista una relación $Y \rightarrow X$ con tiempo de retardo l_{yx} , de tal modo que se pueda mostrar cierta equivalencia entre ese nuevo experimento y este. Esta idea, aunque no esta mal, está fuera del objetivo de esta tesis, por lo cual se decide postergar para otra ocasión.

Finalmente, al tomar la diferencia entre sentidos, se obtienen dos series de picos, una positiva y otra negativa. Los picos positivos deben su existencia a las relaciones causales descritas por el sistema, mientras que los negativos, debido a lo explicado en el párrafo anterior, no.

En conclusión: la retroalimentación de la variable X tiene el efecto de producir series de picos para la entropía de transferencia simbólica, los cuales tienen un período fijo correspondiente con el tiempo de retardo de retroalimentación de X .

Experimento 5: X es causa de Y y X se retroalimenta a sí mismo

Similar a lo ocurrido en el experimento 3, se obtienen resultados cualitativamente similares a los del experimento anterior y, específicamente para el sentido $X \rightarrow Y$ y la diferencia se obtienen resultados que son un orden de magnitud a su similar en el experimento 4.

Palabras finales para la validación metodológica

Habiendo validado, descrito y calibrado el empleo de la ETS para la caracterización de la causalidad, es momento aplicar la metodología a los modelos conductores de calor, pero son necesarios unos comentarios finales. En general, nada impide diseñar más experimentos más complejos, donde se den efectos cruzados donde X sea causa de Y y viceversa, además de incluir retroalimentación total para ambas variables o parcial solo para una de ellas. Sin embargo, para este trabajo solo se limitó a estos tres experimentos debido a que sus relaciones causales son las más similares, sino es que exactamente, a las presentes en los modelos de conducción de calor en materiales.

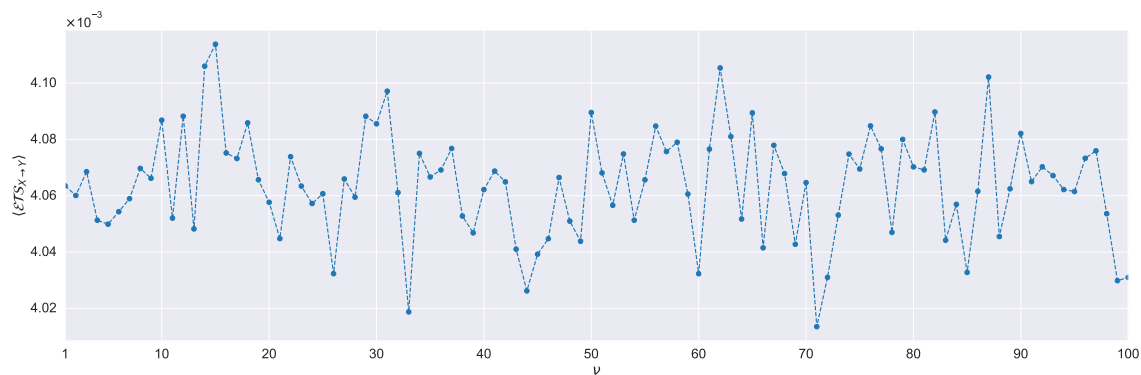
4.6 Aplicación de la metodología a los modelos de transporte de calor

Se presenta a continuación la aplicación metodológica a seguir para caracterizar las relaciones de causalidad presentes en los modelos de transporte de calor empleando la entropía de transferencia simbólica.

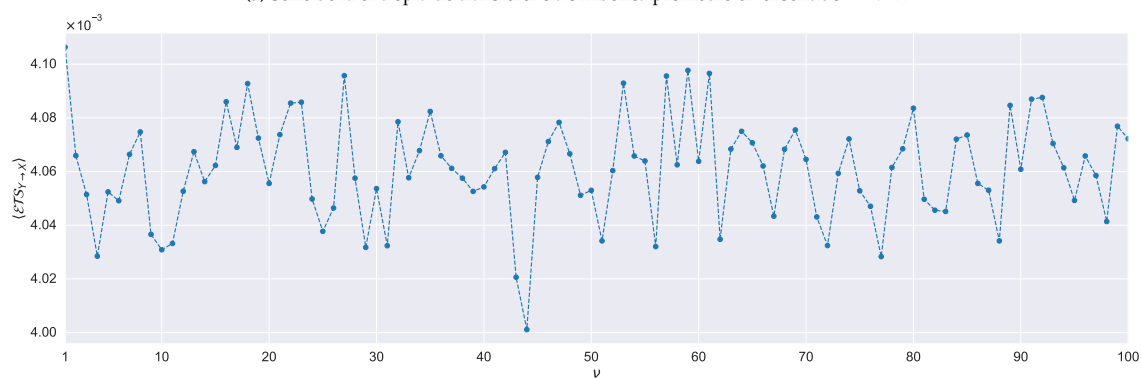
1. Se genera la muestra de realizaciones de la frontera de la temperatura ((3.16), (3.14)) empleando el generador de números aleatorios de Numpy (ver Apéndice F). Las realizaciones de la frontera se caracterizan como ruido blanco Gaussiano.
2. Para cada una de las realizaciones de la frontera de la temperatura, se realizan las simulaciones estocásticas y deterministas para cada modelo implementando los algoritmos 3.1, 3.2, y 3.3. Para las simulaciones deterministas, la frontera de la temperatura está dada por el valor promedio constante de la respectiva realización de la frontera estocástica dada por (3.14).
3. De las simulaciones, para un punto de interés x_p se capturan las series de tiempo para las cinco variables causales dadas por 3.4, tanto estocásticas y deterministas.
4. Para cada realización de cada variable causal, se toma la diferencia entre la serie de tiempo estocástica y determinista para obtener la serie de tiempo de la fluctuación.
5. Obtenidas las series de tiempo de las fluctuaciones para cada variable causal, se procede a simbolizarlas, usando diccionarios con $m = 3$.
6. Se calcula la entropía de transferencia simbólica para las parejas de fluctuaciones $\{\mathbf{A}, \mathbf{B}\}$, $\{\mathbf{C}, \mathbf{D}\}$, y $\{\mathbf{C}, \mathbf{E}\}$ de todas las realizaciones para cada modelo.
7. Se obtiene el promedio sobre todas las realizaciones de la entropía de transferencia simbólica para cada valor de paso en el tiempo ν para cada pareja de variables de cada modelo.
8. Se analizan los resultados y se caracteriza la causalidad

Aplicando esta metodología a los modelos de transporte de calor, los resultados principales de este trabajo se encuentran en el siguiente capítulo.

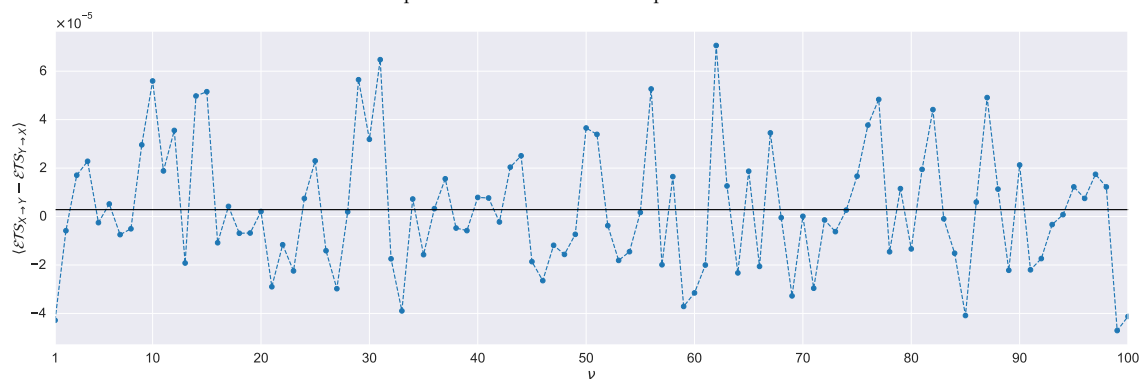
4.7 Gráficas de resultados de la validación metodológica



(a) Serie de la entropía de transferencia simbólica promedio en el sentido $X \rightarrow Y$.

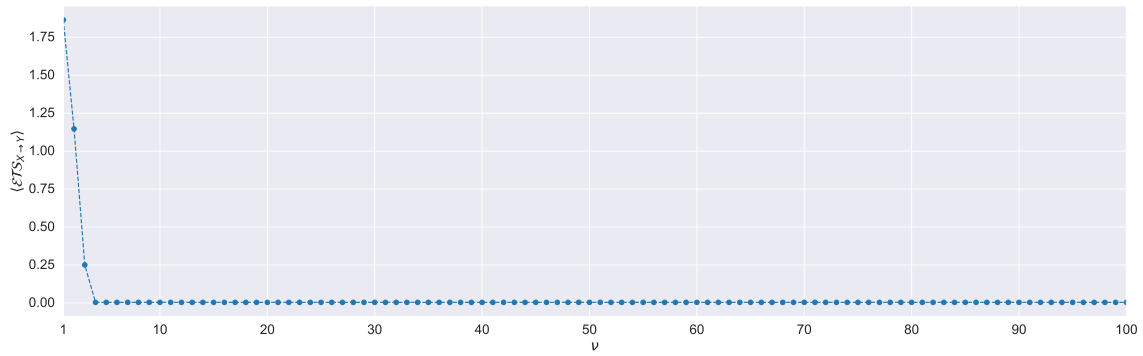
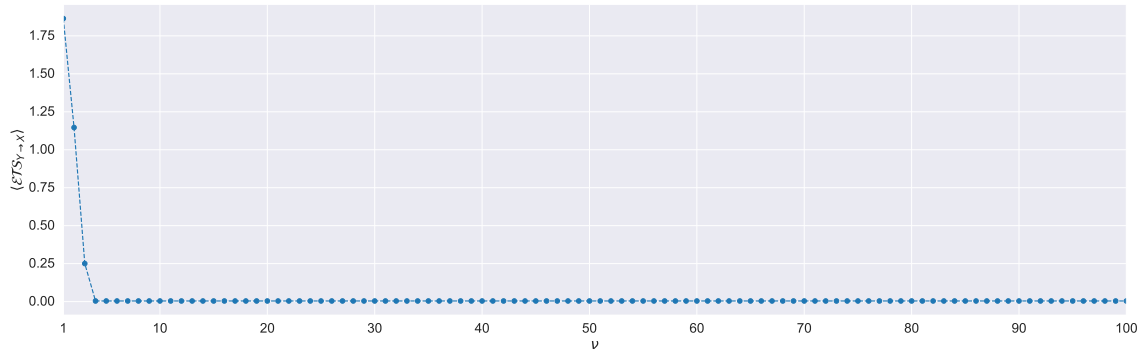
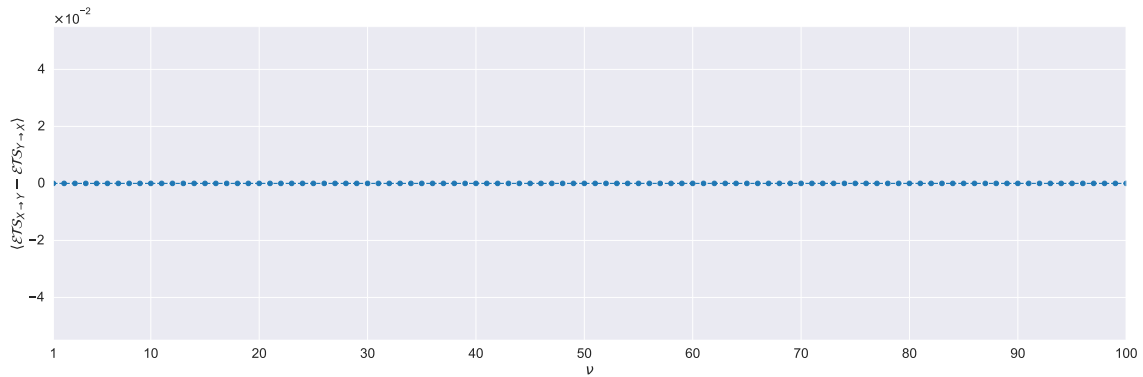


(b) Serie de la entropía de transferencia simbólica promedio en el sentido $Y \rightarrow X$.



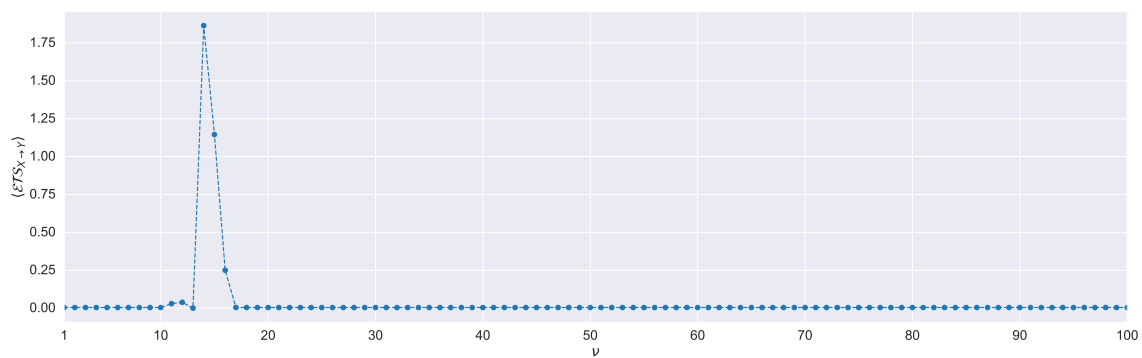
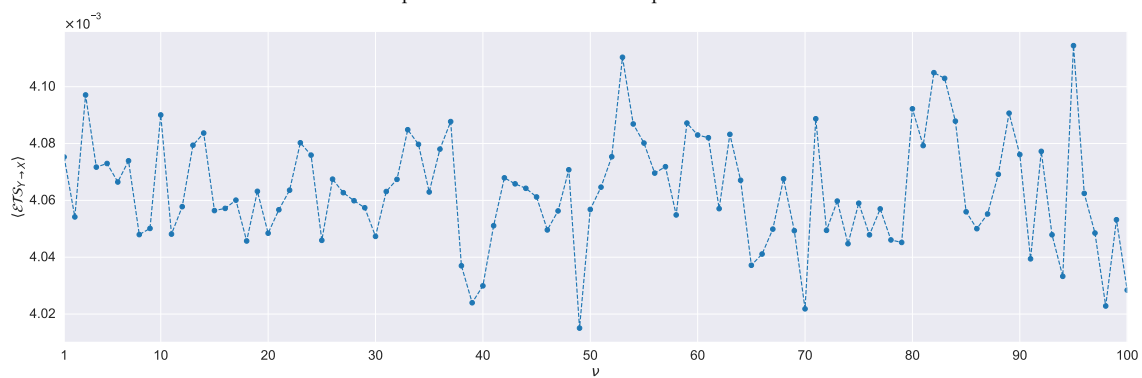
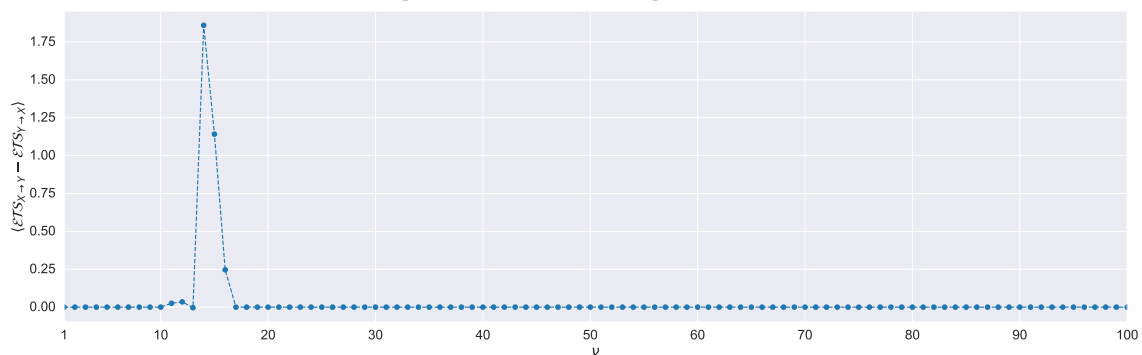
(c) Serie de la diferencia de la entropía de transferencia simbólica promedio.

Figura 4.2: Experimento 0: X y Y son independientes causalmente. Los puntos son los valores promedio de la entropía de transferencia simbólica para cada paso ν . Las unidades son bits.

(a) Serie de la entropía de transferencia simbólica promedio en el sentido $X \rightarrow Y$.(b) Serie de la entropía de transferencia simbólica promedio en el sentido $Y \rightarrow X$.

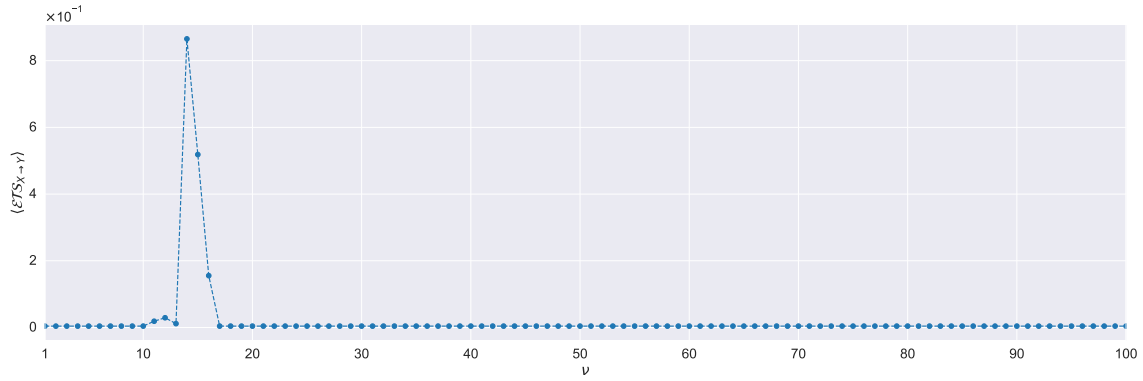
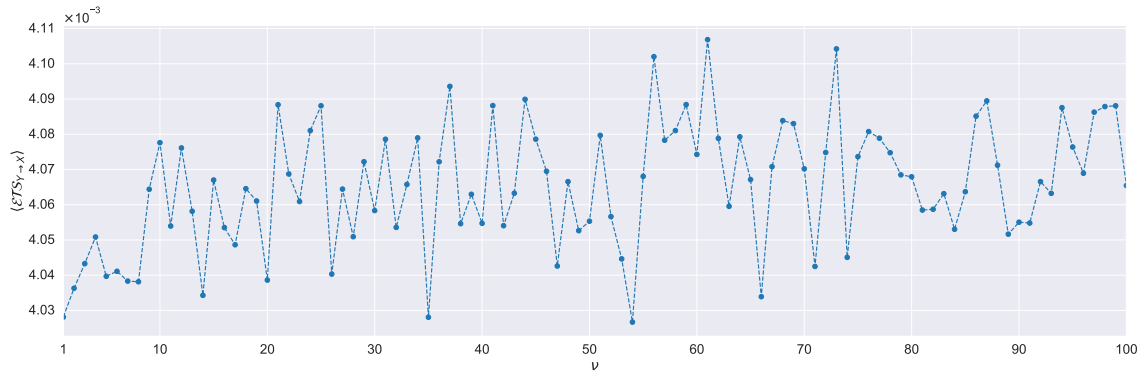
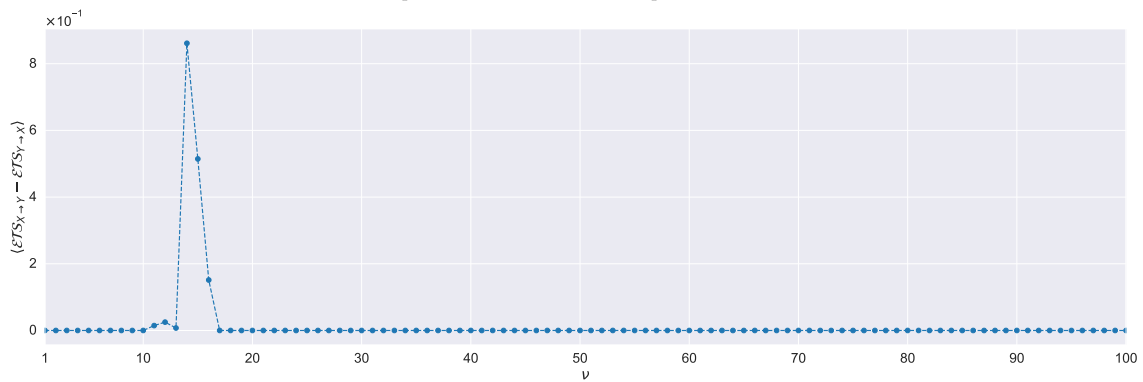
(c) Serie de la diferencia de la entropía de transferencia simbólica promedio.

Figura 4.3: Experimento 1: X y Y son simultáneos. Los puntos son los valores promedio de la entropía de transferencia simbólica para cada paso ν . Las unidades son bits.

(a) Serie de la entropía de transferencia simbólica promedio en el sentido $X \rightarrow Y$.(b) Serie de la entropía de transferencia simbólica promedio en el sentido $Y \rightarrow X$.

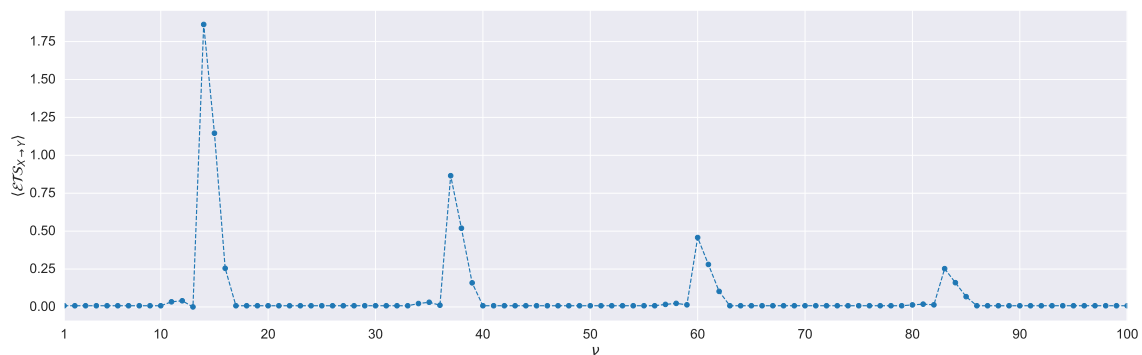
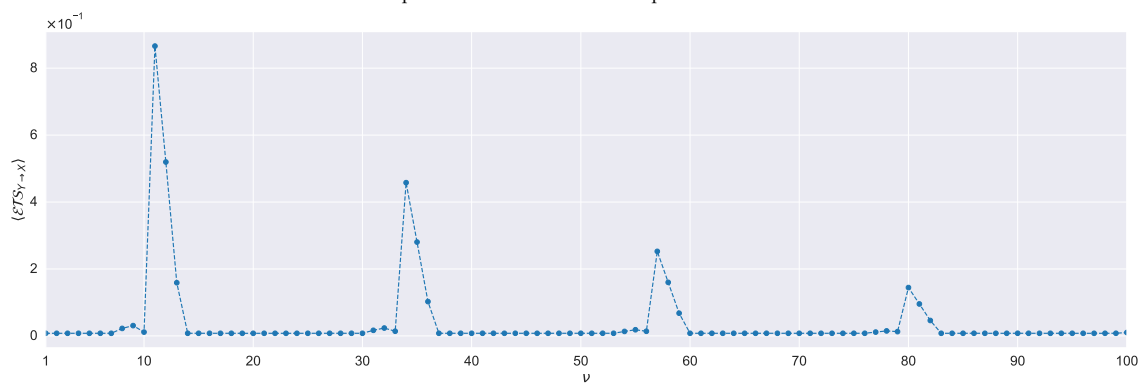
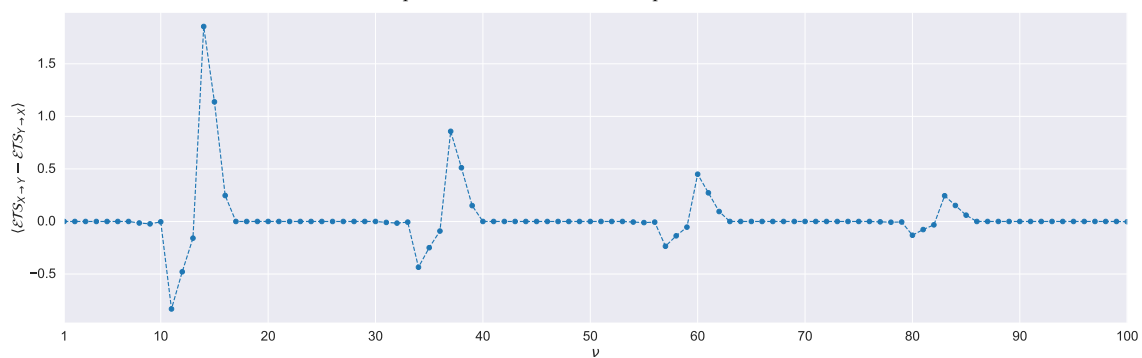
(c) Serie de la diferencia de la entropía de transferencia simbólica promedio

Figura 4.4: Experimento 2: X es causa directa de Y . Los puntos son los valores promedio de la entropía de transferencia simbólica para cada paso ν . Las unidades son bits.

(a) Serie de la entropía de transferencia simbólica promedio en el sentido $X \rightarrow Y$.(b) Serie de la entropía de transferencia simbólica promedio en el sentido $Y \rightarrow X$.

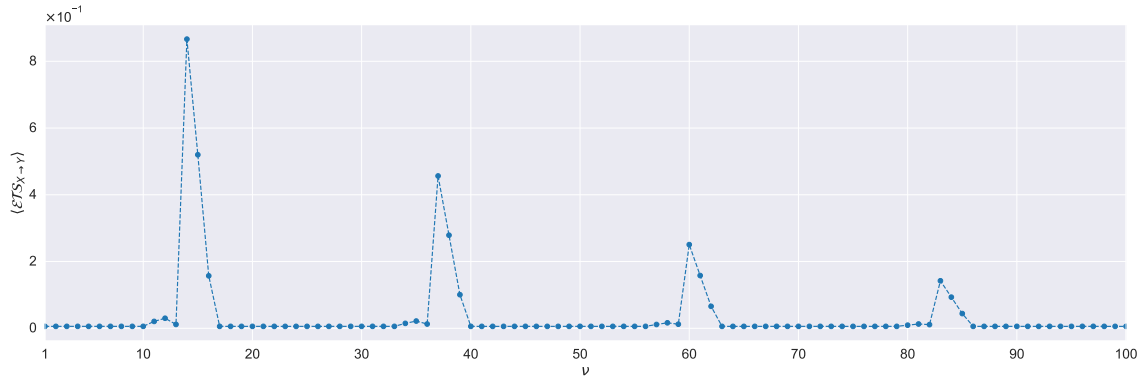
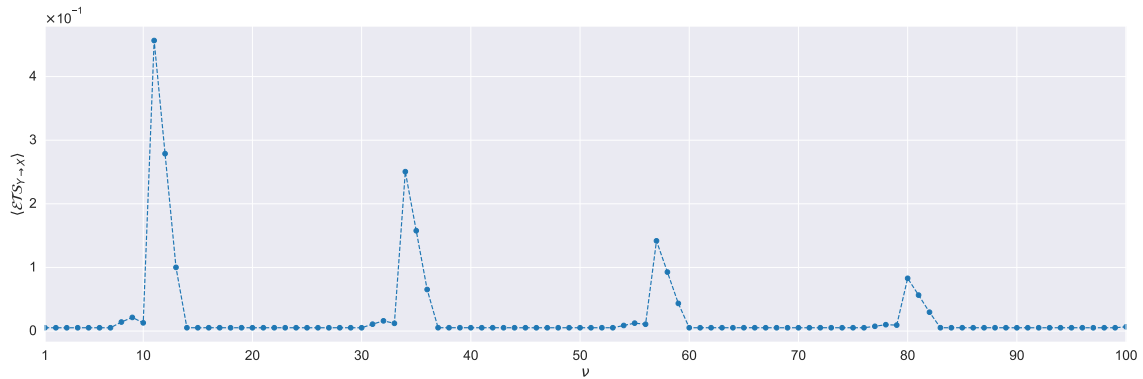
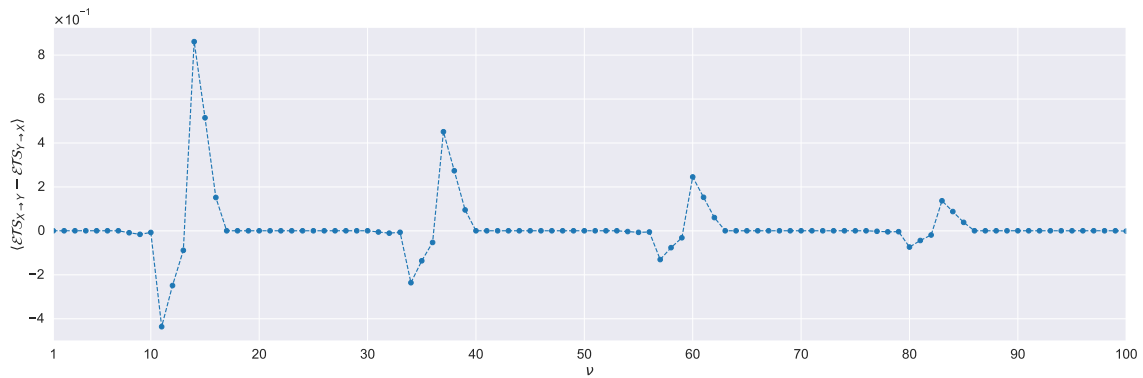
(c) Serie de la diferencia de la entropía de transferencia simbólica promedio

Figura 4.5: Experimento 3: X es causa de Y . Los puntos son los valores promedio de la entropía de transferencia simbólica para cada paso ν . Las unidades son bits.

(a) Serie de la entropía de transferencia simbólica promedio en el sentido $X \rightarrow Y$.(b) Serie de la entropía de transferencia simbólica promedio en el sentido $Y \rightarrow X$.

(c) Serie de la diferencia de la entropía de transferencia simbólica promedio.

Figura 4.6: Experimento 4: X es causa directa de Y y X se retroalimenta a si mismo. Los puntos son los valores promedio de la entropía de transferencia simbólica para cada paso ν . Las unidades son bits.

(a) Serie de la entropía de transferencia simbólica promedio en el sentido $X \rightarrow Y$.(b) Serie de la entropía de transferencia simbólica promedio en el sentido $Y \rightarrow X$.

(c) Serie de la diferencia de la entropía de transferencia simbólica promedio.

Figura 4.7: Experimento 5: X es causa de Y y X se retroalimenta a si mismo. Los puntos son los valores promedio de la entropía de transferencia simbólica para cada paso ν . Las unidades son bits.

CAPÍTULO 5

Resultados

Antes de empezar, se deben recordar varios detalles.

Se tienen las variables causales

$$\mathbf{A} = \frac{\partial T}{\partial t}; \quad \mathbf{B} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}; \quad \mathbf{C} = q; \quad \mathbf{D} = \frac{\partial T}{\partial x}; \quad \mathbf{E} = T. \quad (5.1)$$

Estas variables causales tienen relaciones dadas por los modelos de transporte de calor y estas son:

Fourier Solo se presenta simultaneidad debido a la carencia de precedencia entre variables

$$\mathbf{A}_i \leftrightarrow \mathbf{B}_i; \quad \mathbf{C}_i \leftrightarrow \mathbf{D}_i. \quad (5.2)$$

MCV Se da una causalidad con el tiempo de retardo es τ_q . Si $\tau_q = m\Delta t$, con m un entero positivo, entonces

$$\mathbf{B}_i \rightarrow \mathbf{A}_{i+m}; \quad \mathbf{D}_i \rightarrow \mathbf{C}_{i+m}. \quad (5.3)$$

JGK Presenta causalidad con dos tiempos de retardo τ_q y β . Si $\tau_q = m_q\Delta t$, y $\beta = m_\beta\Delta t$, con ambos m_q y m_β enteros positivos y además, $m_\beta < m_q$, se tiene

$$\mathbf{B}_{i+m_\beta} \rightarrow \mathbf{A}_{i+m_q}; \quad \mathbf{D}_{i+m_\beta} \rightarrow \mathbf{C}_{i+m_q}. \quad (5.4)$$

La variable \mathbf{E} como tal, no forma parte de ninguna relación causal o de acoplamiento debido a que su aparición en los modelos se presenta mediante la aplicación de operadores de derivada, en particular, el gradiente y el laplaciano. Sin embargo, nada impide obtener sus series de tiempo de las simulaciones como se vio en la calibración numérica del Capítulo 3. El propósito de incluir en el análisis a la variable \mathbf{E} mediante el emparejamiento con \mathbf{C} , es mostrar los resultados no triviales que están fuera de la descripción causal propuesta.

Para cada modelo, Fourier, MCV y JGK se analizan las parejas $\{\mathbf{A}, \mathbf{B}\}$, $\{\mathbf{C}, \mathbf{D}\}$, y $\{\mathbf{C}, \mathbf{E}\}$. Para cada modelo se estudian ciertos casos en particular, estos son:

Fourier Dos casos dependiendo el tamaño de la serie de tiempo:

Caso 1 Series de tiempo con 50001 valores.

Caso 2 Series de tiempo con 100001 valores.

MCV y JGK Cuatro casos dependiendo las series de tiempo y los respectivos tiempos de retardo:

Caso 1a Series de tiempo con 50001 valores. Para MCV un tiempo de retardo de $\tau_C = 10\Delta t$.
Para JGK, $\tau_D = 5\Delta t$ y $\tau_C = 15\Delta t$.

Caso 1b Series de tiempo con 50001 valores. Para MCV un tiempo de retardo de $\tau_C = 15\Delta t$.
Para JGK, $\tau_D = 5\Delta t$ y $\tau_C = 20\Delta t$.

Caso 2a Series de tiempo con 100001 valores. Para MCV un tiempo de retardo de $\tau_C = 10\Delta t$.
Para JGK, $\tau_D = 5\Delta t$ y $\tau_C = 15\Delta t$.

Caso 2b Series de tiempo con 100001 valores. Para MCV un tiempo de retardo de $\tau_C = 15\Delta t$.
Para JGK, $\tau_D = 5\Delta t$ y $\tau_C = 20\Delta t$.

Las gráficas de los resultados se muestran en a Sección 5.2.

5.1 Discusión

Pareja $\{C, E\}$ para los tres modelos de transferencia de calor

Al observar las gráficas de las Figuras 5.3, 5.6, y 5.9, no se obtienen resultados consistentes entre sí. Para los modelos de Fourier y JGK se producen curvas que crecen y decrecen sin un patrón aparente, mientras que para MCV, siguiendo el orden de los casos $2a \rightarrow 2b \rightarrow 1a \rightarrow 1b$, se muestra como se forma un pico de predicción que va alcanzando su máximo en $\nu = 10, 8, 7$ siguiendo el mismo orden para el sentido $C \rightarrow E$. Siguiendo esta misma idea, para MCV en el sentido $E \rightarrow C$, estas curvas parecen haberse recorrido a la izquierda. Al tomar la diferencia, siguiendo el mismo orden establecido, la entropía de transferencia simbólica promedio parece oscilar respecto a la horizontal en 0.

Estos resultados no tienen interpretación basada en la definición de causalidad o de acoplamiento 2, 1, respectivamente. Sin embargo, tampoco parecen ser transferencias de información espurias como si fueran dos series de tiempo que no tienen relación entre sí, por tanto se motiva a preguntar el porque de estos resultados. Una hipótesis surge de voltear a ver los algoritmos de simulación numérica 3.1, 3.2, y 3.3. En estos algoritmos, existe retroalimentación de las variables C y/o E debido a la aplicación de los algoritmos de **Euler** (\cdot, \cdot, \cdot) y **RK4** (\cdot, \cdot, \cdot) , además de ciertas contribuciones al cálculo de otros factores, por tanto, esto ofrece una potencial explicación al porque no se producen transferencias de información que puedan considerarse espurias.

Modelo de Fourier, parejas $\{A, B\}$ y $\{C, D\}$

Observando las Figuras 5.1 y 5.2, se obtienen resultados muy similares entre sí y son el análogo con el experimento 1 (4.22) de la validación: al no existir en el modelo algún tiempo de retardo, las parejas $\{A, B\}$ y $\{C, D\}$ tienen una relación de simultaneidad y, por tanto, producen decrecimientos de predicción. Al tomar las respectivas diferencias, simplemente se producen horizontales en 0, lo cual denota que no existe una dirección de preferencia en la transferencia de información entre las variables. Por tanto, se concluye que el modelo de Fourier es el equivalente al experimento 1 de validación.

Finalmente, se debe notar las diferencias numéricas entre el Caso 1 y Caso 2 del modelo de Fourier. Las curvas para estos casos se encuentran en el mismo orden de magnitud, pero los valores en el que las series inician son distintos. El Caso 1 en general inicia con aproximadamente el doble de bits transferidos que el Caso 2. Sin embargo, al recorrer las series, se muestra que el Caso 1 en general decrece más rápido que el Caso 2. Esto puede deberse a que el tamaño de paso en el tiempo del Caso 2 es más pequeño que el del Caso 1.

Modelo de MCV, parejas $\{A, B\}$ y $\{C, D\}$

Para las parejas $\{A, B\}$ y $\{C, D\}$, se obtienen las Figuras 5.4 y 5.5.

En el sentido $A \rightarrow B$ y $C \rightarrow D$ respectivamente, muestra un decrecimiento de predicción al inicio para luego tener oscilaciones. En este sentido, no se puede argumentar alguna relación causal debido a como están descritas las ecuaciones diferenciales y el tiempo de retardo del modelo. Sin embargo, la curva, es muy similar a lo visto en los experimentos de validación con retroalimentación pero atenuado, esto podría intuir que existe algún tipo de retroalimentación en el modelo pero esto no es apreciable en las ecuaciones (3.4) y (3.5), ¿De donde viene esta curva? La posible respuesta se encuentra en el algoritmo de simulación numérica. Al revisar el algoritmo 3.2, la aplicación de los métodos de **Euler** (\cdot, \cdot, \cdot) y **RK4** (\cdot, \cdot, \cdot) requieren del valor pasado inmediato de las variables para el cálculo del valor presente en el tiempo, por tanto eso justifica la aparición del decrecimiento y las oscilaciones. El porque solo oscila una o dos veces es debido a que se atenúa mucho más rápido que en los experimentos de validación, probablemente debido a los valores pequeños que adopta el tiempo de retardo en el cálculo.

En los sentidos $\mathbf{B} \rightarrow \mathbf{A}$ y $\mathbf{D} \rightarrow \mathbf{C}$ se producen picos de predicción acompañados de una posterior oscilación. En este sentido se justifica una causalidad dado el modelo de ecuaciones diferenciales y la oscilación, siguiendo la misma hipótesis, aparece debido al algoritmo de simulación numérica.

Finalmente, al tomar la diferencia, se muestra el pico negativo correspondiente a los sentidos $\mathbf{B} \rightarrow \mathbf{A}$ y $\mathbf{D} \rightarrow \mathbf{C}$ y oscilaciones posteriores. Esta curva puede separarse por secciones de tal modo que se ofrece una interpretación de lo que ocurre: al inicio, la diferencia es positiva y decrece, hasta el cruce con 0, se puede argumentar que este es simplemente un decrecimiento de predicción a tiempos cortos $\nu\Delta t$, mientras que el pico negativo representa la causalidad del modelo. La oscilación es una consecuencia del algoritmo numérico para finalmente, relajarse a 0 donde la predicción de una variable respecto a la otra es nula.

Otro detalle a notar en cada una de las gráficas es que los Casos “b” alcanzan su máximo y mínimo posteriormente a los respectivos Casos “a”, lo cual se debe a que para Casos “b” se impuso el tiempo de retardo mayor a los de los Casos “a”. Sin embargo, al observar detenidamente estos máximos no tienen un compartimiento que sea similar a los experimentos de validación: respectivamente, el máximo debería alcanzarse en $\nu = 11$ y $\nu = 16$, sin embargo, para ambos casos el máximo esta unos cuantas unidades a la izquierda.

Modelo de JGK, parejas $\{\mathbf{A}, \mathbf{B}\}$ y $\{\mathbf{C}, \mathbf{D}\}$

Para el modelo de JGK se debe recordar algo importante sobre los tiempos de retardo: los tiempos tienen un orden que es $\tau_D < \tau_C$, por tanto, se puede aplicar la transformación (2.8), con lo cual el modelo quedaría reducido a MCV. Con esto en cuenta, los resultados esperados deberían ser cualitativamente a los del modelo anterior. Sin embargo, hay ciertas diferencias que hay tomar en cuenta. Es importante también recordar que el método para obtener estos resultados emplean el algoritmo 3.3, por lo que numéricamente la simulación es distinta al modelo de MCV. Las gráficas se muestran en las Figuras 5.7 y 5.8.

En los sentidos $\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{B}$ y $\mathbf{C} \rightarrow \mathbf{D}$ simplemente se tienen decrecimientos de predicción, no ocurren oscilaciones que realmente sean apreciables. Esta es la diferencia principal con el modelo de MCV, la aparente “desaparición” de las oscilaciones que probablemente son atenuadas con un forzamiento mayor.

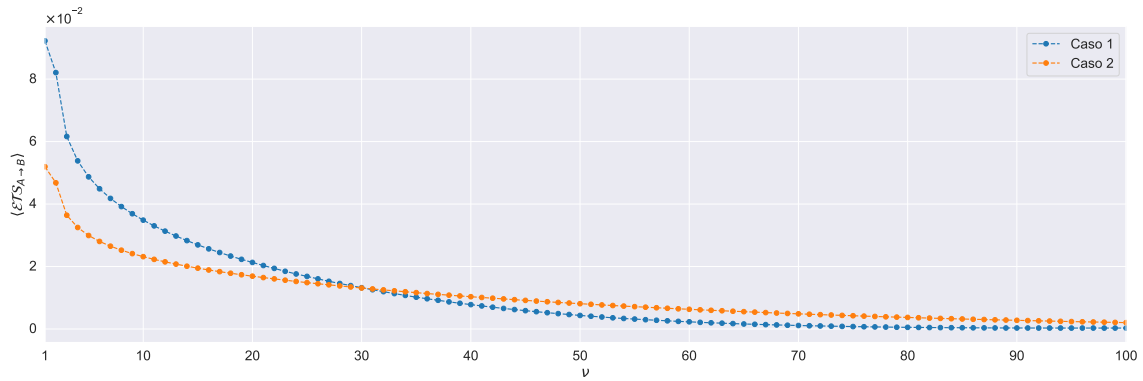
Por otro lado, para los sentidos $\mathbf{B} \rightarrow \mathbf{A}$ y $\mathbf{D} \rightarrow \mathbf{C}$ se producen picos de predicción pero que decrecen más lentamente comparado con MCV. Tampoco se aprecian oscilaciones.

Finalmente, para la diferencia, se obtiene una gráfica similar a MCV pero con dos diferencias principales: la ausencia de oscilaciones y la curva tarda más en relajarse a 0.

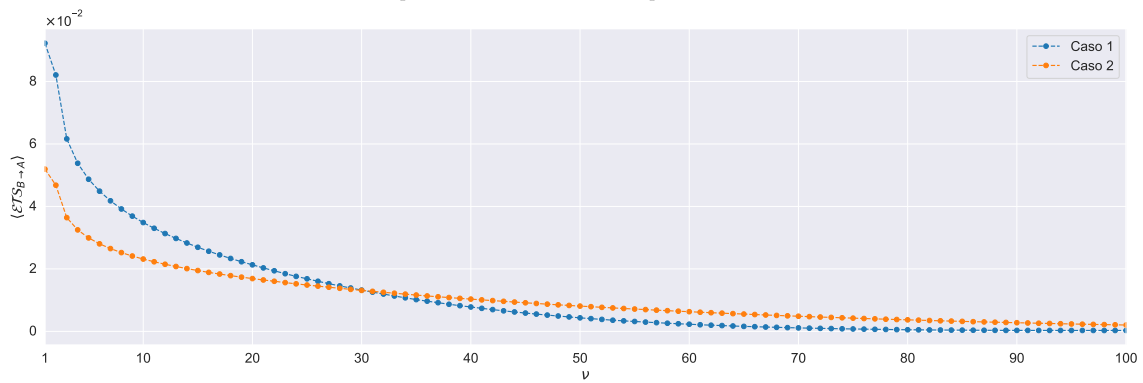
El porqué de esta relajación lenta no es clara, pero seguramente tiene que ver con la implementación del algoritmo 3.3 que incluye expresiones más complejas debido a la existencia del tiempo de retardo τ_D .

Del mismo modo, se obtiene el mismo comportamiento de los Casos “b” respecto a los “a”, como se observó para MCV.

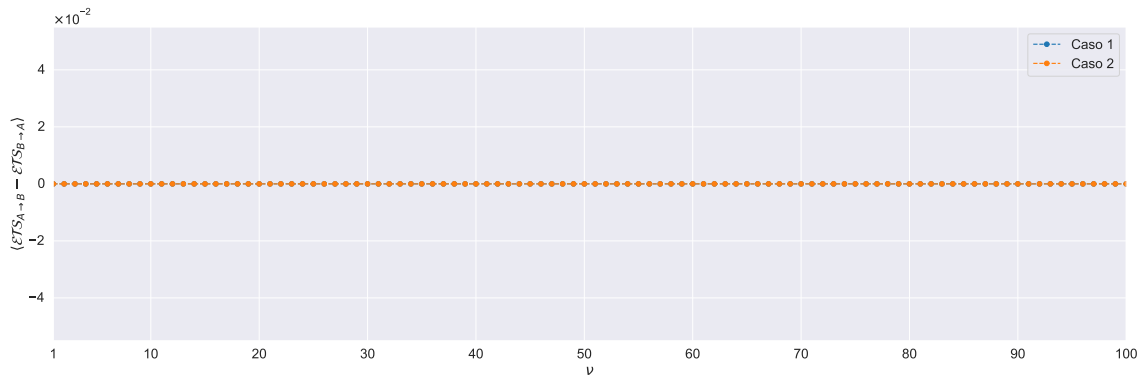
5.2 Gráficas



(a) Serie de la entropía de transferencia simbólica promedio en el sentido $A \rightarrow B$.

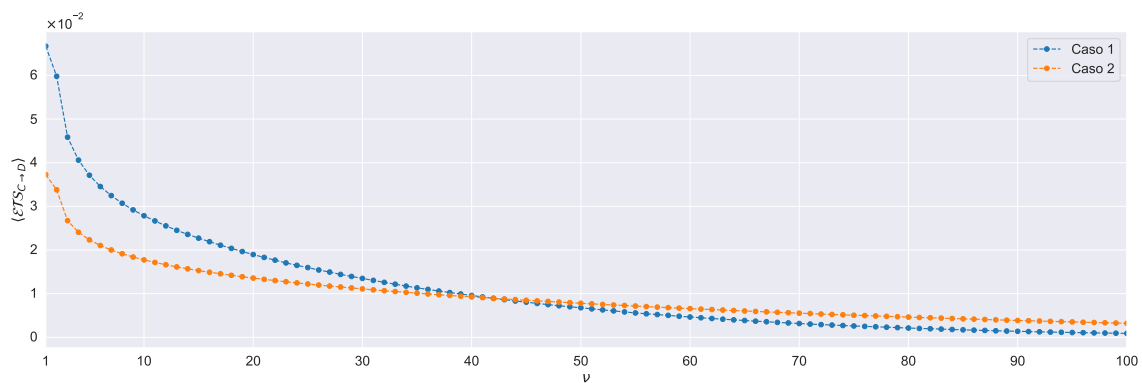
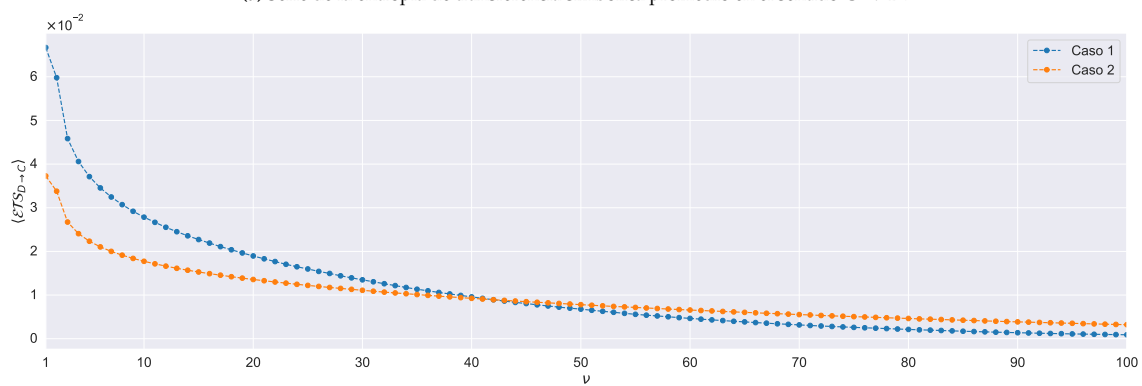
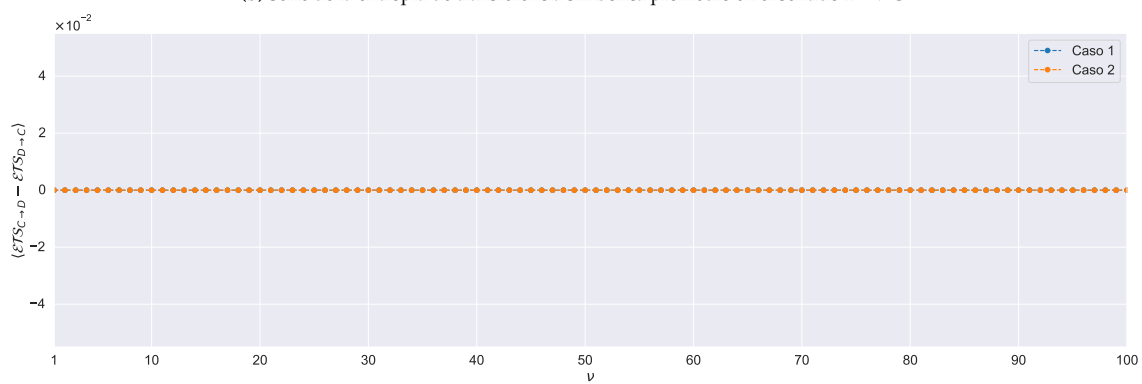


(b) Serie de la entropía de transferencia simbólica promedio en el sentido $B \rightarrow A$.



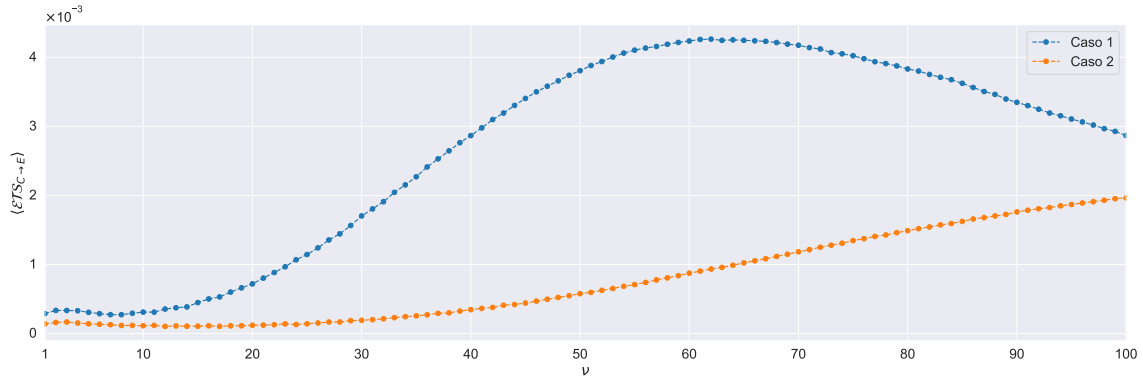
(c) Serie de la diferencia de la entropía de transferencia simbólica promedio.

Figura 5.1: Series de entropía de transferencia simbólica para la pareja $\{A, B\}$ del modelo de Fourier. Los puntos son los valores que toma el respectivo promedio. Las unidades son bits.

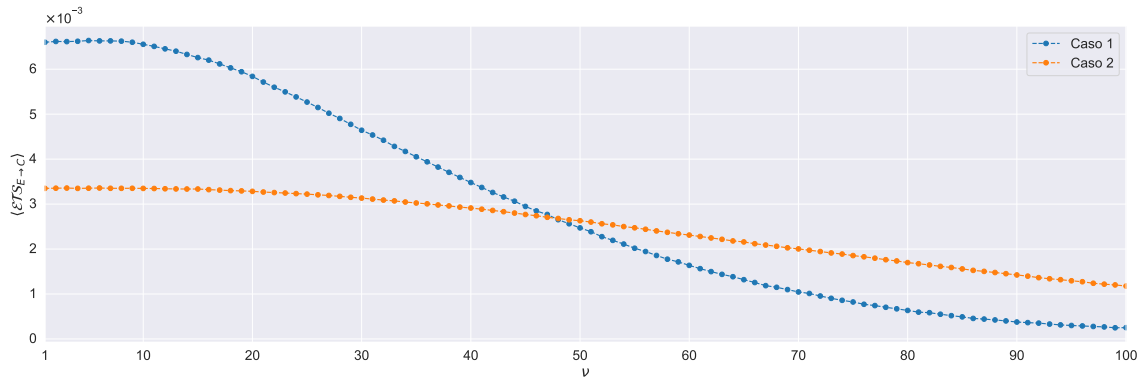
(a) Serie de la entropía de transferencia simbólica promedio en el sentido $C \rightarrow D$.(b) Serie de la entropía de transferencia simbólica promedio en el sentido $D \rightarrow C$.

(c) Serie de la diferencia de la entropía de transferencia simbólica promedio.

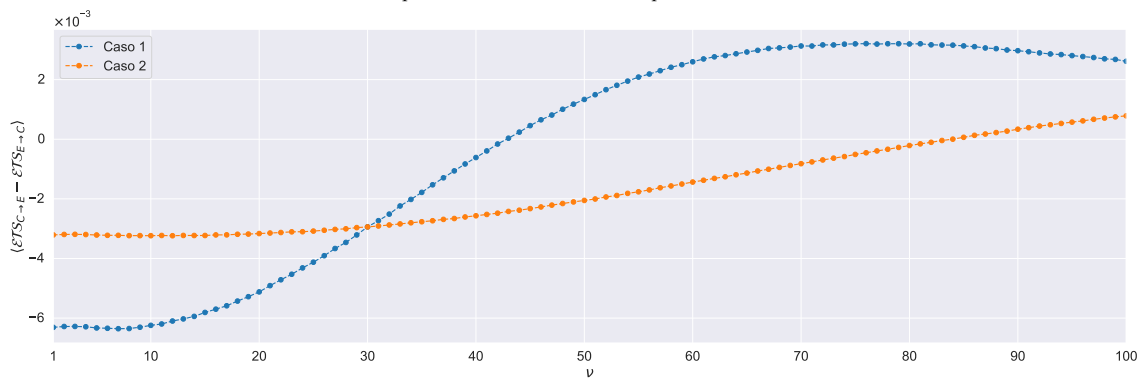
Figura 5.2: Series de entropía de transferencia simbólica para la pareja $\{C, D\}$ del modelo de Fourier. Los puntos son los valores que toma el respectivo promedio. Las unidades son bits.



(a) Serie de la entropía de transferencia simbólica promedio en el sentido C → E.

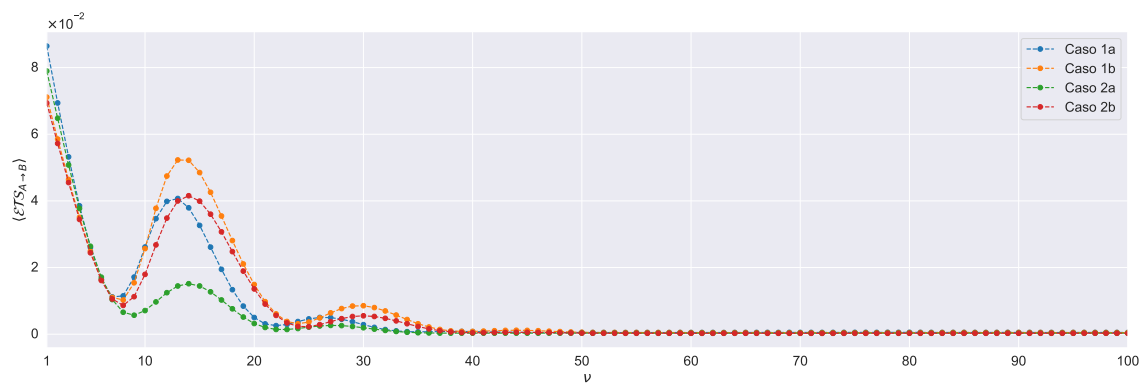
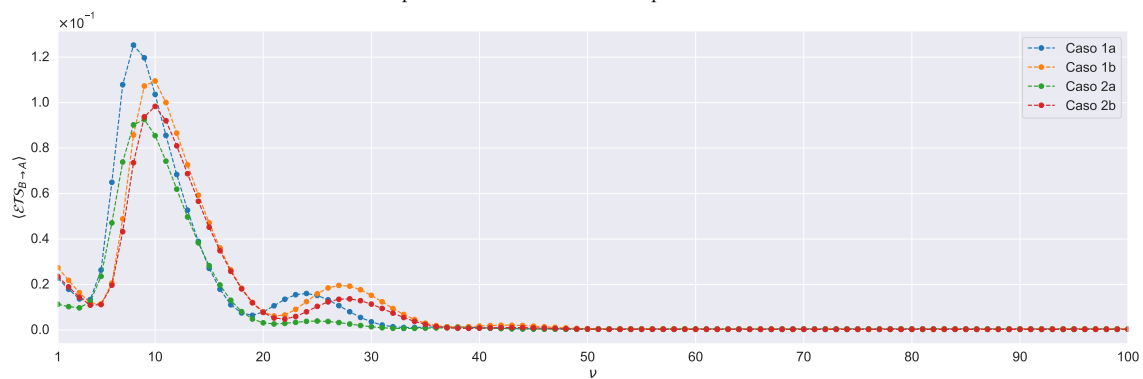
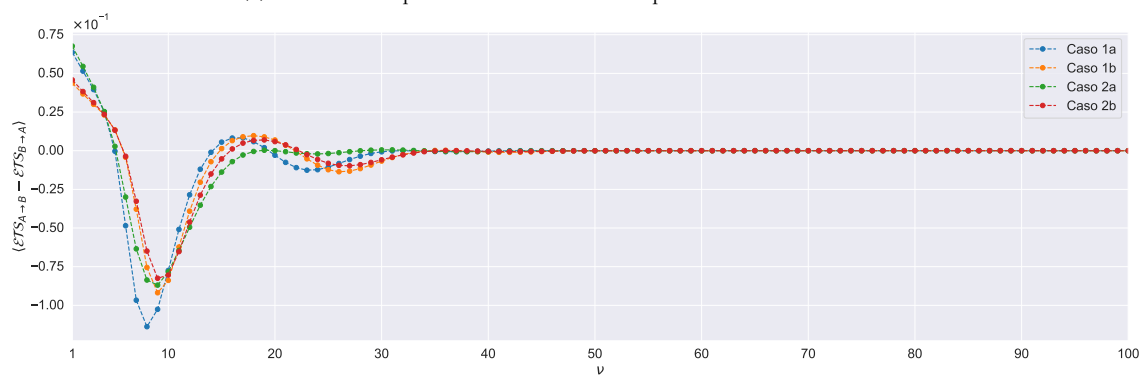


(b) Serie de la entropía de transferencia simbólica promedio en el sentido E → C.



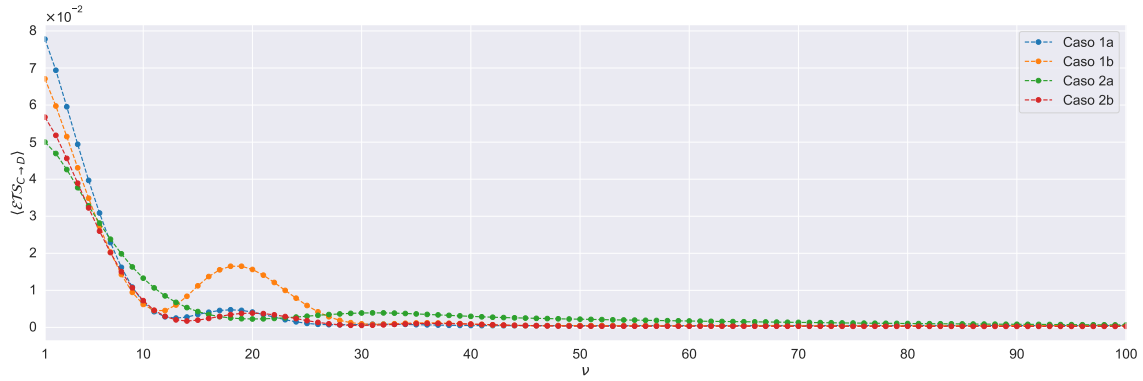
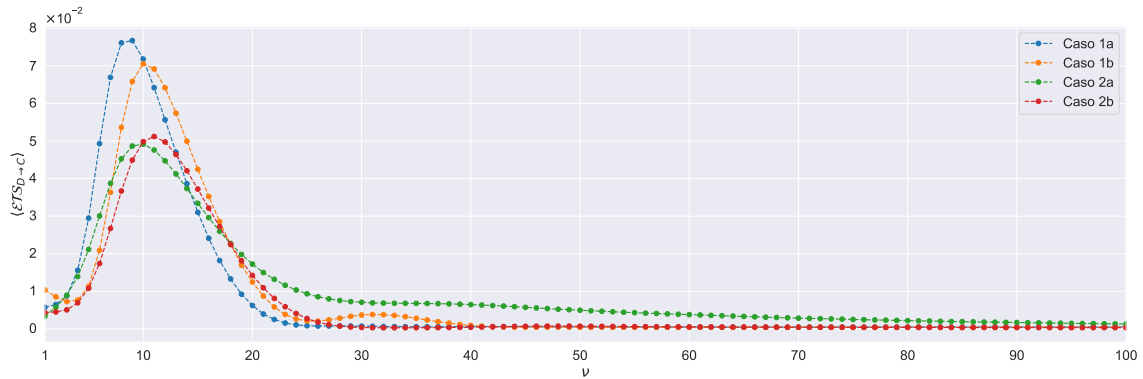
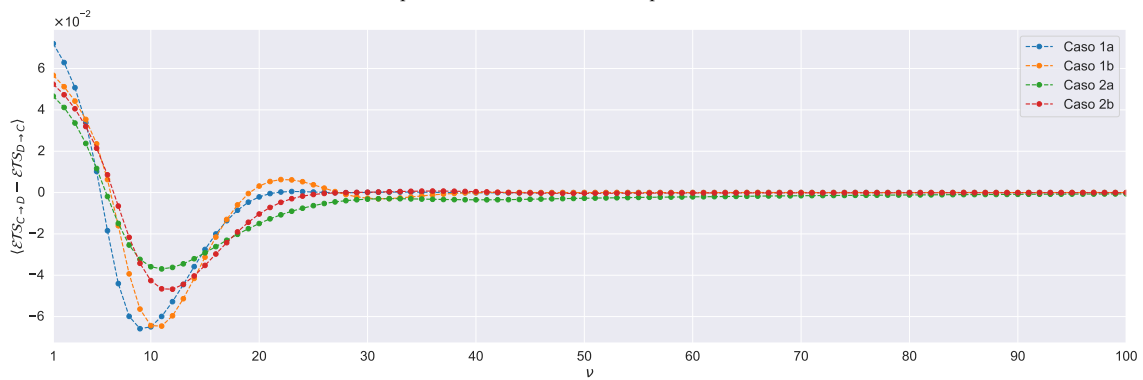
(c) Serie de la diferencia de la entropía de transferencia simbólica promedio.

Figura 5.3: Series de entropía de transferencia simbólica para la pareja $\{C, E\}$ del modelo de Fourier. Los puntos son los valores que toma el respectivo promedio. $\mu + \varepsilon$. Las unidades son bits.

(a) Serie de la entropía de transferencia simbólica promedio en el sentido **A** → **B**.(b) Serie de la entropía de transferencia simbólica promedio en el sentido **B** → **A**.

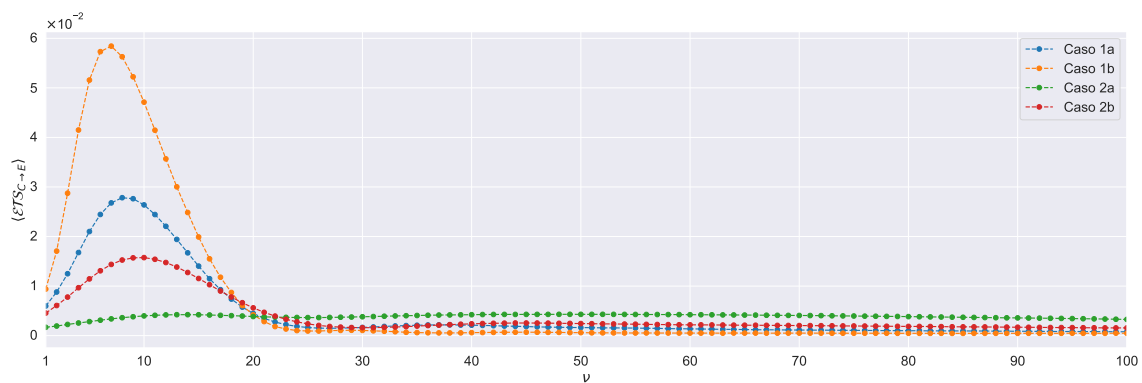
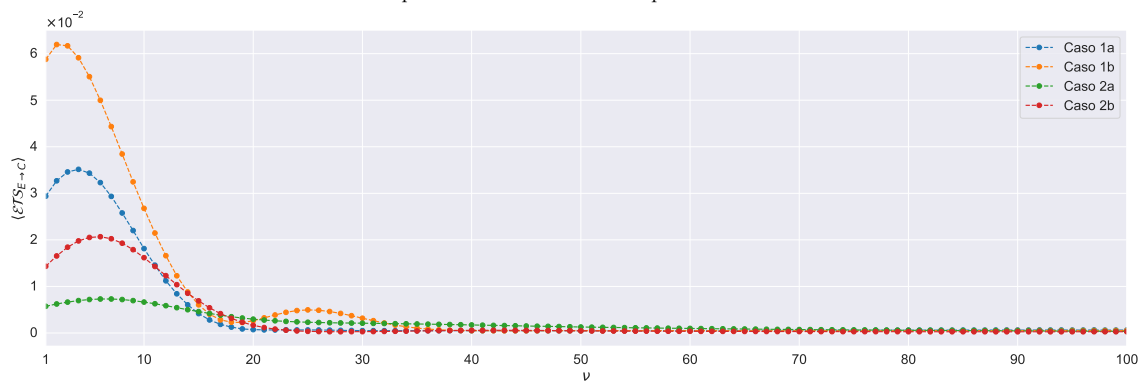
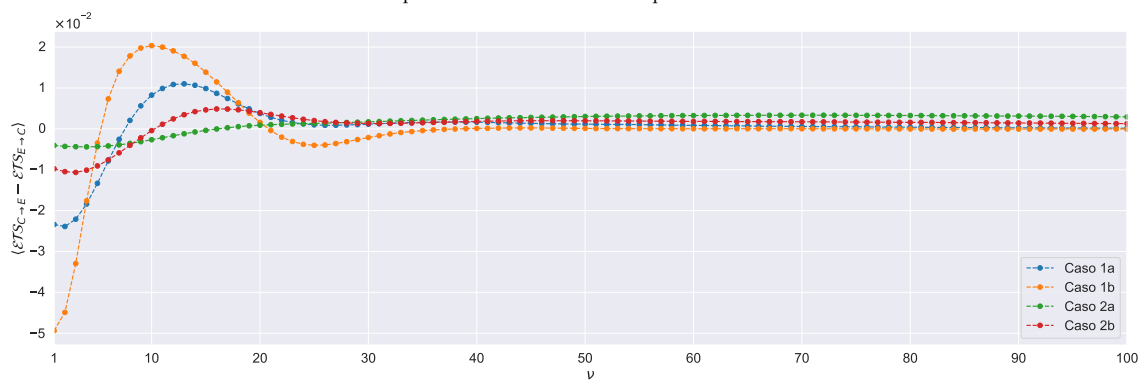
(c) Serie de la diferencia de la entropía de transferencia simbólica promedio.

Figura 5.4: Series de entropía de transferencia simbólica para la pareja $\{A, B\}$ del modelo de MCV. Los puntos son los valores que toma el respectivo promedio. Las unidades son bits.

(a) Serie de la entropía de transferencia simbólica promedio en el sentido $C \rightarrow D$.(b) Serie de la entropía de transferencia simbólica promedio en el sentido $D \rightarrow C$.

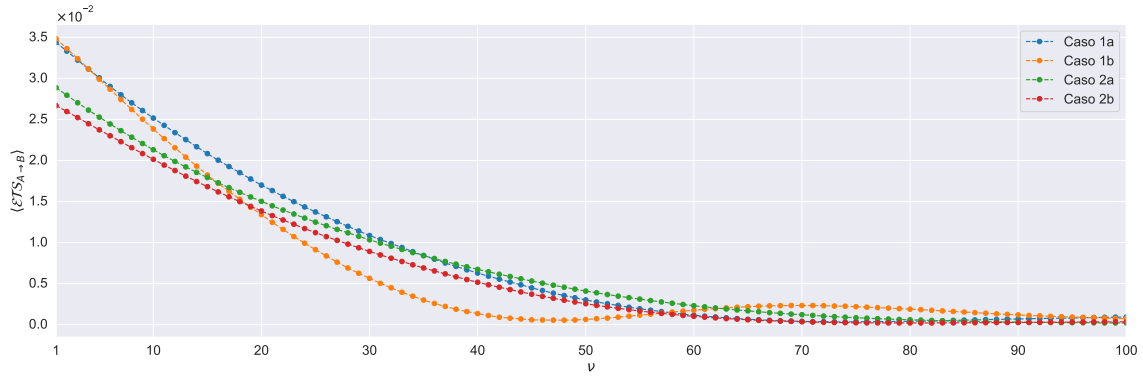
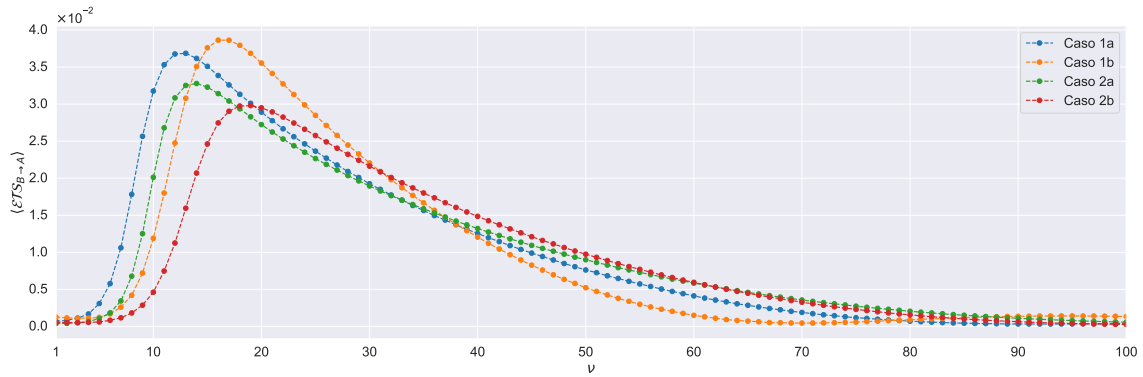
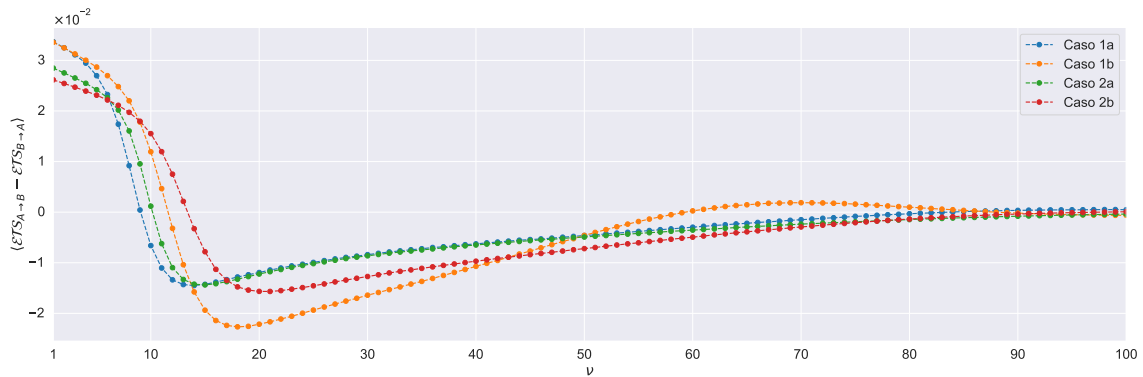
(c) Serie de la diferencia de la entropía de transferencia simbólica promedio.

Figura 5.5: Series de entropía de transferencia simbólica para la pareja $\{C, D\}$ del modelo de MCV. Los puntos son los valores que toma el respectivo promedio.. Las unidades son bits.

(a) Serie de la entropía de transferencia simbólica promedio en el sentido $C \rightarrow E$.(b) Serie de la entropía de transferencia simbólica promedio en el sentido $E \rightarrow C$.

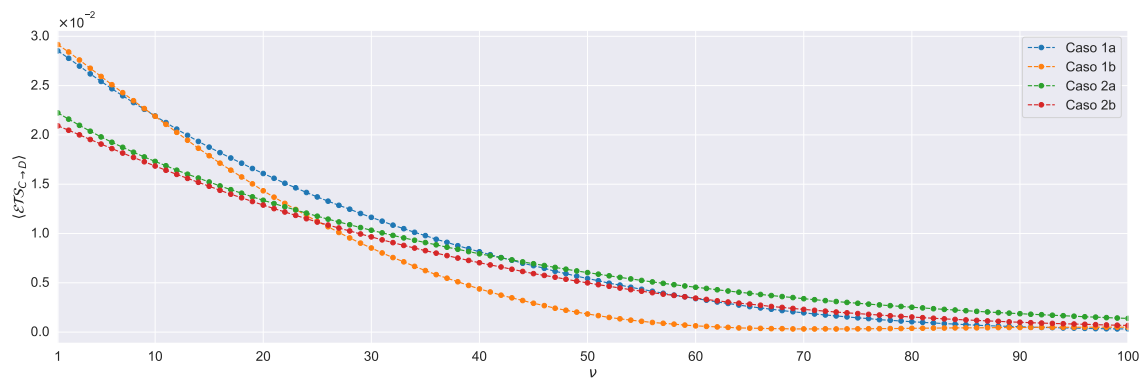
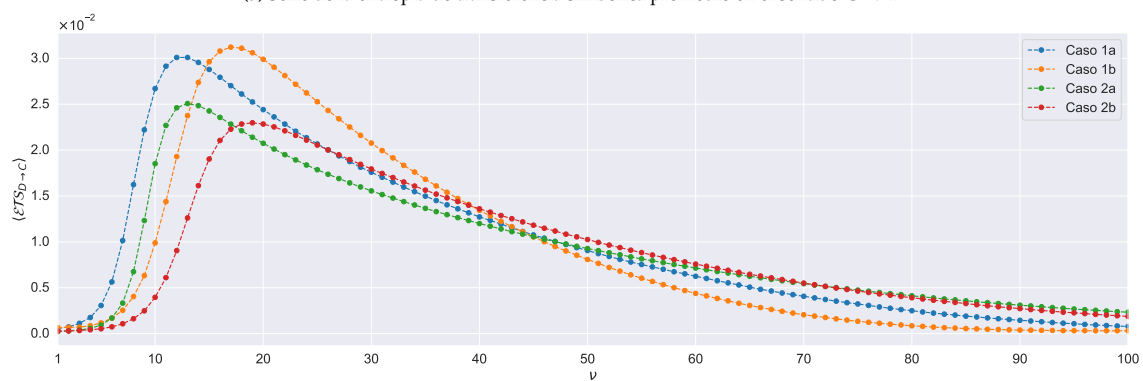
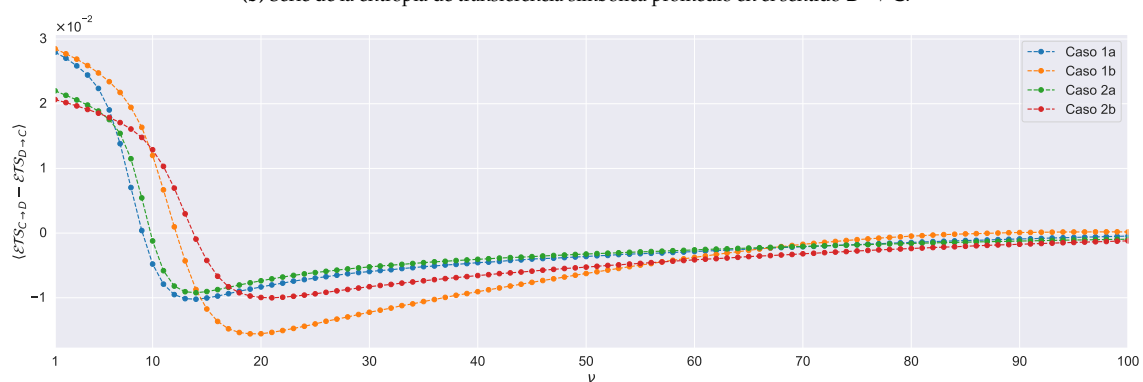
(c) Serie de la diferencia de la entropía de transferencia simbólica promedio.

Figura 5.6: Series de entropía de transferencia simbólica para la pareja $\{C, E\}$ del modelo de MCV. Los puntos son los valores que toma el respectivo promedio. Las unidades son bits.

(a) Serie de la entropía de transferencia simbólica promedio en el sentido $A \rightarrow B$.(b) Serie de la entropía de transferencia simbólica promedio en el sentido $B \rightarrow A$.

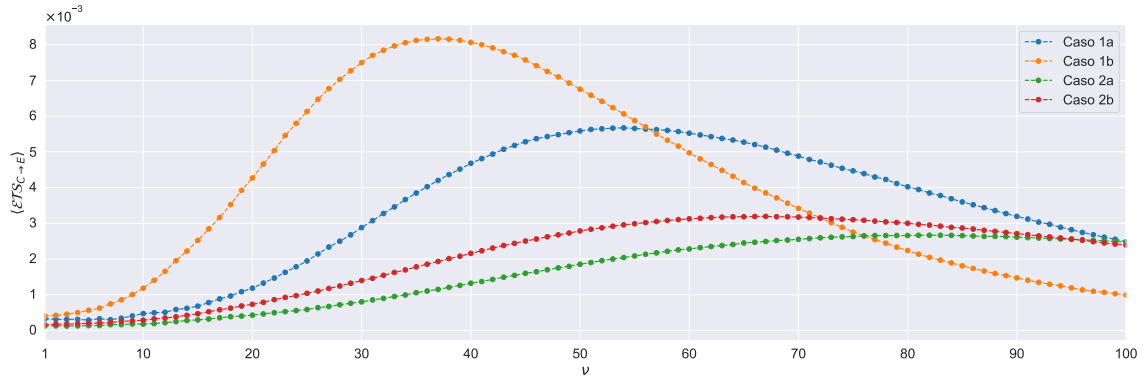
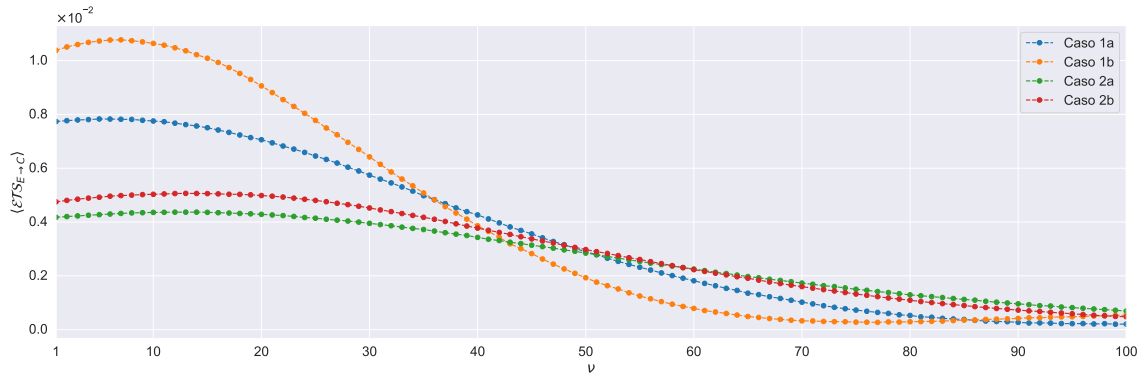
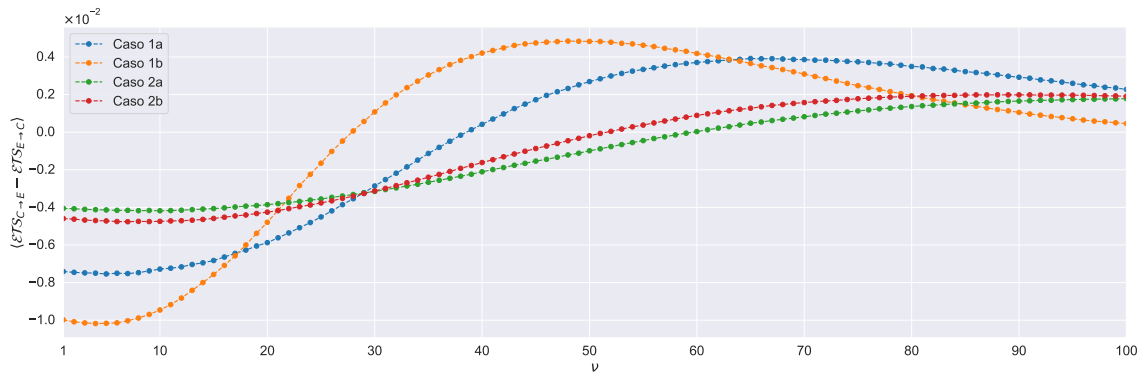
(c) Serie de la diferencia de la entropía de transferencia simbólica promedio.

Figura 5.7: Series de entropía de transferencia simbólica para la pareja $\{A, B\}$ del modelo de JGK. Los puntos son los valores que toma el respectivo promedio. Las unidades son bits.

(a) Serie de la entropía de transferencia simbólica promedio en el sentido $C \rightarrow D$.(b) Serie de la entropía de transferencia simbólica promedio en el sentido $D \rightarrow C$.

(c) Serie de la diferencia de la entropía de transferencia simbólica promedio.

Figura 5.8: Series de entropía de transferencia simbólica para la pareja $\{C, D\}$ del modelo de JGK. Los puntos son los valores que toma el respectivo promedio. Las unidades son bits.

(a) Serie de la entropía de transferencia simbólica promedio en el sentido $C \rightarrow E$.(b) Serie de la entropía de transferencia simbólica promedio en el sentido $E \rightarrow C$.

(c) Serie de la diferencia de la entropía de transferencia simbólica promedio.

Figura 5.9: Series de entropía de transferencia simbólica para la pareja $\{C, E\}$ del modelo de JGK. Los puntos son los valores que toma el respectivo promedio. Las unidades son bits.

Conclusiones

Dados los resultados del capítulo anterior, se tienen las siguientes conclusiones:

- Las definiciones de causalidad presentes en este trabajo permitieron caracterizar hasta cierto punto las curvas de entropía de transferencia simbólica para los modelos de Fourier, MCV y JGK para las parejas $\{A, B\}$ y $\{C, D\}$.
- Se encontraron similitudes importantes entre estas curvas y las producidas por los experimentos de validación
- Las variaciones en el tamaño de las series de tiempo y en los tiempos de retardo traen cambios en la magnitud que alcanzan las curvas de entropía de transferencia y en la ubicación de los máximos de los picos de predicción.
- Los experimentos de validación ofrecen un apoyo importante para la interpretación de las curvas de entropía de transferencia.
- Entre más experimentos de validación se diseñen, las interpretaciones serán más completas.
- Variables que no entran dentro del esquema propuesto de causalidad o de acoplamiento, como lo son $\{C, E\}$ no necesariamente producen curvas de transferencia de información espuria.
- El experimento 0 de validación es fundamental para la calibración de cualquier cálculo de entropía de transferencia.
- El algoritmo mismo de simulación introduce transferencias de información en el sistema.

6.1 Trabajo a futuro

- Los resultados fueron obtenidos de simulaciones numéricas. Sería interesante aplicar la misma metodología pero para resultados experimentales.
- Se propone aplicar la misma metodología para simulaciones con distintos tiempos de retardo, en particular, de mayor magnitud que los presentes en este trabajo.
- Existen otros modelos de conducción de calor, se propone aplicar la misma metodología a otros modelos.
- Para este trabajo se empleó una implementación de la entropía de transferencia simbólica, se propone ahora emplear la entropía de transferencia con uno o varios estimadores de probabilidad distintos.
- No necesariamente se necesita aplicar la metodología en modelos de conducción de calor, se pueden explorar otros modelos de otras áreas de la física.
- Se proponen diseñar más experimentos de simulación
- El estudio a profundidad de la pareja $\{C, E\}$ está pendiente.
- Este trabajo abordó los modelos cuyos parámetros α , β y sus respectivos factores que los componen son todos constantes, queda pendiente el caso donde varios de estos parámetros tengan dependencia de la temperatura.

APÉNDICE A

Modelos físicos: manipulación algebraica

Como se menciona en el Capítulo 3, en este Apéndice se presenta la manipulación algebraica para derivar las ecuaciones de tipo transporte de cada modelo de conducción de calor, así como su respectiva adimensionalización.

Como recordatorio, la ecuación de conservación de la energía es

$$C \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial x} = 0, \quad (\text{A.1})$$

y las variables adimensionales son

$$x^* = \frac{x}{L}, \quad t^* = \frac{t}{t_c}, \quad T^* = \frac{T}{T_0}, \quad q^* = \left(\frac{kt_c}{L}\right)^{-1} q. \quad (\text{A.2})$$

La manipulación algebraica sigue el mismo procedimiento para cada modelo: partiendo de la ecuación constitutiva de cada modelo en particular, se combina con la ecuación de conservación de la energía para finalmente obtener una ecuación de tipo transporte.

Para todos los casos, se considera el sistema en una sola dimensión espacial para un material conductor térmico sólido y simple.

Modelo de Fourier

La ley de Fourier es

$$q = -k \frac{\partial T}{\partial x}. \quad (\text{A.3})$$

Derivando la ley de Fourier respecto a x se tiene

$$\frac{\partial q}{\partial x} = -k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}. \quad (\text{A.4})$$

Sustituyendo A.4 en la ecuación de conservación de la energía y reescribiendo, queda

$$\frac{\partial T}{\partial t} = D \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}, \quad (\text{A.5})$$

con $D = kC^{-1}$

Así, la forma dimensional del modelo esta compuesta por las ecuaciones (A.3) y (A.5).

Modelo de Fourier adimensional

Aplicando las variables adimensionales a (A.3), se tiene

$$\frac{kT_0}{L} q^* = -\frac{kT_0}{L} \frac{\partial T^*}{\partial x^*},$$

la cual reescribiendo y eliminando los asteriscos queda la ley de Fourier en su forma adimensional

$$q = -\frac{\partial T}{\partial x}. \quad (\text{A.6})$$

Por otra parte, aplicando las variables adimensionales a la ecuación (A.5), se tiene

$$\frac{T_0}{t_c} \frac{\partial T^*}{\partial t^*} = \frac{DT_0}{L^2} \frac{\partial^2 T^*}{\partial x^{*2}}.$$

Basta con multiplicar t_c y dividir toda la expresión por T_0 para obtener

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}, \quad (\text{A.7})$$

donde $\alpha = Dt_c L^{-2}$. Esta última ecuación es la ecuación de difusión en su forma adimensional.

Así las expresiones (A.6) y (A.7) componen el modelo adimensional de Fourier.

Modelo de Maxwell-Cattaneo-Vernotte (MCV)

La ecuación constitutiva de MCV es

$$q + \Delta t_q \frac{\partial q}{\partial t} = -k \frac{\partial T}{\partial x}. \quad (\text{A.8})$$

Derivando (A.8) respecto a x se obtiene

$$\frac{\partial q}{\partial x} + \Delta t_q \frac{\partial^2 q}{\partial t \partial x} = -k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}. \quad (\text{A.9})$$

Por otra parte, derivando (A.1) respecto a t

$$C \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} + \frac{\partial^2 q}{\partial t \partial x} = 0, \quad (\text{A.10})$$

con lo cual, al sustituir en (A.9) da

$$\frac{\partial q}{\partial x} = C \Delta t_q \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} - k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}. \quad (\text{A.11})$$

Sustituyendo (A.11) en la ecuación de conservación (A.1) y reescribiendo

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \Delta t_q \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} = D \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}. \quad (\text{A.12})$$

Por tanto, el modelo de MCV está compuesto por (A.8) y (A.12).

Modelo de MCV adimensional

Aplicando las variables adimensionales, la ecuación constitutiva (A.8) queda

$$\frac{kT_0}{L} q^* + \frac{\Delta t_q}{t_c} \frac{kT_0}{L} \frac{\partial q^*}{\partial t^*} = -\frac{kT_0}{L} \frac{\partial T^*}{\partial x^*},$$

la cual, quitando los asteriscos y reescribiendo es

$$q + \tau_q \frac{\partial q}{\partial t} = -\frac{\partial T}{\partial x}, \quad (\text{A.13})$$

donde $\tau_q = \Delta t_q t_c^{-1}$ es el tiempo de retardo efectivo.

Repitiendo el proceso para (A.12), se tiene

$$\frac{T_0}{t_c} \frac{\partial T^*}{\partial t^*} + \frac{T_0 \Delta t_q}{t_c^2} \frac{\partial^2 T^*}{\partial t^{*2}} = \frac{DT_0}{L^2} \frac{\partial^2 T^*}{\partial x^{*2}},$$

finalmente, retirando los asteriscos y reescribiendo

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \tau_q \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}. \quad (\text{A.14})$$

Así, el modelo de MCV adimensional está dado por (A.13) y (A.14).

Modelo de Jeffreys

La ecuación constitutiva de Jeffreys es

$$q + \Delta t_q \frac{\partial q}{\partial t} = -k \left[\frac{\partial T}{\partial x} + \Delta t_{\partial_x T} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right) \right]. \quad (\text{A.15})$$

Derivando (A.15) respecto a x se obtiene

$$\frac{\partial q}{\partial x} + \Delta t_q \frac{\partial^2 q}{\partial t \partial x} = -k \left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \Delta t_{\partial_x T} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right) \right]. \quad (\text{A.16})$$

Sustituyendo (A.10) en (A.16) se tiene

$$\frac{\partial q}{\partial x} = C \Delta t_q \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} - k \left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \Delta t_{\partial_x T} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right) \right]. \quad (\text{A.17})$$

Finalmente, sustituyendo (A.17) en la ecuación de conservación (A.1) y reescribiendo

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \Delta t_q \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} = -D \left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \Delta t_{\partial_x T} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right) \right]. \quad (\text{A.18})$$

Las ecuaciones (A.15) y (A.18) componen el modelo de Jeffreys.

Modelo de Jeffreys adimensional

Con las variables adimensionales (A.2), la ecuación constitutiva (A.15) queda

$$\frac{kT_0}{L} q^* + \frac{\Delta t_q}{t_c} \frac{kT_0}{L} \frac{\partial q^*}{\partial t^*} = -\frac{kT_0}{L} \left[\frac{\partial T^*}{\partial x^*} + \frac{\Delta t_{\partial_x T}}{t_c} \frac{\partial}{\partial t^*} \left(\frac{\partial T^*}{\partial x^*} \right) \right],$$

la cual, quitando los asteriscos y reescribiendo es

$$q + \tau_q \frac{\partial q}{\partial t} = - \left[\frac{\partial T}{\partial x} + \tau_{\partial_x T} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right) \right], \quad (\text{A.19})$$

donde $\tau_{\partial_x T} = \Delta t_{\partial_x T} t_c^{-1}$ es el tiempo efectivo de retardo para el gradiente de la Temperatura, mientras que τ_q es el tiempo efectivo de retardo para el flujo de calor.

Mientras tanto, para la ecuación (A.18) se tiene

$$\frac{T_0}{t_c} \frac{\partial T^*}{\partial t^*} + \frac{T_0 \Delta t_q}{t_c^2} \frac{\partial^2 T^*}{\partial t^{*2}} = \frac{DT_0}{L^2} \left[\frac{\partial^2 T^*}{\partial x^{*2}} + \frac{\Delta t_{\partial_x T}}{t_c} \frac{\partial}{\partial t^*} \left(\frac{\partial^2 T^*}{\partial x^{*2}} \right) \right],$$

con lo cual, al retirar los asteriscos y reescribiendo es

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \tau_q \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} = \alpha \left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \tau_{\partial_x T} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right) \right]. \quad (\text{A.20})$$

Con esto, el modelo de Jeffreys adimensional está compuesto de (A.19) y (A.20).

Modelo de Guyer-Krumhansl (GK)

La ecuación constitutiva de GK es

$$q + \Delta t_q \frac{\partial q}{\partial t} = -k \frac{\partial T}{\partial x} + l^2 \frac{\partial^2 q}{\partial x^2}. \quad (\text{A.21})$$

Derivando (A.21) respecto de x se tiene

$$\frac{\partial q}{\partial x} + \Delta t_q \frac{\partial^2 q}{\partial t \partial x} = -k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + l^2 \frac{\partial^3 q}{\partial x^3}. \quad (\text{A.22})$$

Por otro lado, derivando la ecuación de conservación (A.1) dos veces respecto a x , da

$$\frac{\partial^3 q}{\partial x^3} + C \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right) = 0. \quad (\text{A.23})$$

Sustituyendo (A.23) y (A.10) en (A.22) se tiene

$$\frac{\partial q}{\partial x} = C \Delta t_q \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} - k \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - C l^2 \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right). \quad (\text{A.24})$$

Sustituyendo (A.24) en la ecuación de conservación (A.1) y reescribiendo resulta en la ecuación de transporte para el modelo de GK

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \Delta t_q \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} = D \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + l^2 \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right). \quad (\text{A.25})$$

Con lo cual el modelo de GK está dado por (A.21) y (A.25).

Modelo de GK adimensional

Aplicando las variables adimensionales (A.2) a la ecuación constitutiva (A.21) se tiene

$$\frac{k T_0}{L} q^* + \frac{\Delta t_q k T_0}{t_c} \frac{\partial q^*}{\partial t^*} = -\frac{k T_0}{L} \frac{\partial T^*}{\partial x^*} + l^2 \frac{k T_0}{L^3} \frac{\partial^2 q^*}{\partial x^{*2}},$$

la cual, eliminando asteriscos y reescribiendo queda

$$q + \tau_q \frac{\partial q}{\partial t} = - \left[\frac{\partial T}{\partial x} + \lambda^2 \frac{\partial^2 q}{\partial x^2} \right], \quad (\text{A.26})$$

donde $\lambda = l L^{-1}$ es el número de Knudsen.

Por otro lado, aplicando las variables adimensionales a (A.25) queda

$$\frac{T_0}{t_c} \frac{\partial T^*}{\partial t^*} + \frac{T_0 \Delta t_q}{t_c^2} \frac{\partial^2 T^*}{\partial t^{*2}} = \frac{D T_0}{L^2} \frac{\partial^2 T^*}{\partial x^{*2}} + \frac{l^2 T_0}{t_c L^2} \frac{\partial}{\partial t^*} \left(\frac{\partial^2 T^*}{\partial x^{*2}} \right),$$

la cual, retirando los asteriscos y reescribiendo queda

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \tau_q \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} = \alpha \left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \beta \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right) \right], \quad (\text{A.27})$$

con

$$\beta = \frac{\lambda^2}{\alpha} = \frac{l^2}{t_c D}. \quad (\text{A.28})$$

Así, el modelo de GK adimensional está dado por (A.26) y (A.27).

Equivalencia entre los modelos de Jeffreys y Guyer-Krumhansl (GK)

En este Apéndice se muestra la equivalencia entre el modelo de Jeffreys y el modelo de GK para el material conductor solido simple en una dimensión. La razón principal por la cual se puede demostrar esta equivalencia bajo estas condiciones las propiedades intensivas del material, que son la conductividad térmica k , la longitud libre media de los fonones l y el producto de la densidad del material por capacidad calorífica a volumen constante C , son todas constantes.

Demostración y consecuencias

Se toma la ecuación de conservación de la energía (A.1) y se aplican las variables adimensionales (A.2)

$$C \frac{T_0}{t_c} \frac{\partial T^*}{\partial t^*} + \frac{kT_0}{L} \frac{\partial q^*}{\partial x^*} = 0,$$

a la cual se le retiran los asteriscos y se reescribe para obtener

$$\frac{\partial q}{\partial x} = -\frac{1}{\alpha} \frac{\partial T}{\partial t}. \quad (\text{B.1})$$

Derivando (B.1) respecto de x se tiene

$$\frac{\partial^2 q}{\partial x^2} = -\frac{1}{\alpha} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right). \quad (\text{B.2})$$

Sustituyendo (B.2) en la ecuación constitutiva de GK adimensional (A.26) se tiene

$$q + \tau_q \frac{\partial q}{\partial t} = - \left[\frac{\partial T}{\partial x} + \beta \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right) \right], \quad (\text{B.3})$$

donde β está definido por (A.28).

Ahora se escribe nuevamente la ecuación constitutiva de Jeffreys adimensional (A.19)

$$q + \tau_q \frac{\partial q}{\partial t} = - \left[\frac{\partial T}{\partial x} + \tau_{\partial_x T} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right) \right], \quad (\text{B.4})$$

Al comparar las expresiones (B.3) y (B.4), se muestra que ambas son idénticas, y por tanto

$$\beta = \tau_{\partial_x T}. \quad (\text{B.5})$$

Siguiendo este razonamiento, por el traductor (2.10), para el gradiente de la temperatura se tiene

$$\frac{\partial T}{\partial x} (t + \beta) = \frac{\partial T}{\partial x} + \beta \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right). \quad (\text{B.6})$$

Por otro lado, se escriben nuevamente las ecuaciones de transporte de Jeffreys y GK adimensionales (A.20) y (A.27)

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \tau_q \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} = \alpha \left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \tau_{\partial_x T} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right) \right], \quad (\text{B.7})$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \tau_q \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} = \alpha \left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \beta \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right) \right]. \quad (\text{B.8})$$

Al comparar ambas ecuaciones (B.7) y (B.8) se observa que son idénticas y de nuevo se cumple (B.5).

Ahora, para el laplaciano de la temperatura, aplicando el traductor (2.10) se tiene

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} (t + \beta) = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \beta \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right). \quad (\text{B.9})$$

Debido a (B.6) y (B.9) y a la equivalencia entre modelos, se tiene que comparten las mismas variables causales, lo cual, supone en consecuencia que ambos modelos comparten la misma caracterización causal.

Ejemplos de procesos correlacionados sin un posible acoplamiento

Correlación no implica causación. Usualmente, cuando se habla de medir correlación entre las muestras de dos procesos X y Y , por lo general lo que se quiere decir es calcular el coeficiente de correlación de Pearson, el cual está dado por

$$r_{X,Y} = \frac{\sum(x_i - \mu_x)(y_i - \mu_y)}{\sqrt{\sum(x_i - \mu_x)^2 \sum(y_i - \mu_y)^2}}.$$

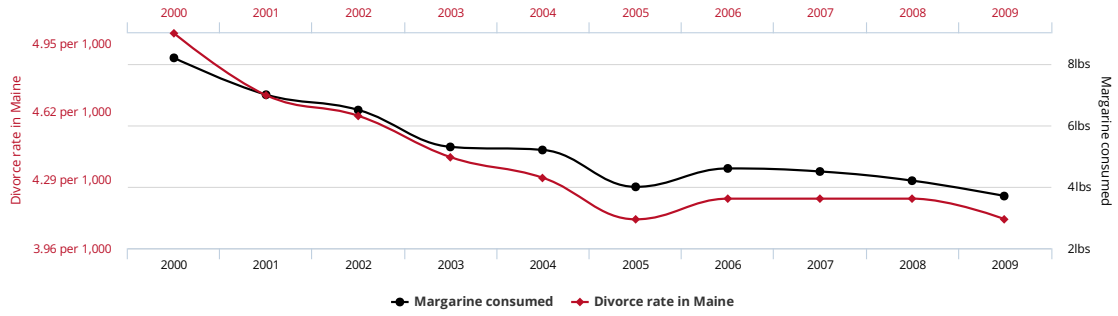
Así, el coeficiente de correlación se encuentra entre los valores $r_{X,Y} \in [-1, 1]$, si el valor de $r_{X,Y}$ es cercano o exactamente 1 se dice que las variables están correlacionadas, mientras que si es cercano o exactamente -1 las variables están anticorrelacionadas. Finalmente, si está cerca o es exactamente 0, las variables no están correlacionadas.

Así, se tienen los siguientes ejemplos cortesía (Figura C.1) de tylervigen (reproducción bajo la respectiva licencia Creative Commons).

En cada uno de los casos se tienen las series de tiempo de cada una de las variables y se calcula su respectivo coeficiente de correlación. En todos, se muestra que las variables están correlacionadas al tener $r_{X,Y} > 0.75$, sin embargo, es obvio que es imposible encontrar un modelo descriptivo formal que las relacione de manera coherente, y así, proponer algún tipo de relación o causalidad.

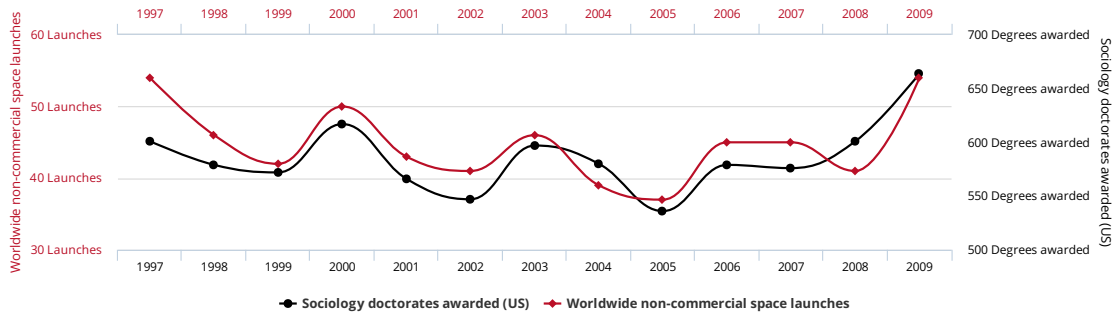
Si bien es posible proponer algún modelo de regresión lineal que permita extrapolar o interpolar valores de las variables, desafortunadamente eso solo permitiría establecer un modelo predictivo, lo cual no explica o justifica la existencia de una relación de acoplamiento o causal.

Divorce rate in Maine
correlates with
Per capita consumption of margarine



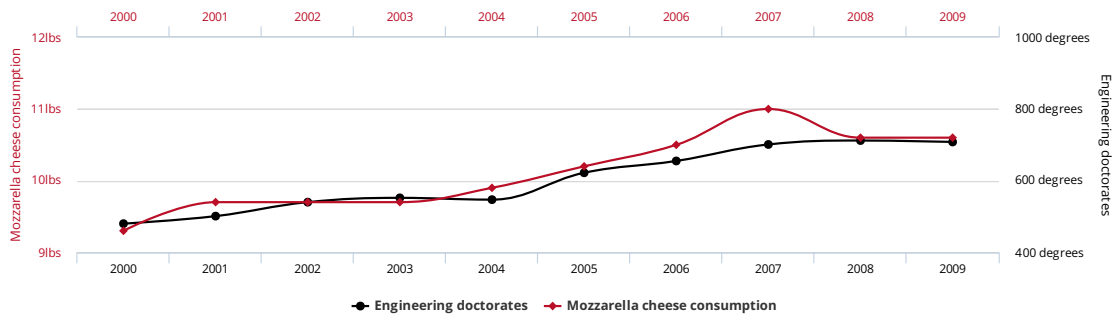
(a) Correlación $r_{X,Y} = 0.99$.

Worldwide non-commercial space launches
correlates with
Sociology doctorates awarded (US)



(b) Correlación $r_{X,Y} = 0.78$.

Per capita consumption of mozzarella cheese
correlates with
Civil engineering doctorates awarded



(c) Correlación $r_{X,Y} = 0.95$.

Figura C.1: Ejemplos de correlaciones *espurias*. Cortesía de <https://www.tylervigen.com/spurious-correlations>.

Notación para los algoritmos de solución numérica

Al leer los algoritmos 3.1, 3.2, y 3.3, la notación empleada es clara para entender los pasos que los componen, sin embargo, todos estos algoritmos están contruidos sobre los algoritmos de *Euler* y *Runge-Kutta de cuarto orden*. Estos métodos se expresan en el algoritmo con la notación **Euler** y **RK4**. A continuación se da una explicación de su significado.

Algoritmo de Euler

Sea una ecuación de la forma

$$\frac{\partial y}{\partial t} = f(y, t), \quad (\text{D.1})$$

se tiene su forma discreta en términos de diferencias finitas

$$\frac{y_{i+1} - y_i}{\Delta t} = f(y_i, t_i), \quad (\text{D.2})$$

donde Δt es el tamaño de paso.

Despejando y_{i+1} , queda finalmente

$$y_{i+1} = y_i + \Delta t f(y_i, t_i). \quad (\text{D.3})$$

Escrito de esta manera, el término y_{i+1} se está expresando como una función dependiente de y_i y $f(y_i, t_i)$, lo cual en notación algorítmica es

$$y_{i+1} \Leftarrow \mathbf{Euler} \left(y_i, f(y_i, t_i) \right). \quad (\text{D.4})$$

Sin embargo, si $y = y(\vec{r}, t)$, aplicar el algoritmo de Euler no solamente requiere de condiciones iniciales, también son necesarias las condiciones de frontera. Sean Fy las condiciones de frontera, se incluyen en (D.4) como

$$y_{i+1} \Leftarrow \mathbf{Euler} \left(y_i, f(y_i, t_i), Fy_i \right). \quad (\text{D.5})$$

Algoritmo de RK4

Teniendo la misma ecuación (D.1), el calculo de y_{i+1} , según el algoritmo de **RK4**, está dado por

$$y_{i+1} = y_i + \frac{\Delta t}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4), \quad (\text{D.6})$$

donde se tienen los coeficientes de **RK4**

$$\begin{aligned} k_1 &= f(y_i, t_i), \\ k_2 &= f\left(y_i + \frac{\Delta t}{2}k_1, t_i + \frac{\Delta t}{2}\right), \\ k_3 &= f\left(y_i + \frac{\Delta t}{2}k_2, t_i + \frac{\Delta t}{2}\right), \\ k_4 &= f(y_i + \Delta tk_3, t_i + \Delta t). \end{aligned}$$

De este modo, y_{i+1} se expresa como una función de y_i y $f(y_i, t_i)$, por lo tanto en notación algorítmica, es

$$y_{i+1} \Leftarrow \mathbf{RK4} \left(y_i, f(y_i, t_i) \right), \quad (\text{D.7})$$

y agregando las condiciones a la frontera queda

$$y_{i+1} \Leftarrow \mathbf{RK4} \left(y_i, f(y_i, t_i), Fy_i \right). \quad (\text{D.8})$$

Notación posicional

Como se muestra en (D.4) y (D.7), el argumento está estructurado de la misma manera: en la primera posición el estado presente de y , y en la segunda el término f . Si este orden en la notación se respeta, puede aplicarse sin problema para ambos **Euler**, **RK4**, y en general, cualquier otro **algoritmo** que tenga la misma dependencia y cuyo objetivo sea calcular iterativamente y_{i+1} . Por tanto, para “ahorrar tinta”, cuando no sea necesario expresar los argumentos explícitamente, la dependencia puede expresarse como (\cdot, \cdot) .

Por otro lado, en el caso que incluyen las condiciones de fronteras, se incluyen en la tercera posición del argumento como se muestra en (D.5) y (D.8), y por lo tanto la notación para “ahorrar tinta” queda (\cdot, \cdot, \cdot) .

APÉNDICE E

Perfil estacionario de los modelos de conducción de calor

Se reescriben las ecuaciones adimensionales de los modelos de Fourier, MCV y JGK 3.2, 3.3, 3.4, 3.5, 3.6 y 3.7:

Fourier

$$q = -\frac{\partial T}{\partial x}; \quad \frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2},$$

MCV

$$q + \tau_q \frac{\partial q}{\partial t} = -\frac{\partial T}{\partial x}; \quad \frac{\partial T}{\partial t} + \tau_q \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} = \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2},$$

JGK

$$q + \tau_q \frac{\partial q}{\partial t} = -\left[\frac{\partial T}{\partial x} + \beta \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial T}{\partial x} \right) \right]; \quad \frac{\partial T}{\partial t} + \tau_q \frac{\partial^2 T}{\partial t^2} = \alpha \left[\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \beta \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right) \right].$$

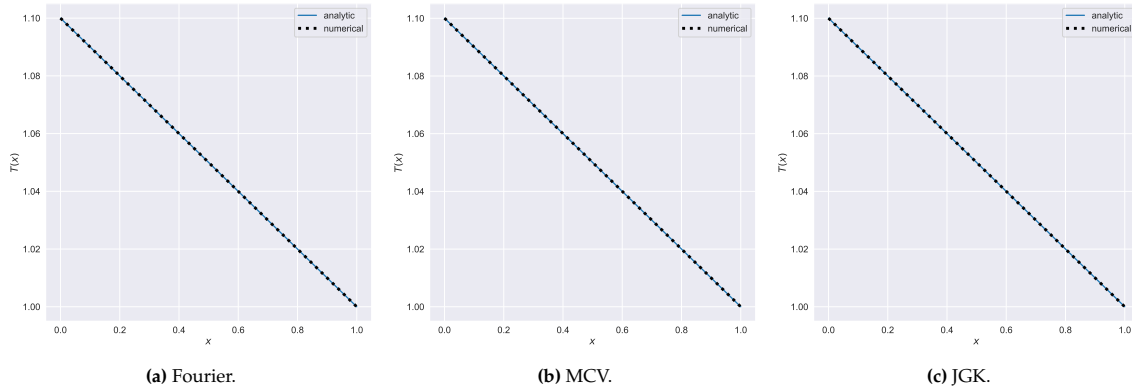


Figura E.1: Perfil de temperatura en el estado estacionario de los modelos de Fourier, MCV y JGK. Para todos los modelos, $\mu_T = 0.1$.

En el estado estacionario, las derivadas temporales se anulan y por tanto, las respectivas ecuaciones de tipo transporte se reducen a

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = 0, \tag{E.1}$$

y las ecuaciones constitutivas se reducen a la ley de Fourier

$$q = -\frac{\partial T}{\partial x}. \tag{E.2}$$

Integrando dos veces (E.1), se obtiene la solución para la temperatura

$$T(x) = mx + b. \tag{E.3}$$

Derivando la solución para la temperatura respecto x se obtiene el negativo del flujo de calor

$$\frac{\partial T}{\partial x} = m = -q. \tag{E.4}$$

Ambas ecuaciones (E.3) y (E.4) permiten calcular exactamente $T(x)$ y $q(x)$ en el estado estacionario y muestra respectivamente que la temperatura es una recta y el flujo de calor una constante que corresponde al negativo de la pendiente de la temperatura.

Fijando las condiciones de frontera $T(x = 0) = 1 + \mu_T$ y $T(x = 1) = 1$, se fijan la ordenada al origen y la pendiente como

$$b = 1 + \mu_T, \quad m = -\mu_T, \quad (\text{E.5})$$

por tanto, el perfil de temperatura y el flujo de calor son

$$T(x) = 1 + \mu_T(1 - x), \quad q = \mu_T. \quad (\text{E.6})$$

El perfil de temperatura para cada modelo se observa en la Figura E.1.

Sin embargo, la resolución puede engañar. Se procede a calcular error para la temperatura en cada caso, el cual se define

$$\varepsilon_T = \text{Max} |T_{\text{numerico}} - T_{\text{analitico}}|. \quad (\text{E.7})$$

Así, para cada modelo se tiene el respectivo error:

Fourier $\varepsilon_T \approx 1.39 \times 10^{-10}$

MCV $\varepsilon_T \approx 2.74 \times 10^{-11}$

JGK $\varepsilon_T \approx 2.76 \times 10^{-11}$

Detalles de la implementación de la simulación numérica

Lenguaje

Implementación en Python empleando principalmente las bibliotecas Numba y NumPy.

Algoritmo generador de números pseudo-aleatorios (GNPA)

Para la generación del ruido, se emplea la implementación de Numpy basada en el algoritmo GNPA *Tornado de Marsenne* [35]. La característica del algoritmo importante para este trabajo es que el Tornado de Marsenne tiene un período de $2^{19937} \approx 4.3 \times 10^{6001}$, lo cual, le permite generar una secuencia 4.3×10^{6001} valores antes de repetir el patrón de valores. En este trabajo, la secuencia más larga que se genera es de $144 \times 100001 \approx 1.44 \times 10^7$ valores, por lo cual es 5994 ordenes de magnitud más pequeña que la secuencia que puede generar el algoritmo sin repetición del patrón.

Mallado

Dos casos:

Caso 1 Uniformemente espaciado con 161 puntos para $x \in [0, 1]$ y 50001 puntos para $t \in [0, 1]$.

Caso 2 Uniformemente espaciado con 251 puntos para $x \in [0, 1]$ y 100001 puntos para $t \in [0, 1]$.

Tamaño de paso

Para los respectivos casos:

Caso 1 Para x es $\Delta x = 0.00625$ y para t es $\Delta t = 2.0 \times 10^{-5}$.

Caso 2 Para x es $\Delta x = 0.004$ y para t es $\Delta t = 1.0 \times 10^{-5}$.

Constantes para todos los modelos

- Longitud del material $L = 1$
- Tiempo característico $t_c = 1$
- Difusividad térmica $D = 1$
- Número de Fourier $\alpha = 1$
- Número de realizaciones $R = 144$
- Punto de interés $x_p = 0.2$ (donde se miden las series de tiempo)

Parámetros para el modelo de MCV

Además de los casos por mallado, se tienen casos para el tiempo de retardo:

Caso a Tiempo de retardo del flujo de calor $\tau_q = \tau_C = 10\Delta t$.

Caso b Tiempo de retardo del flujo de calor $\tau_q = \tau_C = 15\Delta t$.

Parámetros para el modelo de JGK

Se tiene:

- Longitud libre media de los fonones $l = \sqrt{5\Delta t}$
- Tiempo de retardo para el gradiente de temperatura $\beta = \tau_{\partial_x T} = \tau_D = 5\Delta t/t_c D$

Además de los casos por mallado, se tienen casos por los tiempos de retardo del flujo de calor:

Caso a Tiempo de retardo del flujo de calor $\tau_q = \tau_C = 15\Delta t$

Caso b Tiempo de retardo del flujo de calor $\tau_q = \tau_C = 20\Delta t$

Precisión

Float64, nombre en Python para flotante de doble precisión

Graficación

Matplotlib y Seaborn

Cálculo del error del perfil estacionario

Para el cálculo del error del perfil estacionario del Apéndice E se empleó el **Caso 1** para Fourier, y el **Caso 1a** para MCV y JGK.

Código

Se tienen dos repositorios: uno para Fourier, y otro para MCV y JGK. Cada repositorio está principalmente compuesto de un módulo *solver* que permite para realizar la simulación numérica y de una serie numerada de *notebooks* que deben ejecutarse en orden. Desde la generación de la muestra del ensamble de fronteras $\mathbb{E}F_R$ y parámetros básicos para la simulación; pasando por pruebas rápidas, generación de realizaciones, calibración, cálculo de la entropía de transferencia simbólica; y finalmente, los resultados, cada notebook representa un paso importante para el estudio.

El código se encuentra disponible en:

Fourier <https://github.com/tri-ntropy/causalidad-f>

MCV y JGK <https://github.com/tri-ntropy/causalidad-cg>

Diccionarios de símbolos

Sean dos series de tiempo \mathbf{X} y \mathbf{Y} dadas por

$$\mathbf{X}(t) \sim \mathcal{N}(\mu = 0, \sigma = 0.4); \quad \mathbf{Y}(t) \sim \mathcal{U}_{\mathbb{Z}}(V_{\min} = 1, V_{\max} = 6),$$

donde \mathcal{N} denota la distribución normal con μ es el promedio y σ es la desviación estándar, mientras que $\mathcal{U}_{\mathbb{Z}}$ denota una distribución uniforme de valores enteros discreta con V_{\max} el valor máximo que toma y V_{\min} el valor mínimo. De esta manera, \mathbf{X} es ruido blanco y \mathbf{Y} un dado común justo de seis caras.

Sea $t \in [0, 1]$ con $n = 63$ pasos en el tiempo, para una realización en particular del ruido blanco y el dado de seis caras se tienen las figuras G.1 y G.2. En las gráficas, los puntos representan los valores que se toman en cada paso de la serie de tiempo, mientras que la línea punteada solo está presente para facilitar el seguimiento de la serie y por mera estética.

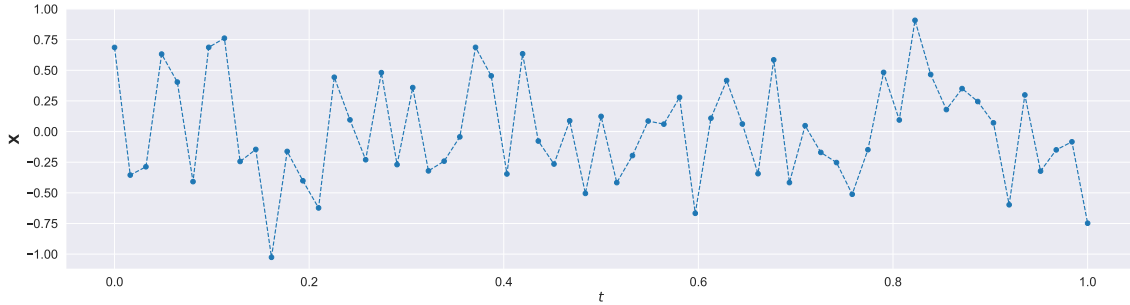


Figura G.1: Ruido blanco Gaussiano generado por $\mathcal{N}(\mu = 0, \sigma = 0.4)$

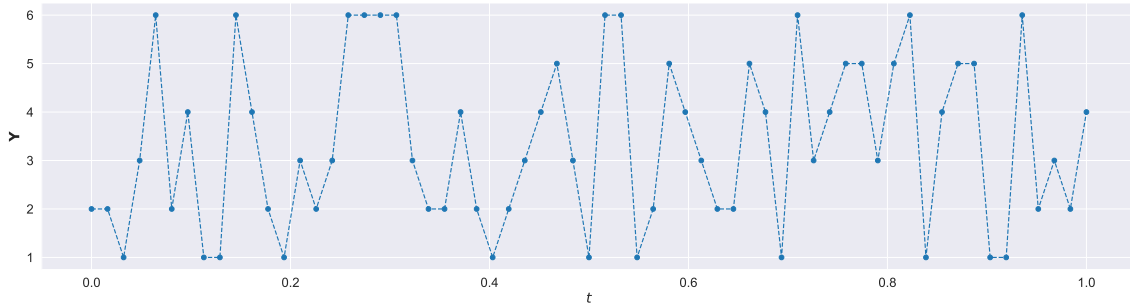


Figura G.2: Secuencia de tiradas de un dado de seis caras generado por $\mathcal{U}_{\mathbb{Z}}(V_{\min} = 1, V_{\max} = 6)$

Para el caso del ruido blanco, se observa que no tiene valores repetidos, mientras que para el caso del “dado” si se llegan a repetir valores de forma consecutiva. Estas series fueron escogidas de esta manera para mostrar como son los diccionarios $\hat{\mathbf{D}}_m$ para ambos casos.

Por conveniencia, los símbolos que se eligen para componer los $\hat{\mathbf{D}}_m$ son la cadena de caracteres correspondientes al ranking, así, por ejemplo para $m = 3$, los símbolos para denotar decrecimiento y crecimiento total son ‘321’ y ‘123’ respectivamente, mientras que para $m = 4$ son ‘4321’ y ‘1234’.

Para estos símbolos, '1' corresponde con el valor más bajo del ranking mientras que '3' o '4' corresponde con el valor más alto. Así, en el caso que se repitan tres o cuatro valores seguidos se tiene '111' o '1111', según m .

Con esta descripción de los diccionarios, se simbolizan las series X y Y , y se muestran a continuación.

— Para \hat{X} y $m = 3$:

Serie de símbolos { '312' '123' '132' '321' '213' '123' '231' '312' '231' '312' '132' '321' '213' '132' '321' '213' '231' '312' '231' '312' '123' '123' '132' '321' '213' '132' '321' '213' '231' '213' '132' '312' '123' '132' '213' '231' '312' '123' '231' '321' '213' '231' '312' '132' '321' '321' '213' '123' '132' '213' '132' '321' '321' '213' '132' '321' '213' '132' '231' }

Tamaño de la serie de símbolos 61 símbolos

Diccionario {'123' '132' '213' '231' '312' '321'}

Tamaño del diccionario 6 símbolos

— Para \hat{X} y $m = 4$:

Serie de símbolos { '4123' '1243' '2431' '3214' '2134' '1342' '3412' '4231' '2413' '4132' '1432' '3214' '2143' '1432' '3214' '3241' '2413' '4231' '2413' '4123' '1234' '1243' '2431' '4213' '3142' '1432' '4213' '3241' '2314' '3142' '1423' '4123' '1243' '1324' '3241' '2413' '3124' '1342' '3421' '3214' '3241' '2413' '4132' '1432' '4321' '3214' '2134' '1243' '1324' '3142' '1432' '4312' '4132' '2431' '4321' '3214' '3142' '1423' '4123' '2341' }

Tamaño de la serie de símbolos 60 símbolos

Diccionario { '1234' '1243' '1324' '1342' '1423' '1432' '2134' '2143' '2314' '2341' '2413' '2431' '3124' '3142' '3214' '3241' '3412' '3421' '4123' '4132' '4213' '4231' '4312' '4321' }

Tamaño del diccionario 24 símbolos

— Para \hat{Y} y $m = 3$:

Serie de símbolos { '221' '213' '123' '231' '312' '231' '211' '112' '132' '321' '321' '213' '132' '212' '123' '122' '111' '111' '221' '321' '211' '112' '121' '321' '212' '123' '123' '123' '231' '321' '213' '122' '221' '312' '123' '132' '321' '321' '211' '112' '132' '321' '213' '132' '312' '123' '122' '221' '212' '123' '231' '312' '123' '122' '221' '211' '112' '132' '312' '121' '213' }

Tamaño de la serie de símbolos 61 símbolos

Diccionario {'111' '112' '121' '122' '123' '132' '211' '212' '213' '221' '231' '312' '321'}

Tamaño del diccionario 13 símbolos

— Para \hat{Y} y $m = 4$:

Serie de símbolos { '2213' '2134' '1342' '2413' '4231' '2311' '2113' '1132' '1432' '4321' '4213' '2132' '1323' '2123' '1233' '1222' '1111' '2221' '3321' '3211' '2113' '1121' '2321' '3212' '2123' '1234' '1234' '1231' '3421' '3214' '2133' '1221' '3312' '4123' '1243' '1432' '4321' '3211' '2113' '1132' '2431' '3214' '3142' '1423' '4123' '1233' '2331' '2212' '2123' '2341' '3412' '4123' '1233' '2331' '2211' '2113' '1132' '1423' '3121' '1213' }

Tamaño de la serie de símbolos 60 símbolos

Diccionario { '1111' '1121' '1132' '1213' '1221' '1222' '1231' '1233' '1234' '1243' '1323' '1342' '1423' '1432' '2113' '2123' '2132' '2133' '2134' '2211' '2212' '2213' '2221' '2311' '2321' '2331' '2341' '2413' '2431' '3121' '3142' '3211' '3212' '3214' '3312' '3321' '3412' '3421' '4123' '4213' '4231' '4321' }

Tamaño del diccionario 42 símbolos

Como era de esperarse, para la serie de símbolos del ruido blanco que no repite ningún valor, el tamaño de los diccionarios es de $m!$, mientras que para el dado con valores repetidos consecutivos, los diccionarios son de mayor tamaño, y curiosamente, para el caso $m = 4$ parece que están ausentes los símbolos '1332' y '1324', además de otros. De este modo se muestra que, aunque se pueda calcular teóricamente la cantidad de símbolos que compone un diccionario dado m , depende de la serie símbolos para determinar el diccionario.

Bibliografía

- [1] T. Schreiber, "Measuring information transfer," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 85, pp. 461–464, Jul 2000.
- [2] C. W. J. Granger, *Investigating Causal Relations by Econometric Models and Cross-Spectral Methods*, vol. 2 of *Econometric Society Monographs*, pp. 31–47. Cambridge University Press, 2001.
- [3] N. Wiener and P. Masani, "The prediction theory of multivariate stochastic processes," *Acta Mathematica*, vol. 98, no. 1, pp. 111–150, 1957.
- [4] K. Schindler, M. Palus, and M. Vejmelka, "Causality detection based on information-theoretic approaches in time series analysis," *Physics Reports*, pp. 1–46, Jan 2007.
- [5] M. Wibral, N. Pampu, V. Priesemann, F. Siebenhühner, H. Seiwert, M. Lindner, J. T. Lizier, and R. Vicente, "Measuring information-transfer delays," *PloS one*, vol. 8, no. 2, p. e55809, 2013.
- [6] H. Dickten and K. Lehnertz, "Identifying delayed directional couplings with symbolic transfer entropy," *Physical Review E*, vol. 90, Dec 2014.
- [7] S. Li, Y. Xiao, D. Zhou, and D. Cai, "Causal inference in nonlinear systems: Granger causality versus time-delayed mutual information.," *Physical review. E*, vol. 97, p. 052216, 2018.
- [8] M. Paluš, A. Krakovská, J. Jakubík, and M. Chvosteková, "Causality, dynamical systems and the arrow of time.," *Chaos*, vol. 28 7, p. 075307, 2018.
- [9] M. C. Romano, M. Thiel, J. Kurths, and C. Grebogi, "Estimation of the direction of the coupling by conditional probabilities of recurrence," *Phys. Rev. E*, vol. 76, p. 036211, Sep 2007.
- [10] A. Krakovská and F. Hanzely, "Testing for causality in reconstructed state spaces by an optimized mixed prediction method," *Phys. Rev. E*, vol. 94, p. 052203, Nov 2016.
- [11] F. Vazquez, M. Lopez de Haro, and A. Figueroa, "On the causality relations in thermoelectricity," *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, vol. 30, pp. 1201 – 1206, Nov 2018.
- [12] M. Staniek and K. Lehnertz, "Symbolic transfer entropy," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 100, p. 158101, Apr 2008.
- [13] M. Prokopenko, J. T. Lizier, and D. C. Price, "On thermodynamic interpretation of transfer entropy," *Entropy*, vol. 15, no. 2, pp. 524–543, 2013.
- [14] R. E. Spinney, J. T. Lizier, and M. Prokopenko, "Transfer entropy in physical systems and the arrow of time," *Phys. Rev. E*, vol. 94, p. 022135, Aug 2016.
- [15] M. Wibral, R. Vicente, and J. T. Lizier, *Directed Information Measures in Neuroscience*. Springer, 2014.
- [16] C. J. Quinn, T. P. Coleman, N. Kiyavash, and N. G. Hatsopoulos, "Estimating the directed information to infer causal relationships in ensemble neural spike train recordings," *Journal of Computational Neuroscience*, vol. 30, pp. 17–44, 2010.
- [17] T. Bossomaier, L. Barnett, M. Harré, and J. T. Lizier, *Transfer entropy*, pp. 65–95. Springer, 2016.
- [18] P. Ván and T. Fülöp, "Universality in heat conduction theory: weakly nonlocal thermodynamics," *Annalen der Physik*, vol. 524, no. 8, pp. 470–478, 2012.
- [19] S. Mumford and R. Lill Anjum, *Causation: A Very Short Introduction*. Oxford University Press, Nov 2013.
- [20] E. Sosa and M. Tooley, *Causation*. Oxford University Press, May 1993.

- [21] B. Russell, "On the notion of cause," *Proceedings of the Aristotelian Society*, vol. 13, pp. 1–26, Jul 2015.
- [22] D. Hume, *An Enquiry Concerning Human Understanding: And Other Writings*. Cambridge Texts in the History of Philosophy, Cambridge University Press, 2007.
- [23] J. Collins, N. Hall, and L. A. Paul, *Causation and Counterfactuals*. The MIT Press, Jun 2004.
- [24] J. Woodward, *Making Things Happen: A Theory of Causal Explanation*. Oxford University Press, Jan 2004.
- [25] M. S. Moore, *Causation and Responsibility: An Essay in Law, Morals, and Metaphysics*. Oxford University Press, Jan 2009.
- [26] D. Elder-Vass, *The causal power of social structures: Emergence, structure and agency*. Cambridge University Press, Jan 2010.
- [27] J. Howick, *The Philosophy of Evidence-Based Medicine*. Wiley-Blackwell Press, Jan 2015.
- [28] L. L. Cam, "The Central Limit Theorem Around 1935," *Statistical Science*, vol. 1, no. 1, pp. 78–91, 1986.
- [29] C. E. Shannon, "A mathematical theory of communication," *The Bell System Technical Journal*, vol. 27, no. 3, pp. 379–423, 1948.
- [30] L. Floridi, *Information: A Very Short Introduction*. Oxford University Press, 02 2010.
- [31] L. Floridi, "Outline of a theory of strongly semantic information," *Minds and Machines*, vol. 14, 05 2004.
- [32] S. Lloyd, "Computational capacity of the universe," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 88, p. 237901, May 2002.
- [33] E. Schrödinger, *What is Life? The Physical Aspect of the Living Cell*. Cambridge University Press, 1944.
- [34] M. Davis, *Game Theory: A Nontechnical Introduction*. Dover Books on Mathematics, Dover Publications, 1997.
- [35] M. Matsumoto and T. Nishimura, "Mersenne twister: A 623-dimensionally equidistributed uniform pseudo-random number generator," *ACM Trans. Model. Comput. Simul.*, vol. 8, pp. 3–30, Jan 1998.

**DR. JEAN MICHEL GRÉVY MACQUART
COORDINADOR DEL POSGRADO EN CIENCIAS
PRESENTE**

Atendiendo a la solicitud para emitir DICTAMEN sobre la revisión de la TESIS titulada:
Entropía de transferencia y causalidad en fenómenos de transporte de calor, que
presenta el alumno **Antonio Iván Rivera Islas (10021256)** para obtener el título de
Doctor en Ciencias.

Nos permitimos informarle que nuestro voto es:

NOMBRE	DICTAMEN	FIRMA
Dr. Markus Franziskus Muller CInC-UAEM	APROBADO	
Dr. Rolando Pérez Álvarez CInC-UAEM	APROBADO	
Dr. Mariano López de Haro IER-UNAM	APROBADO	
Dra. Ruth Estephania Gonzalez Narváez IER-UNAM	APROBADO	
Dr. Raúl Salgado García CInC-UAEM	APROBADO	
Dr. Mario Alberto Abarca Sotelo CInC-UAEM	APROBADO	
Dr. Federico Vázquez Hurtado CInC-UAEM	APROBADO	

Se expide el presente documento firmado electrónicamente de conformidad con el ACUERDO GENERAL PARA LA CONTINUIDAD DEL FUNCIONAMIENTO DE LA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS DURANTE LA EMERGENCIA SANITARIA PROVOCADA POR EL VIRUS SARS-COV2 (COVID-19) emitido el 27 de abril del 2020.

El presente documento cuenta con la firma electrónica UAEM del funcionario universitario competente, amparada por un certificado vigente a la fecha de su elaboración y es válido de conformidad con los LINEAMIENTOS EN MATERIA DE FIRMA ELECTRÓNICA PARA LA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE ESTADO DE MORELOS emitidos el 13 de noviembre del 2019 mediante circular No. 32.

Sello electrónico

MARKUS FRANZISKUS MULLER | Fecha:2022-10-15 20:40:04 | Firmante

mSPGzzznieqY465A3leZb9XyToN8GeiffPENJDnQx4TRZwmqnrKQw1ug7CBBY4/sKoDidYSZEvGj1ICgAK4x6RvH6+3evSWEGChyXq2Af9KNbAG5bZKGJ5hmALS8+vUIN2tuN7KsJycBY4ALYqfIP0Z5LaatEbZhfQhNX3feF0kC6LlzV9zTf/gNTj2JZ7M5QsowmGzIGpa2ZfKalj5y59qr7eQnNodwpZi/xNM1sT3fXQJ17ICwy0eEDJfU7j8YoA3uyp55A6EoeSxSamybRfA3e3AjpweapdEnhm+aOOUw5qcAqGsg+MM3IUvGF0pyDbLQaOJHxIMc2VLaZ1suvA==

RAUL SALGADO GARCIA | Fecha:2022-10-16 07:14:22 | Firmante

Fgf/6ifzrW4h2GtgLf+FpegA8Mt2jxYfLgwo6sdzpa9HGzLr9/jbS07Ei6PK0Z/VTKQ7n1WYEtX9hmV/D45Rp5My2ekSKK8ux4Zmt8osJMNfEzrFqRymVelOBQZtonr4VtOinpz29+Xm7sBcPmHeObae3toPLisRHbUgQrNvD2V5weMgXB9H8L5qxyRdurUIVR6sN5QLw85pg4vF/p+3ZmTxQmAo2D7W6ZAuQhaPH80ObJE+VKjBytBAB7DzQ6Vfs4s558YXUEpAFMi3vfMuuRR7DhehuM3mqogrmulR5IXCV3q+Tzwwwfp3BntiKY02sdvgeS6ceQkmD3Nf3UB5rg==

FEDERICO VAZQUEZ HURTADO | Fecha:2022-10-16 10:47:00 | Firmante

IBKC9E6MyWjaJGmExYW5cqFxmK+oKzyVcmGrAlExp5ezEz/AVevaUr9cxXoH6h3RHfgNoU2okk/+Ftjr3yXBQfsSEnTL3Ah3i+pReUDYiIGX3uTLUvY8JY9IK/Cs5+rDKMw+HDszOhT+bhG8EALWXUZhSNB6x+fY9zk/7AXVEn19AEEjB1V+kJL7VVTbjgPfAPQ26MRyqIEcyBP1oOK3lthR5GS2K7ciTYRqS+76fuNtUwH4vdU0AwXFAEvayQpWln5iA3jQPK2pSmQu/ObYOMfoapVliZc1TM3lInZnSluVD9IA/qX2IO7WZLxD8Jnu7yGki3V6FuB1uck2tt6w==

MARIO ALBERTO ABARCA SOTELO | Fecha:2022-10-17 03:51:15 | Firmante

sBqac4at6ETXfR/tSe0DHG6WslJUHPEFEMMFwhK/zZEpuO7YU4p2usEYWpUUnUC23AC/VqKwYX+NaRMzULSyVgHRSy6xAwzdX+p2pfcKjlc2R0/Dm7Fg/qlvUHdD/21vYsIRkJvehKtVNoJ5slJ53HwP0007/nwaYzv2BhVd3PqHfEtKlxjdU72r35cuTR+b+LJTQw7rplgRvDqWFDWcMv55klyKidO8qmjsgDO1Lm1sA42BVd58oinpYc4KaPND+1M87Mnj4Kqy6WTwVMovGABAiqJhjm7g2NI/BgxS6RGx7MO11MmVCRh8nSbTVWcHox6704GfubBiQefgYfPw==

ROLANDO PEREZ ALVAREZ | Fecha:2022-10-17 12:09:45 | Firmante

mWjEbG9BYXyA46Om45Y3MPkN1Xj5QNJHT6d7mndDWIIB02REodvWc5OI8LqYEGmKknhI7yN0mN3LZRqqCN2Xr9wWwRGkk5INhmWZHxhnx3mhbkKAG3YldwJMZCTP VZTzponRH340qOWdkG9mYcbX4lqhGbufaayzDstvH0j/P0CcUEkvnalGBolxKX6ueREGFApqTQJVMliJ4G2arNXZwcSOFsUo0QL0Rc34D39kIAkuVXAsHVX8PtGD/G6oFPQr15ZGwkiPCHXKfA5pdYq58DwRsdWY2LqRNF31rKSDx6eZs7HR+91NpHKRpBzMCfI02Mxw/N7tJuStuSwdn1w==

Puede verificar la autenticidad del documento en la siguiente dirección electrónica o escaneando el código QR ingresando la siguiente clave:



XCW2VfyUR

<https://efirma.uaem.mx/noRepudio/OMMyLTcRNqAF8J1IFZieQ3b1xmReazuk>



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL
ESTADO DE MORELOS

Se expide el presente documento firmado electrónicamente de conformidad con el ACUERDO GENERAL PARA LA CONTINUIDAD DEL FUNCIONAMIENTO DE LA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS DURANTE LA EMERGENCIA SANITARIA PROVOCADA POR EL VIRUS SARS-COV2 (COVID-19) emitido el 27 de abril del 2020.

El presente documento cuenta con la firma electrónica UAEM del funcionario universitario competente, amparada por un certificado vigente a la fecha de su elaboración y es válido de conformidad con los LINEAMIENTOS EN MATERIA DE FIRMA ELECTRÓNICA PARA LA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE ESTADO DE MORELOS emitidos el 13 de noviembre del 2019 mediante circular No. 32.

Sello electrónico

RUTH ESTEPHANIA GONZALEZ NARVAEZ | Fecha:2022-10-17 13:56:42 | Firmante

Kv+TjF/6dFp3cnNJ52r96JLo9nA8kAvm8fE/jrSvdQ0uuul7e+aMmmEMkJhkYF8llz0QLm67aQJl/ICMxpbetxYuHWSlwNF49qxX0iDQ9oka/mYoLNng3qbHV25VlxNFztMfpAIBhdI7xMSFZ+skBFuiGcOF6rJPKSV1ZEh0MqKIY/4PWtdvkq/Qm13zeJM+CZ0D6T88AMJQIBHk2eLi6B42kQq9alkUHLRqpVe8I9ddq43On5BbH+0zM3fjMuljvjErlBn1HgCsAviJYW5GvHP1e8E2iuWRbA+O96WPSnKqWf1PPGgoOhqre7jE+MvLz9R+RefhXhJ6xXlzXH9HKA==

Puede verificar la autenticidad del documento en la siguiente dirección electrónica o escaneando el código QR ingresando la siguiente clave:



BKhsX8D2e

<https://efirma.uaem.mx/noRepudio/nID2muQliMBc5kdjx3F2rRKEvgMOx7LR>





UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL
ESTADO DE MORELOS

Se expide el presente documento firmado electrónicamente de conformidad con el ACUERDO GENERAL PARA LA CONTINUIDAD DEL FUNCIONAMIENTO DE LA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS DURANTE LA EMERGENCIA SANITARIA PROVOCADA POR EL VIRUS SARS-COV2 (COVID-19) emitido el 27 de abril del 2020.

El presente documento cuenta con la firma electrónica UAEM del funcionario universitario competente, amparada por un certificado vigente a la fecha de su elaboración y es válido de conformidad con los LINEAMIENTOS EN MATERIA DE FIRMA ELECTRÓNICA PARA LA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE ESTADO DE MORELOS emitidos el 13 de noviembre del 2019 mediante circular No. 32.

Sello electrónico

MARIANO LÓPEZ DE HARO | Fecha:2022-10-20 17:22:15 | Firmante

kOW4C3sY+Ad17yTxilaDG5spblqV2uJNKMA8U2Ypl2PGXVJnWT2CwGeemYNmCnUgVOoJ3VQpuwQtJQ329iNd/YMcs3ITCY90/oR+7lxcWreTIsS+WksVYQZZ2aqnLI8MVvkN
BCrcebraCL9oFGEtu+P3urYVMt+vXbeq9S+XaMjf3V0IPbXKb19VUJnzyX380qm4DPDBU1+hknp+/d6tFbjSQNSHCJ3jpbp/kx0EMxL/ZSIJuS1kNBxib9hMVKSA4wbjaNGnC/PVU
DRUSxeqlt7/43tG3IIBN22G98/Yb5gNBpvx/qgCkYKKkbKYCB7VqRDx6zsEj/K2NIHw8sN6Eg==

Puede verificar la autenticidad del documento en la siguiente dirección electrónica o
escaneando el código QR ingresando la siguiente clave:



[ekCJjp8yO](#)

<https://efirma.uaem.mx/noRepudio/5BmUQkuW8fNBn9VRkUKY8duNXrlc5shg>

