



Transferencia de Entropía: Interpretación Termodinámica

Tesis
que para obtener el grado de

Licenciado en Física

presenta

Moreno Perez Nahuel Armando

*Departamento en Física
de la Universidad de Sonora*

Enero 2017

Director de tesis:
Dr. Carlos Lizarraga Celaya
Departamento de Física, UNISON.

Universidad de Sonora

Repositorio Institucional UNISON



"El saber de mis hijos
hará mi grandeza"



Excepto si se señala otra cosa, la licencia del ítem se describe como openAccess

Contenido

| | |
|--|-----------|
| Introducción | 1 |
| 1. Teoría de la información | 3 |
| 1.1. Principio de Maxima Entropía | 6 |
| 2. Medidas de la Teoría de la Información | 8 |
| 2.1. Transferencia de Entropía Local | 12 |
| 3. Diferencias entre transferencia de información y efecto causal | 16 |
| 3.1. Transferencia de Información Predictiva | 17 |
| 3.2. Efecto Causal | 19 |
| 3.3. Aplicación al Automata Celular | 21 |
| 4. Interpretación Termodinámica de la Transferencia de Entropía | 24 |
| 4.1. Definición del sistema | 26 |
| 4.2. Efecto Causal: Interpretación Termodinámica | 31 |
| Conclusiones | 33 |

Introducción

Fue el demonio de Maxwell [9] el que dio paso al concepto de información como una cantidad capaz de variar las propiedades de un sistema físico. Maxwell pretendía facilitar la comprensión de un fenómeno con este experimento pensado. Ahora sabemos que la segunda ley de la termodinámica es estadística, por lo que en el ámbito de las moléculas se viola constantemente por mera casualidad, el demonio sustituía la casualidad por propósito. Utilizaba información para reducir la entropía del sistema. Maxwell hablaba implícitamente del conocimiento como si estuviera a nuestra disposición, pero no consideraba el costo de esta información. Fue Szilard [9] quien dijo que la información no es libre, el demonio realiza una conversión entre información y energía, una partícula a la vez.

Szilard [11] no utilizaba la palabra información en este momento, sin embargo se dio cuenta que si tenía en cuenta cada medida y cada memoria, la conversión podía ser computada con precisión. Lo hizo y llegó a la conclusión de que cada vez que el demonio efectúa una elección entre una partícula y otra, el costo es de un bit de información. La recompensa llega al final del ciclo cuando se tiene que vaciar su memoria y esto conlleva un gasto energético [5]. Justificar debidamente todo este proceso es la única manera de eliminar la paradoja de Maxwell. Szilard había cerrado así un ciclo que conduca a la concepción de Shannon de la entropía como información.

La teoría de la información nació con Shannon [3] y su definición de entropía, la cual es una generalización de la formulación de la entropía propuesta por Boltzmann, a pesar de esto no es hasta que Jaynes [6] une los vínculos entre la teoría de la información y la mecánica estadística que se puede hablar de formulaciones equivalentes entre estas dos disciplinas.

Desde el trabajo seminal de Shannon a la fecha la teoría de la información ha ganado terreno y a partir de esto diversas medidas han surgido, como lo es la información mutua o la entropía relativa las cuales han sido de vital importancia para la caracterización de

diferentes sistemas complejos en distintas áreas del conocimiento.

Partiendo desde la perspectiva informacional, definiremos diversas medidas que nos ayudaran a definir una medida direccional de la transferencia de la información como lo es la transferencia de entropía [4] y una medida del efecto causal como lo es el flujo de información [13] las cuales compararemos, ayudados de sus interpretaciones locales, para obtener una definición certera de cada una, además se demostrarán las diferencias entre las dos medidas así como el caso en el que convergen. Después se definirá un sistema, tal que, daremos una interpretación termodinámica a transferencia de entropía pensando en ella como una diferencia entre dos tasas de entropía para dos procesos, uno reversible y el otro irreversible.

Teoría de la información

El concepto de entropía en teoría de la información describe que tanta información existe en una señal o evento. Para darnos una idea intuitiva de lo que es entropía en este ámbito pensemos en el siguiente ejemplo; digamos que tenemos una caja con pelotas de diferentes colores, si no existe un color predominante, entonces nuestra incertidumbre al realizar la selección de una de ellas, es máxima. Cada vez que se extrae una bola se nos dice el resultado. Obtenemos más información de la primera bola extraída que de la segunda, existe más incertidumbre al escoger la primera vez que la segunda, porque ya has obtenido información del evento inicial. Como resultado la entropía de la secuencia en que se escogen los objetos es mayor la primera vez que la segunda. Shannon definió la entropía como una medida del promedio de la información asociado con una variable aleatoria.

En general, considerando un experimento con n posibles resultados, cada uno con una probabilidad asociada $p_i, i = 1, 2, \dots, n$ sujeto a la condición de normalización $\sum_{i=1}^n p_i = 1$. La definición de Shannon de entropía de la información debe satisfacer los siguientes requerimientos:

- La medida de la información debe ser continua. Cambiar el valor de alguna de las probabilidades por una cantidad muy pequeña cambiara la entropía en esa misma cantidad.
- Si todas las selecciones posibles son igualmente probables, $S(p_1 = \frac{1}{n}, p_2 = \frac{1}{n}, \dots, p_n = \frac{1}{n})$ entonces la entropía debe ser el máximo de todos los valores posibles $S(p_1, \dots, p_n)$ con n resultados. En este caso la entropía incrementa acorde al incremento de posibles resultados.
- Si el resultado es una certeza la entropía es cero, $S(p_1 = 0, \dots, p_i = 1, \dots, p_n = 0) = 0$.
- La entropía es la misma no importa como se considere el proceso al ser dividido.

Shannon demostró que si asumimos que la función entropía satisface los requerimientos que enlistaremos a continuación existe solo una representación matemática posible [12].

- (a) $S(p_1, \dots, p_n)$ es una función continua
- (b) $f(n) \equiv S(\frac{1}{n}, \frac{1}{n}, \dots, \frac{1}{n})$ es una función monótona
- (c) Ley de composición

$$S(AB) = S(A) + \sum_{k=1}^m p_k S(B|A)$$

Para comprobar que solo la entropía de Shannon satisface estas tres condiciones, consideremos un experimento en el que se selecciona aleatoriamente un objeto de N posibles, la probabilidad de escoger cualquiera de ellos es $\frac{1}{N}$. La entropía o incertidumbre en este experimento es

$$S(\frac{1}{N}, \frac{1}{N}, \dots, \frac{1}{N}) \equiv f(N)$$

Ahora, supongamos que descomponemos el experimento en dos partes. Dividimos los N objetos en m grupos. Cada grupo k contiene n_k elementos y $k = 1, 2, \dots, m$. Tal que $\sum_{k=1}^m n_k = N$, en el primer paso escogemos alguno de los m grupos involucrados, supongamos que escogemos el grupo k , la probabilidad de escoger este es:

$$p_k = \frac{n_k}{N}$$

En la segunda etapa escogemos un objeto del grupo seleccionado, tal que la probabilidad de escoger algún objeto del grupo k es $\frac{1}{n_k}$. Tenemos entonces que, la entropía en la primera etapa del experimento es $S(p_1, \dots, p_m)$ y tenemos que el valor esperado de la entropía en la segunda parte del experimento es $\sum_{k=1}^m p_k f(n_k)$, por lo tanto

$$f(N) = S(p_1, \dots, p_m) + \sum_{k=1}^m p_k f(n_k)$$

Si ahora consideramos el caso especial en que $n_1 = n_2 = \dots = n_m = n$ y $p_k = \frac{1}{m}$ para toda k . Cada grupo tiene n objetos, $n * m = N$

$$f(N) = S(\frac{1}{m}, \dots, \frac{1}{m}) + \sum_{k=1}^m \frac{1}{m} f(n)$$

Notamos que la función $f(n * m) = f(n) + f(m)$, as

$$f(m) = K \log m. \quad (1.1)$$

Volviendo al caso general

$$\begin{aligned} K \log N &= S(p_1, \dots, p_m) + \sum_{k=1}^m p_k K \log n_k \\ S(p_1, \dots, p_m) &= K \log N - \sum_{k=1}^m p_k K \log n_k \\ &= K \sum_{k=1}^m p_k \log N - K \sum_{k=1}^m p_k \log n_k \\ &= K \sum_{k=1}^m p_k \log \frac{N}{n_k} \\ S &= -K \sum_{k=1}^m p_k \log p_k \end{aligned}$$

En el caso particular en que los eventos son equiprobables $p_k = \frac{1}{\Omega}$, $k = 1, \dots$, obtenemos la ecuación para la entropía de Boltzmann.

$$\begin{aligned} S &= K \sum_{k=1}^{\Omega} \frac{1}{\Omega} \log\left(\frac{1}{\Omega}\right) \\ S &= -K \log \end{aligned}$$

Tiempo después, Jaynes, apoyado en la teoría de la información, considero la posibilidad de que la mecánica estadística no es dependiente de hipótesis físicas sino un ejemplo de inferencia estadística. Podemos hacer una clara diferenciación entre el aspecto físico de la mecánica estadística y el estadístico, el primero consiste en una enumeración correcta de los estados accesibles al sistema y sus propiedades, el segundo es meramente un ejemplo de inferencia estadística. Tomando en cuenta esto el hecho de que la entropía de Shannon y la de Boltzmann tengan una misma forma matemática no establece por sí misma una conexión entre la mecánica estadística y la teoría de la información. Esto solo se puede lograr encontrando nuevos puntos de vista en los que entropía en termodinámica y en teoría de la información aparezcan como un mismo concepto, en el escrito de Jaynes [6] se pretende reinterpretar la mecánica estadística para que cumpla con esto último, para que así podamos usar la teoría de la información para justificar la mecánica estadística.

1.1. Principio de Máxima Entropía

La cantidad x es capaz de asumir los valores discretos x_i ($i = 1, 2, \dots, n$). No conocemos las correspondientes probabilidades p_i ; solo conocemos el valor esperado de la función $f(x)$

$$\langle f(x) \rangle = \sum_{i=1}^n p_i f(x_i) \quad (1.2)$$

Con esta información queremos conocer cuál es el valor esperado de la función $g(x)$. La información parece insuficiente para determinar las probabilidades p_i , tomando en cuenta también la condición de normalización $\sum p_i = 1$, todavía necesitamos $n - 2$ condiciones para poder determinar $\langle g(x) \rangle$. A pesar de esto parece una tarea imposible es precisamente el mismo problema que confrontamos en mecánica estadística; en base a cierta información que parece ser inadecuada para determinar alguna distribución de probabilidad para los microestados accesibles, se nos pide calcular la presión, calores específicos, etc., de un sistema macroscópico, a pesar de todo esto la mecánica estadística es sorprendentemente precisa estimando estas propiedades. Claramente debe existir alguna otra razón para este éxito que va más allá de un tratamiento estadístico adecuado.

El problema de especificación de probabilidades en casos donde hay poca o ninguna información es tan viejo como la teoría de la probabilidad. El principio de razón insuficiente propuesto por Laplace fue un intento para determinar un criterio para elegir, en el que se le asigna la misma probabilidad a todos los eventos si no hay ninguna razón para creer lo contrario. Así como en estadística el problema crucial es diseñar un método de muestreo que evite el sesgo, en nuestro caso necesitamos encontrar una probabilidad que sea lo más imparcial posible que este de acuerdo con la información disponible acerca del sistema.

La ventaja de la teoría de la información nos proporciona un criterio para determinar la "cantidad de incertidumbre" representado por una distribución discreta de probabilidad, que esta en acuerdo con la idea intuitiva de que una distribución dispersa indica mayor incertidumbre que una que se encuentre concentrada alrededor de un punto. Dicha medida fue introducida anteriormente y tiene la siguiente forma:

$$S(p_1, \dots, p_n) = -K \sum_i p_i \log p_i \quad (1.3)$$

La cual como mencionamos antes es llamada la entropía de la distribución de probabilidad p_i , por tanto, consideramos incertidumbre y entropía como sinónimos. Para resolver el problema de cómo hacer una inferencia adecuada en base a información parcial debemos usar la distribución de probabilidad que haga máximo a la entropía sujeto a lo que se conoce del sistema. Esta es la única suposición imparcial que podemos hacer. Para maximizar la ecuación (1.3) sometida a la restricción en la ecuación (1.2) y a la restricción de normalización, podemos usar el método de multiplicadores de Lagrange.

$$\delta \left(-K \sum_{i=1}^N p_i \log p_i + \lambda \sum_{i=1}^N p_i + \mu \sum_{i=1}^N p_i f(x_i) \right) = 0$$

$$\sum_{i=1}^N (\delta p_i \log p_i + \lambda \delta p_i + \mu f(x_i) \delta p_i) = 0$$

$$\delta S = \sum_{i=1}^N (\log p_i + \lambda + \mu f(x_i)) \delta p_i = 0$$

Ya que cada δp_i es arbitrario, cada termino en la suma debe desvanecerse, el valor especial en el que esto se cumple es p_i

$$\log p_i + \lambda + \mu f(x_i) = 0$$

$$\log p_i = -\lambda - \mu f(x_i)$$

Por lo tanto

$$p_i = e^{-\lambda - \mu f(x_i)}$$

Sustituyendo p_i en las constricciones podemos obtener el valor de los multiplicadores λ y μ , que se pueden escribir de la siguiente manera

$$\langle f(x) \rangle = -\frac{\partial}{\partial \mu} \log Z(\mu)$$

$$\lambda = \log Z(\mu)$$

Donde

$$Z(\mu) = \sum_i e^{-\mu f(x_i)}$$

La cual llamaremos la funcion de particion. El principio de maxima entropia puede ser considerado como una extension del principio de razon insuficiente, al cual se reduce en el caso de no tener mas informacion que la forma en que se enumeran los estados x_i . Matematicamente la distribucion de maxima entropia tiene la propiedad de que ninguna posibilidad es ignorada; le asigna un peso probabilistico a cada situacion que no sea excluida por la informacion que tenemos del sistema.

Medidas de la Teoría de la Información

Cuando hablamos de medidas nos referimos a una función que asigna valores positivos a algún subconjunto del conjunto universo X . Una colección de subconjuntos de X que incluyen al conjunto vacío la llamaremos σ -álgebra. Una función μ de es llamada una medida si satisface las siguientes especificaciones:

- Positiva: Para todo evento E en : $\mu(E) \geq 0$.
- Conjunto vacío: $\mu(\emptyset) = 0$
- Aditividad: μ es aditiva cuando una serie de eventos disjuntos E_1, E_2, \dots en cumple con: $\mu(\bigcup_{n=1}^{\infty} E_n) = \sum_{n=1}^{\infty} \mu(E_n)$

La teoría de la información inicio con el trabajo de Shannon [3] en el que se indica que el número promedio de bits necesarios para codificar todas las posibilidades independientes de una variable discreta I , a la cual se le asocia la distribución de probabilidad $p(i)$, es la entropía de Shannon: $H_I = -\sum_i p(i) \log_2 p(i)$, donde la suma se extiende sobre todos los estados posibles del sistema. En este ámbito al considerar un sistema de muchos segmentos que interactúan, es interesante medir la direccionalidad de los flujos de información o en que proporción se transfiere esta de un subsistema a otro. Era común considerar a la información mutua como una buena forma de detectar estas interacciones, sin embargo, esta es una medida que no toma en cuenta la direccionalidad del flujo de información, ni la tasa de información entre los subsistemas [4].

Debido a las deficiencias de la información mutua presentadas en [4] para tomar en cuenta la direccionalidad del proceso, Schreiber se dio a la tarea de desarrollar una medida

que pudiera predecir de manera mas acertada la transferencia de informacion. Para lograr esto, debemos partir de varias medidas usadas comunmente en teoria de la informacion con las cuales construiremos una medida capaz de cuantificar la transferencia de informacion, tomando en cuenta la dinamica del proceso. Con la ventaja de que no es necesario utilizar hipotesis muy severas respecto a la dinamica del sistema o la manera en que dos subsistemas se acoplan para obtener resultados concluyentes.

Con esto en mente consideremos la Divergencia de Kullback-Leibler (DKL), la cual es una medida antisimetrica de la similitud o diferencia entre dos distribuciones de probabilidad I y Q . DKL mide el numero esperado de extra bits requeridos al aproximar I considerando la distribucion de probabilidad Q . Si queremos crear un codificador optimo que solo utilice el numero de bits dados por la entropia necesitamos conocer $p(i)$. El valor excedente de bits que son codificados usando una distribucion $q(i)$ se cuantifica por medio de la divergencia de Kullback-Leibler. A la distribucion $p(i)$ se le conoce como distribucion verdadera y $q(i)$ es la distribucion que usaremos para aproximar $p(i)$. Matematicamente esto es:

$$K_I = \sum_i p(i) \log_2 \frac{p(i)}{q(i)}$$

La expresion anterior puede separarse usando regla de logaritmos, tal que

$$\sum_i p(i) \log_2 \frac{p(i)}{q(i)} = \sum_i p(i) \log_2 p(i) - \sum_i p(i) \log_2 q(i)$$

El primer termino del lado derecho es la entropia de Shannon $H(p)$ de la distribucion $p(i)$ y el segundo termino $H(p, q) = -\sum_i p(i) \log_2 q(i)$ se le llama entropia cruzada, la cual es el valor esperado de una variable al asumir una distribucion $q(i)$ cuando la distribucion de los datos se ve gobernada por $p(i)$. Podemos entonces pensar en DKL como un aumento en la entropia del sistema debido al uso de una distribucion aproximada $q(i)$.

$$K_I = H(p, q) - H(p)$$

De manera similar, la entropia de Kullback para una probabilidad condicional $p(i|j)$ aproximando con $q(i|j)$ es: $K_j = \sum_i p(i|j) \log_2 \frac{p(i|j)}{q(i|j)}$, tal que si hacemos la suma sobre todos los estados j con respecto a $p(j)$ y ya que $p(i|j) = \frac{p(i,j)}{p(j)}$ entonces DKL condicional es:

$$K_{I|J} = \sum_i p(i, j) \log_2 \frac{p(i|j)}{q(i|j)}$$

En este caso tenemos como distribución de probabilidad verdadera $p(i|j)$ y queremos aproximarla usando $q(i|j)$. Tomando en cuenta esto, al considerar dos procesos I y J con una distribución de probabilidad $p_{IJ}(i, j)$; la entropía condicional de Kullback, al asumir falsamente que los dos sistemas son independientes $q_{IJ}(i, j) = p_I(i)p_J(j)$ en lugar de $p_{IJ} = p(i, j)$ es:

$$M_{IJ} = \sum_{i,j} p(i, j) \log_2 \frac{p(i, j)}{p(i)p(j)}$$

Esta es la expresión para la información mutua, por lo que, partiendo de DKL podemos definir la información mutua como el código producido erróneamente si se considera que los procesos son independientes. Al desarrollar la ecuación anterior tenemos:

$$\begin{aligned} M_{IJ} &= \sum_{i,j} p(i, j) \log_2 p(i, j) - \sum_{i,j} p(i, j) \log_2 p(i) - \sum_{i,j} p(i, j) \log_2 p(j) \\ &= \sum_{i,j} p(i, j) \log_2 p(i, j) - \sum_i \log_2 p(i) \sum_j p(i, j) - \sum_j \log_2 p(j) \sum_i p(i, j) \\ &= \sum_{i,j} p(i, j) \log_2 p(i, j) - \sum_i p(i) \log_2 p(i) - \sum_j p(j) \log_2 p(j) \end{aligned}$$

$$M_{IJ} = H_I + H_J - H_{I,J}$$

Tal que

$$M_{IJ} = H_I - H_{I|J} = H_J - H_{J|I}$$

Por lo que M_{IJ} es simétrica ante el intercambio de I y J . Esta medida no percibe el sentido direccional de la información, lo cual es una gran limitante. Para incorporar la estructura dinámica del sistema usaremos probabilidades condicionales, las cuales representan las transiciones entre los estados, para esto, consideremos un proceso de Markov de orden k , por lo que, la probabilidad de encontrar I en el estado i_{n+1} al tiempo $n+1$ es condicionalmente independiente del estado i_{n-k} , lo cual se puede expresar matemáticamente de la siguiente forma:

$$p(i_{n+1}|i_n, \dots, i_{n-k+1}, i_{n-k}) = p(i_{n+1}|i_n, \dots, i_{n-k+1})$$

Definamos $i_n^{(k)} = (i_n, \dots, i_{n-k+1})$, para simplificar notación de ahora en adelante. El número promedio de bits necesarios para codificar un estado adicional del sistema, cuando se conocen todos los estados previos, se obtiene al calcular la tasa de entropía:

$$h_I = \sum p(i_{n+1}, i_n^{(k)}) \log p(i_{n+1} | i_n^{(k)})$$

Sabemos que

$$p(i_{n+1} | i_n^{(k)}) = \frac{p(i_{n+1}, i_n^{(k)})}{p(i_n^{(k)})} = \frac{p(i_{n+1}^{(k+1)})}{p(i_n^{(k)})}$$

Por lo tanto

$$\begin{aligned} h_I &= \sum p(i_{n+1}, i_n^{(k)}) \log_2 \frac{p(i_{n+1}^{(k+1)})}{p(i_n^{(k)})} \\ &= \sum p(i_{n+1}^{(k+1)}) \log_2 p(i_{n+1}^{(k+1)}) - \sum p(i_n^{(k)}) \log_2 p(i_n^{(k)}) \end{aligned}$$

Este último resultado es la diferencia de entropía entre un proceso con $k + 1$ pasos y otro con k , tal que

$$h_I = H_I^{(k+1)} - H_I^{(k)}$$

Cuando se piensa en la dinámica del flujo de información es mejor partir del concepto de tasa de entropía y generalizarlo a más de un sistema, esto es por que la dinámica del proceso está contenida en la probabilidad de transición. La manera más directa de construir una tasa de información mutua al generalizar h_I para dos procesos (I, J) , es midiendo la desviación del resultado para un caso donde se da la independencia. Sin embargo, la entropía de Kullback correspondiente es simétrica ante el intercambio de I y J . Es por lo tanto preferible medir la desviación a partir del proceso generalizado de Markov.

$$p(i_{n+1} | i_n^{(k)}) = p(i_{n+1} | i_n^{(k)}, j_n^l)$$

Usando la suposición de que no hay flujo de información dirigido de J a I quiere decir que el estado J no tiene influencia sobre las transiciones de probabilidad en el estado I , dicha suposición puede ser cuantificada por la entropía de Kullback, de manera tal que

obtenemos la *transferencia de entropía*

$$T_{J \rightarrow I} = \sum p(i_{n+1}, i_n^{(k)}, j_n^l) \log_2 \frac{p(i_{n+1} | i_n^{(k)}, j_n^l)}{p(i_{n+1} | i_n^{(k)})}$$

o

$$T_{J \rightarrow I} = \sum_{u_n} p(u_n) \log_2 \frac{p(i_{n+1} | i_n^{(k)}, j_n^l)}{p(i_{n+1} | i_n^{(k)})} \quad (2.1)$$

Donde n es un índice temporal, u_n representa la tupla $(i_{n+1}, i_n^{(k)}, j_n^l)$ e $i_n^{(k)}$ representa los k estados pasados de I hasta un valor determinado i_n . Para asegurar que no se confunda la información de los estados pasados del destino con la transferencia de información de la fuente, debemos tomar el límite $k \rightarrow \infty$. Esta condición es la que asegura que la transferencia de entropía (TE) es una medida de información predictiva, direccional y dinámica, tal que es una medida que resalta la correlación entre las partes pero no necesariamente provoca un efecto directo en la transición.

Podemos ver que la cantidad $T_{J \rightarrow I}$ es capaz de detectar el intercambio direccional de información entre los dos procesos I y J al medir el grado de dependencia de J sobre I , por lo que es una medida no-simétrica. A diferencia de la información mutua, la transferencia de información está diseñada para ignorar las correlaciones estáticas provenientes de la historia común de ambos procesos.

Aceptaremos la definición de transferencia de entropía propuesta por Schreiber [4] como una medida de la transferencia de información. Sin embargo para fortalecer dicha aseveración se debe definir una medida local de la transferencia de entropía, con la cual será evidente que existen estructuras informacionales reconocidas como agentes transmisores de información y que serán evidenciadas por la medida local pero pasan desapercibidas para el promedio sobre el ensemble. Estas estructuras son locales espacial y temporalmente, por lo que la transferencia de entropía como es propuesta no es capaz de hacer evidentes estas interacciones. Hacemos notar que las medidas locales nos pueden ayudar a entender la dinámica de sistemas no-lineales, asimismo al estudiar medidas locales y no el promedio, se facilitan los cálculos de probabilidades condicionales.

2.1. Transferencia de Entropía Local

Para definir nuestra medida local primero notamos que la suma en (2.1) es sobre todas las posibles tuplas que produzca la transición, cada una con una probabilidad asociada $p(u_n)$. La probabilidad $p(u_n)$ es equivalente al número de ocurrencias de cada tupla $c(u_n)$ dividido por el número total de observaciones N : $p(u_n) = \frac{c(u_n)}{N}$. Entonces

$c(u_n) = \sum_{a=1}^{c(u_n)} 1$, donde cada tupla tiene un numero asociado de apariciones en el espacio de posibilidades. Al sustituir estas relaciones en la expresion para la transferencia de entropía tenemos

$$T_{J \rightarrow I} = \frac{1}{N} \sum_{u_n} \left(\sum_{a=1}^{c(u_n)} 1 \right) \log_2 \frac{p(i_{n+1} | i_n^{(k)}, j_n^l)}{p(i_{n+1} | i_n^{(k)})}$$

La doble suma corre sobre todas las observaciones a que se presentan para cada tupla posible, lo cual es equivalente a una suma sobre las N posibilidades

$$T_{J \rightarrow I} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \log_2 \frac{p(i_{n+1} | i_n^{(k)}, j_n^l)}{p(i_{n+1} | i_n^{(k)})}$$

Lo que es indicativo de que la medida transferencia de entropía es el valor esperado de una transferencia de entropía local en cada observacion

$$T_{J \rightarrow I} = \langle t_{J \rightarrow I}(n + 1, k, l) \rangle$$

$$t_{J \rightarrow I}(n + 1, k, l) = \log_2 \frac{p(i_{n+1} | i_n^{(k)}, j_n^l)}{p(i_{n+1} | i_n^{(k)})}$$

La cual es una medida local por que esta definida a un tiempo n para cada elemento en el destino I y cada fuente de informacion causal J .

Para hacer un analisis adecuado de las medidas locales consideremos a un automata celular (AC). Este es representado como un conjunto de elementos ordenados de manera contigua en un arreglo que delimita una celda de la otra. Ayudara considerar la siguiente notacion $I_m(t) = I_{m,t}$ la cual indica el estado de la celda m al tiempo t , tal que el siguiente estado de esa misma celda sera $I_m(t + 1) = I_{m,t+1}$.

Usando la notacion propuesta en el parrafo anterior, si queremos conocer la transferencia local de informacion del estado I_m al tiempo $n + 1$ debido al valor de la fuente I_{m-s} , ubicada s celdas en cualquier direccion del destino, tenemos entonces la transferencia aparente de entropía local en el caso del AC

$$t(m, s, n + 1, k) = \log_2 \frac{p(i_{m,n+1} | i_{m,n}^{(k)}, j_{m-s,n})}{p(i_{m,n+1} | i_{m,n}^{(k)})} \quad (2.2)$$

Sin embargo TE puede también ser condicionada por otras fuentes de información causal, en general esto significa que tendremos todas las fuentes Z que se correlacionan con I , sin incluir a la fuente J , tal que un conjunto v de estas nuevas fuentes contribuye a cambiar el estado del destino de manera directa al tiempo n . En analogía con lo anterior, pero considerando las nuevas fuentes, tendremos la transferencia de entropía completa local, con $v_{i,n}^j$ que denota todas las fuentes causales de Z que pueden influir en el destino sin incluir las de J . Para contextualizar con el AC consideramos en la notación su ubicación en el enrejado y r el rango de vecinos que afectan a cada celda.

$$t^c(m, s, n + 1, k) = \log_2 \frac{p(i_{m,n+1} | i_{m,n}^{(k)}, j_{m-s,n}, v_{m,s,n}^r)}{p(i_{m,n+1} | i_{m,n}^{(k)}, v_{m,s,n}^r)} \quad (2.3)$$

Al definir una medida local se pretende caracterizar la transferencia de información entre cada punto espacio-temporal, evitando así el promedio sobre todo el espacio de configuraciones. Las medidas locales nos darán información trascendente referente a la dinámica de sistemas no lineales o complejos. Como podemos notar la transferencia de entropía local puede facilitar nuestro estudio de cómo son condicionados los estados pasados del destino al verse afectados por una o varias fuentes causales.

Cabe resaltar que la transferencia de entropía promedio está restringida a valores positivos entre 0 y $\log b$ con b el número de posibles estados accesibles al sistema, sin embargo la medida local de transferencia de entropía no tiene estas limitantes, puede ser mayor que $\log b$ e incluso abarcar valores negativos. Valores negativos para la transferencia local de entropía en el contexto de las probabilidades condicionales, indican que la probabilidad de predecir el próximo estado en el destino considerando la información que la fuente proporciona $p(i_{m,n+1} | i_{m,n}^{(k)}, j_{m-s,n}^l)$ es menor que la probabilidad de predecir el destino al solo considerar los procesos pasados en el destino $p(i_{m,n+1} | i_{m,n}^{(k)})$, lo que nos indica que la fuente está desinformada con respecto a la transición.

Al considerar al automata celular estamos aprovechando que existen ciertas estructuras que en diversos artículos son referenciadas como agentes capaces de transmitir información, dichas estructuras emergentes en los AC, son llamadas: *partículas*, *planeadores* y *dominios* y tienen diferentes características en lo referente a la evolución temporal en el arreglo. Haremos una descripción breve de las mismas y en el siguiente apartado mostraremos que ciertamente son agentes de cambio en la dinámica del sistema.

- Dominio: Invariancia temporal. Existe un patrón que se repite a cada paso a menos que exista alguna perturbación.
- Partículas: Estructura localizada que se propaga en el entorno.

- Planeadores: Son part culas que se repiten periodicamente.

La transferencia de entropía local nos ayuda a determinar los patrones emergentes mencionados anteriormente, pero se deben considerar valores grandes de k para tener posibilidad de aproximar la función de distribución de probabilidad de manera apropiada.

Algunas cuestiones a resaltar es que la medida local no está condicionada por referencias espaciales arbitrarias, sino que evoluciona conforme pasa el tiempo y lo más importante es que permite observar la transferencia de información en cualquier canal o dirección sin que se pierdan otras características del proceso en estudio.

Una de las limitantes de la medida TE es que las fuentes con las que se condiciona al sistema, deben ser causales únicamente, de no ser así se corre el riesgo de confundir correlación con transferencia de información o desestimar información que sí fue parte de la transferencia

Diferencias entre transferencia de información y efecto causal

En la actualidad existe un gran interés en la noción de transferencia de información, concepto ampliamente aplicado en las ciencias de la complejidad. En general el concepto de transferencia de información puede ser interpretado como una señal proveniente de una fuente y que transmite información a un destinatario. En la literatura se suelen relacionar: efecto causal y transferencia de información, como conceptos equivalentes para referirse a la transferencia de información predictiva, sin embargo esto es incorrecto [7]. Existe una relación entre transferencia predictiva y la correlación con los constituyentes así como el efecto causal se relaciona con la causalidad como un efecto de la fuente sobre el destino, lo cual indica que existe una diferencia entre las dos.

Pretendemos entonces delimitar las diferencias entre transferencia predictiva y efecto causal, usando dos medidas muy socorridas en teoría de la información: transferencia de entropía y flujo de información, las cuales nos ayudarán a identificar las características (o propiedades) de estos dos conceptos, así como de contrastarlos y de distinguir similitudes o diferencias entre los mismos.

Transferencia de información predictiva se refiere a la cantidad de información que la fuente agrega al siguiente estado del destinatario, es decir, si conozco el estado de la fuente, ¿qué tanto ayuda esto a predecir el estado del destinatario? Lo cual se puede pensar como una serie de datos que se transmiten a una computadora, agregando así, información que puede o no ser capaz de ayudar a la predicción de la transición. Por otro lado, el efecto causal se refiere a que tanto la fuente influye en el estado posterior del destinatario, es decir, si cambio el estado de la fuente ¿qué tan visible será este cambio en el estado posterior del destino? Como el nombre lo indica, la fuente proporcionará una causa que producirá un cambio en la transición.

Para este análisis haremos uso del automata celular mas basico, el automata celular elemental (ACE). Este es un arreglo en una dimension compuesto por celdas, cada una de ellas con dos posibilidades o estados binarios y la relacion funcional que existe entre los estados (valor de la celda) y sus vecinos inmediatos (el vecino de la derecha y de la izquierda).

Considerando un arreglo inicial del ACE y tomando en cuenta las caracter sticas mencionadas, tres celdas contiguas pueden configurarse de 8 maneras diferentes, es decir, 2^3 posibilidades y si le asignamos un valor binario (0 y 1) a cada una de ellas tal que asignando una regla arbitraria a la cual se le denomina *ruleset* (conjunto de reglas), podemos preguntarnos que tantas formas existen de obtener un conjunto de reglas para el ejemplo de ACE que buscamos definir, en este caso sabemos que un *ruleset* es un conjunto de 8 numeros binarios tal que $2^8 = 256$ diferentes configuraciones de *ruleset*.

Esas 256 configuraciones para el ACE acorde a la complejidad de la evolucion de su comportamiento, se pueden caracterizar en 4 clases:

- Clase I: Los valores de todas las celdas tienden a un mismo estado, lo cual puede ser relacionado con un estado estacionario o de equilibrio. La informacion inicial se pierde.
- Clase II: Cuando los valores oscilan entre cero y uno formando un patron.
- Clase III: No existe un patron, el sistema evoluciona de manera caotica.
- Clase IV: Patron que no es predecible. Formacion de estructuras locales que pueden sobrevivir por largos periodos de tiempo

Queremos en nuestro caso adentrarnos en la clase de automata celular en el que la estructura que surge de la "evolucion" del sistema genere una dinamica compleja, es decir, al paso del tiempo emerge una configuracion en que cada actualizacion de los estados microscopicos no es relevante pero en conjunto nos proporciona las bases para entender el computo macroscopico llevada a cabo en el AC.

Sabemos que en sistemas como el AC emergen estructuras como lo son las part culas, gliders y dominio. El dominio se puede considerar como un conjunto de reglas que regulan las configuraciones en el AC tal que en ausencia de alguna perturbacion siguen vigentes las reglas anteriores. Las part culas son estructuras localizadas que se propagan por el enrejado del automata celular y los planeadores son part culas que se repiten de manera periodica en el tiempo mientras se mueven espacialmente. Formalmente las part culas estan definidas como los l mites entre dos dominios.

3.1. Transferencia de Información Predictiva

Transferencia de entropía es una medida diseñada para determinar la direccionalidad de la transferencia de informacion entre dos procesos, al detectar la asimetría entre sus

interacciones. Específicamente, la transferencia de entropía $T_{J \rightarrow I}$ mide la cantidad promedio de información que el estado j_n (al tiempo n) que el proceso fuente J transmite al estado i_{n+1} (para el tiempo $n + 1$) del proceso destino I , conociendo previamente el estado i_n del proceso destino, lo cual tiene la siguiente forma matemática.

$$T_{J \rightarrow I}(k, l) = \sum_{u_n} p(u_n) \log_2 \frac{p(i_{n+1}|i_n^{(k)}, j_n)}{p(i_{n+1}|i_n^{(k)})}$$

Para asegurar que no se confunda la información de los estados pasados del destino con la transferencia de información con la fuente, debemos tomar el límite $k \rightarrow \infty$. Esta condición es la que asegura que TE es una medida de información predictiva, direccional y dinámica, tal que es una medida que resalta la correlación entre las partes pero no necesariamente un efecto directo.

Se sabe que TE es un promedio de la medida local a todo tiempo n , donde la medida local es

$$t_{J \rightarrow I}(n + 1, k) = \log_2 \frac{p(i_{n+1}|i_n^{(k)}, j_n)}{p(i_{n+1}|i_n^{(k)})}$$

En sistemas deterministas, como lo es el automata celular, al condicionar el destino a todas las posibles fuentes causales implica $t_{J \rightarrow I}^c(n + 1, k) \geq 0$, por lo que, si conocemos todas las fuentes que pueden producir un efecto en la transición del destino, entonces el numerador es $p(i_{n+1}|i_n^{(k)}, j_n, v_n^r) = 1$ en (2.3) y el denominador menor o igual que 1, por lo que es claro que la transferencia completa será siempre positiva cuando se consideren todas las fuentes causales. Cálculos condicionados a una fuente como en (2.2) pueden tener, tanto valores positivos como negativos.

Es importante notar que la entropía local $h(m, n + 1) = \log_2 p(i_{m,n+1})$ requerida para predecir el siguiente estado en el destino al tiempo $n + 1$ puede ser descompuesto como la suma

- la información que se gana al conocer los estados pasados del destino más
- la información que se transmite de cada fuente causal, tal que cada fuente está condicionada con respecto a las anteriores, más
- alguna incertidumbre intrínseca que no es posible impedir conociendo lo anterior.

Por ejemplo en el automata celular elemental, no existe incertidumbre intrínseca, los valores de los estados están apropiadamente determinados. La información que necesitamos para predecir el siguiente estado de alguna celda es la suma de la información ganada al conocer sus estados pasados más la información que no está contenida en el pasado del

destino, proveniente de la celda adyacente, mas la informacion proveniente de otra fuente que no tiene relacion con los pasados del destino ni la primera fuente.

3.2. Efecto Causal

Es interesante identificar el flujo de informacion, en el sentido en como la informacion es procesada en algun sistema. Medidas como la informacion mutua miden correlaciones en el sistema pero esto no es suficiente para determinar flujo de informacion, se necesita causalidad. Por ejemplo, diferentes partes de un sistema pueden estar compartiendo informacion pero no necesariamente existe un flujo entre ellas, es decir la informacion de los subsistemas tienen un pasado en comun pero el flujo es debido a una causa que motiva al sistema a cambiar. [13]

Para aclarar este punto recurramos a un ejemplo cotidiano: queremos conocer el flujo de materia en un río, para esto necesitamos algun activo que sea capaz de destacarse en el flujo de agua, tal que podamos conocer la direccion del mismo. Para que el activo destaque debe tener propiedades que no son propias del río. De manera analoga podemos pensar en un metodo para rastrear flujo de informacion en un sistema al producir una perturbacion que no este correlacionada con las variables del sistema y despues se mide la informacion en el sistema, ahora perturbado. Ya que la perturbacion no tiene relacion con el sistema sin perturbar, cualquier informacion mutua encontrada sera un indicador de flujo de informacion.

Para ser capaces de medir causalidad en un sistema, es necesario que la fuente perturbe de manera directa al destino, si pretendemos argumentar causalidad sin esto, estaremos midiendo correlaciones entre la fuente y el destino pero no podremos percatarnos de la bidireccionalidad del proceso. Haciendo uso de la formulacion probabilistica de Pearl se puede definir matematicamente a la medida de flujo de informacion, con la probabilidad condicional impositiva $p(a|\hat{s})$, esto implica que \hat{s} interfiere de alguna manera con a , lo cual es en esencia la definicion de flujo de informacion causal. Las probabilidades intervencionistas son definidas, a diferencia de las probabilidades condicionales estandar, por algun mecanismo en lugar de alguna observacion.

Para construir una medida de la dependencia causal, se toma en cuenta la divergencia de Kullback-Leibler. En este caso se busca la divergencia entre la dependencia causal y la independencia causal intervencionistas. La independencia causal se da cuando: conocemos a despues de obtener informacion de s y esto, no cambia la probabilidad de observar b , lo que corresponde a

$$p(b|\hat{a}, \hat{s}) = \sum_{a'} p(a'|\hat{s})p(b|a', \hat{s}) \quad (3.1)$$

A diferencia de la probabilidad condicional $p(b|a, s)$ la intervencionista $p(b|\hat{a}, \hat{s})$ esta definida para todos los pares s, a y no solo se limita a los valores positivos $p(a, s)$. Esto es debido a que la probabilidad intervencionista es definida por un mecanismo y no en una observacion. Si podemos conseguir dicha condicion, se dice que B es causalmente independiente de A al imponerse S , para todos los pares de s, a .

Ay y Polani proponen la medida de flujo de informacion [13] de manera analoga a la definicion de TE usando probabilidades como las que se mencionaron en parrafos anteriores. En este caso el flujo de informacion puede ser definido, como la contribucion causal de A a B si imponemos \hat{S} . Matematicamente esto se puede escribir

$$I_p(A \rightarrow B|\hat{S}) = \sum_s p(s) \sum_a p(a|\hat{s}) \sum_b p(b|\hat{a}, \hat{s}) \log_2 \frac{p(b|\hat{a}, \hat{s})}{\sum_{a'} p(a'|\hat{s})p(b|\hat{a}', \hat{s})} \quad (3.2)$$

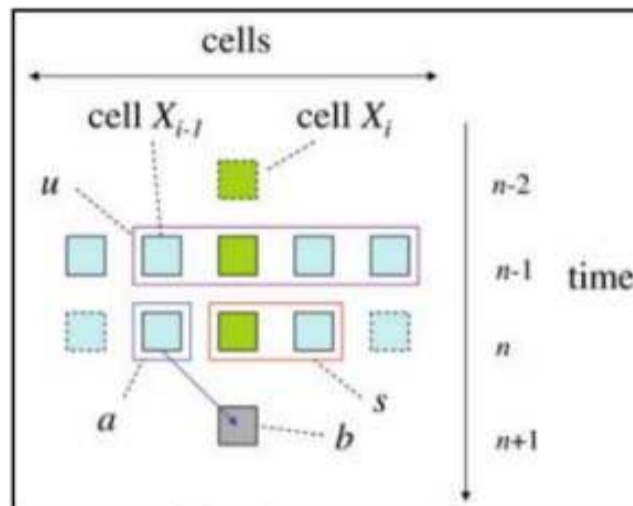
La probabilidad intervencionista es capaz de incluir situaciones de dependencia causal que no eran evidentes, al inducir un cambio por medio de un mecanismo, pertinente para cada caso en particular. Cabe resaltar que la propiedad de independencia causal no es simetrica lo cual es consistente con el entendimiento intuitivo que tenemos de causalidad como una medida direccional.

El valor de la medicion es dependiente de la seleccion de nodos S que impongan un cambio. Estamos interesados en medir el flujo directo de informacion causal de A a B , as que debemos incluir todas las fuentes posibles de S , que logren bloquear cualquier vinculo causal entre A y B , tal que sean los nodos de S los encargados de determinar la transicion. Una manera de lograrlo es considerar todos los estados pasados de B que son fuentes causales y cualquier otra fuente causal, sin incluir A . Podemos expresar esto de manera analoga a como definimos los contribuyentes causales $v_{i,n}^j$ en transferencia local completa, definiendolos en este contexto como $s_{i,n}^j = (x_n, v_{i,n}^j)$

Para esquematizar el flujo de informacion atravesando las celdas al considerar el ejemplo del ACE, podemos tomar en cuenta el esquema que se muestra en la imagen 3.1, donde $a = x_{i-1,n}$ representa a la fuente, $b = x_{i,n+1}$ es el destino y los nodos son $s = (x_{i,n}, x_{i+1,n})$, lo cual es una descripcion pictorica que facilita el entendimiento del proceso en cuestion.

Ciertamente uno de los mayores retos para calcular $I_p(A \rightarrow B|\hat{S})$ es como determinar la probabilidad condicional en (3.1). Una alternativa es tener un entendimiento detallado de la dinamica, por ejemplo el tener un conocimiento de la estructura de los nodos causales o cuales son las reglas que rigen las interacciones causales, sin embargo esto no siempre es posible.

Figura 3.1: Esquema de flujo de información en un ACE



Podemos definir una medida local para el flujo de información como:

$$f(a \rightarrow b|\hat{s}) = \log_2 \frac{p(b|\hat{a}, \hat{s})}{\sum_{a'} p(a'|\hat{s})p(b|\hat{a}', \hat{s})} \quad (3.3)$$

Se puede interpretar como el efecto causal que tiene a en b cuando se impone \hat{s} . La obtención de la medida local es similar a como lo hicimos con la transferencia de entropía, pero en este caso $I_p(A \rightarrow B|\hat{S})$, no es el valor esperado de los valores locales $f(a \rightarrow b|\hat{s})$. A diferencia de TE el flujo de información es un promedio sobre un producto de probabilidades condicionales intervencionistas ($p(s)p(a|\hat{s})p(b|\hat{a}, \hat{s})$). Por esta diferencia la medida local, en este caso, no es referente a cierta observación al tiempo n , sino a la configuración (a, b, s) al tiempo n .

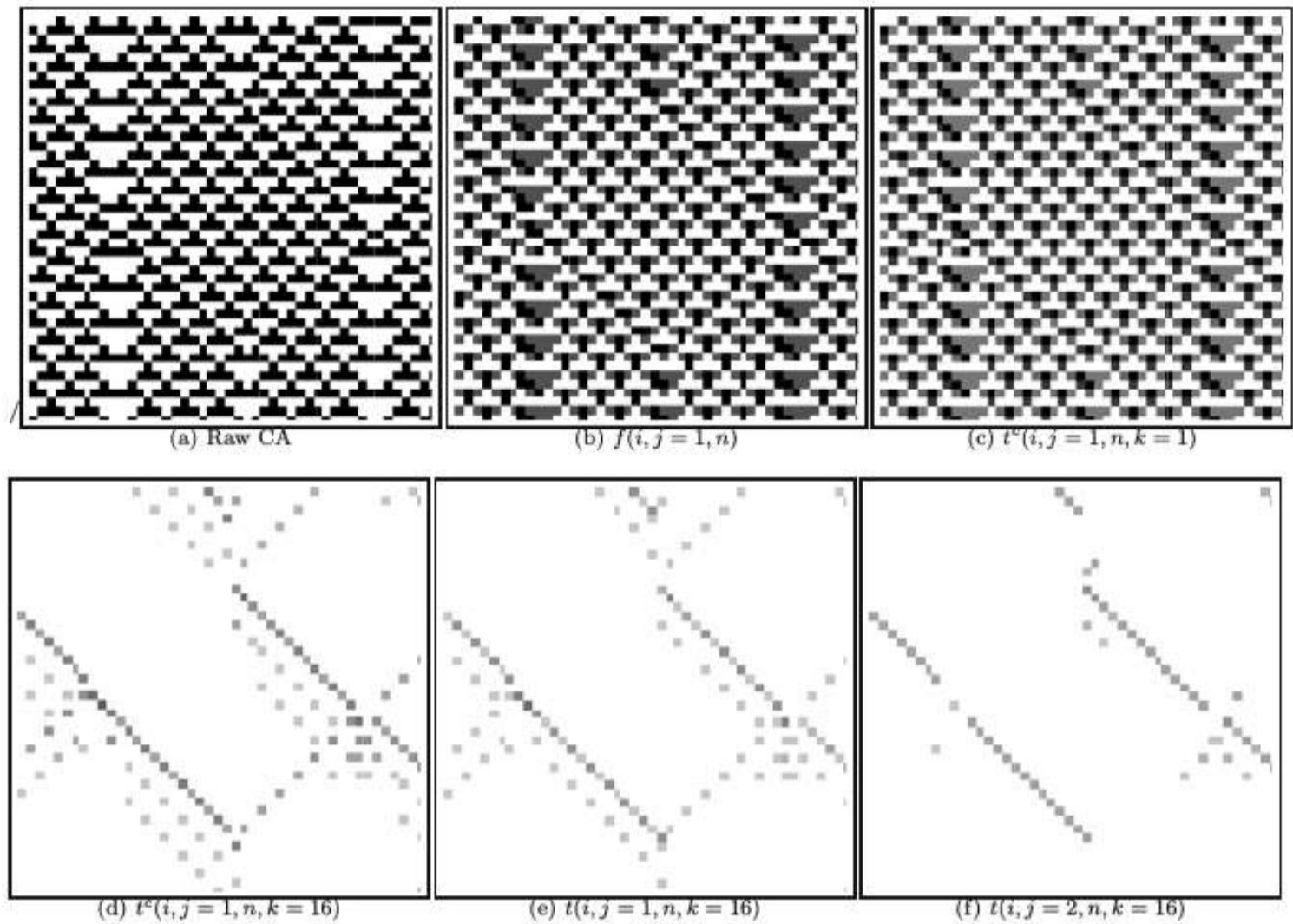
3.3. Aplicación al Autómata Celular

Consideremos el ACE, regla 54, en este caso considerando cada celda un micro volumen que como ya sabemos tiene dos estados posibles: activo 1 y en reposo 0. Si un estado se ve perturbado de alguna manera, dicha perturbación se transmite a los vecinos de la celda contigua. Por ejemplo, la transición $100 \rightarrow 1$ se refiere a un "mecanismo de activación" si la celda a la izquierda de una celda en "reposo" se ve perturbada, esto nos indica que la celda en reposo se excitara. Asimismo la transición $000 \rightarrow 0$ indica que el sistema no se puede activar a sí mismo. En este caso las transiciones más importantes pueden ser: $111, 110, 011 \rightarrow 1$.

Al referirnos al ACE podemos interpretar estos arreglos de la siguiente manera: si un estado excitado tiene al menos un vecino que también ha sido perturbado entonces la celda mantiene el mismo valor, lo cual puede ser interpretado como una inhibición mutua entre las celdas contiguas o estado estacionario.

Pretendemos usar las medidas locales de transferencia de entropía y flujo de información para hacer un análisis del arreglo provisto en el ACE consistente con la regla 54.

Figura 3.2: ACE 54



Si consideramos el dominio en la imagen inferior donde cada celda se actualiza periódicamente entre los estados binarios, tal que podemos notar un patrón que una celda por sí misma no podrá lograr sin que estas celdas interactúen de alguna manera (efecto causal).

Nos enfocamos en el dominio de la imagen, tal que al darnos en la figura, podemos notar en 3.2d y 3.2e que la transferencia local aparente y completa se desvanecen en la región del dominio y en 3.2b notamos que el flujo de información muestra un patrón producto del efecto causal, muy similar al mostrado en la figura 3.2a.

Ambos resultados son correctos pero deben ser interpretados bajo diferente perspectiva. Desde la visión de transferencia predictiva de información, las celdas están almacenando información, lo cual indica que el futuro del proceso está completamente determinado por los estados pasados del destino, lo cual parece natural ya que cada celda se encuentra en un proceso periódico y las fuentes que puedan correlacionarse no agregan nada a esta predicción, por lo que se desvanece la transferencia de información. Desde otra perspectiva es claro que la medida de flujo de información detecta causalidad, la cual se ve evidenciada en los patrones que se forman. De manera que transferencia de entropía no logra detectar efectos causales pero la otra medida sí es capaz de ello.

Si ahora nos enfocamos en los planeadores, notamos que transferencia de entropía local hace evidente que existe transferencia de información en la dirección de movimiento de los mismos, es decir, los estados de las celdas dentro de la región que comprende al planeador son más capaces de transmitir información que los estados previos del destino, esta es la razón por la que los planeadores son considerados, en AC, transmisores de información de un punto espacio-temporal en el arreglo a otro. Desde la perspectiva causal el imponer una fuente tendrá un efecto en el destino del planeador, sin embargo el flujo de información al considerar el planeador no será muy diferente al que encontramos en el dominio, es decir, el flujo de información parece no diferenciar entre el agente transmisor de información y el dominio.

Podemos decir entonces que la perspectiva causal se enfoca en los detalles dinámicos a nivel micro, mientras que la perspectiva predictiva toma en cuenta las estructuras macroscópicas que emergen de la dinámica. Es el conociendo de los k estados previos del destino lo que le permite a la medida local de transferencia la visión macroscópica y las estructuras emergentes son solo identificables a esta escala. Por otro lado, el flujo de información no puede considerar los estados pasados del destino, ya que estos se ven bloqueados por los nodos que imponemos.

Una aclaración importante, es que la medida local predictiva que estamos discutiendo solo podrá ser considerada como transferencia de información cuando las fuentes son causales para el destino. Si las fuentes no son causales solo podemos predecir correlación entre las partes que no contribuyen directamente a la transferencia de información.

Estas dos medidas locales convergen cuando si se toman las siguientes consideraciones

- El parámetro k en la medida local de transferencia completa se restringe a solo el pasado inmediato como contribuyente causal de cada celda, en el caso del AC.
- Todas las combinaciones de (a, s) son observadas
- $p(a|\hat{s}) \equiv p(a|s)$, lo cual se puede dar cuando a es condicional y causalmente independiente de s

Solo la fuente j_n y el estado anterior i_n al estado destino i_{n+1} , contribuye causalmente a la transición, así que la transferencia de entropía completa está condicionada a las mismas fuentes que el flujo de información local, en términos matemáticos $p(b|\hat{a}, \hat{s}) \equiv p(b|a, s)$, lo que nos asegura que los numeradores en (3.3) y (2.3) son iguales. Por último se requiere que la fuente sea causal y condicionalmente independiente del pasado del destino i_n . Específicamente independencia causal significa $p(j_n) = p(j_n|\hat{i}_n)$ mientras que independencia condicional implica $p(j_n) \equiv p(j_n|i_n)$. Al cumplir con estos requerimientos la transferencia completa local y el flujo de información local son iguales

Debe notarse que las combinaciones (a, s) que no son observadas por $p(b|a, s)$ técnicamente no están definidas, lo cual no importa en el análisis local de ninguna de las medidas, pero es relevante en el flujo de información I_p , en este caso las probabilidades condicionales vuelven a ser intervencionistas y contribuyen a I_p .

Interpretación Termodinámica de la Transferencia de Entropía

Queremos dar una interpretación termodinámica del concepto: Transferencia de entropía (TE) [1]. Ayudados del principio de Boltzmann, término acuñado por Einstein en el que hizo uso de la probabilidad condicional para hablar de transiciones entre los micro-estados y también del concepto de entropía definido por Shannon [3]. TE fue propuesto por Schreiber [4] siendo este una medida que cuantifica la coherencia estadística de un sistema, concepto que se origina en el ámbito de teoría de la información. Más importante aún, tiene la ventaja de detectar asimetrías en la interacción de subsistemas, de manera tal que podemos destacar cuál de los subsistemas recibe más información y cuál la proporciona. Schreiber consideró varias medidas usadas con anterioridad para medir la direccionalidad de la transferencia de información y llegó a la conclusión que los métodos utilizados en ese entonces, eran inadecuados para definir una medida direccional de la transferencia de información entre dos procesos posiblemente acoplados. Transferencia de entropía ha sido utilizado en diversas aplicaciones para detectar apropiadamente transferencia de información en sistemas complejos.

Para poder cumplir con el objetivo de darle una interpretación termodinámica a TE, debemos usar las medidas de la teoría de la información explicadas en capítulos anteriores y en base a ellas ir construyendo una interpretación que sea más acorde a los conocimientos de un físico que a los de un estudiante de ciencias de la computación. Sabemos que transferencia de entropía es una medida basada en conceptos relacionados con la entropía de Shannon, la cual representa la incertidumbre asociada con cada medición x de una variable aleatoria I : $S(I) = -\sum_i p(i) \log_2 p(i)$, de manera tal que la entropía condicional de I dado J es la incertidumbre promedio asociada con cada medida de x cuando conocemos y . Podemos entonces ayudarnos de la entropía condicional definida de la siguiente manera: $S(I|J) = -\sum_{i,j} p(i,j) \log_2 p(i|j)$, para hablar así de un proceso en que una fuente

te externa produce un cambio en la forma de darse la transición. Se le llama información mutua entre I y J a la que mide la reducción en la incertidumbre del evento i , resultado de aprender el valor de j .

Tomando en cuenta lo mencionado, transferencia de entropía es una medida diseñada para determinar la direccionalidad de la transferencia de información entre dos procesos, al detectar la asimetría entre sus interacciones. Específicamente, la transferencia de entropía $T_{J \rightarrow I}$ mide la cantidad promedio de información que el estado j_n (al tiempo n) del proceso fuente J transmite al estado i_{n+1} del proceso destino I , conociendo el estado previo i_n del proceso destino. Podemos pensar en transferencia de entropía como una diferencia entre dos entropías condicionales

$$T_{J \rightarrow I}(k, l) = h_I - h_{I,J}$$

Lo cual puede ser interpretado como la diversidad de transiciones de estado posibles en el proceso destino menos una perturbación (o ruido) asociado a los estados de transición en el proceso destino al tomar en cuenta la fuente, la cual cambiara la forma de darse el proceso pero no sus estados inicial y final.

Tenemos que h_I es

$$h_I = \sum p(i_{n+1}, i_n^{(k)}) \log_2 p(i_{n+1} | i_n^{(k)})$$

y $h_{I,J}$ es la entropía condicional tomando en cuenta el estado de la fuente

$$h_{I,J} = - \sum p(i_{n+1}, i_n^{(k)}, j_n^{(l)}) \log_2 p(i_{n+1} | i_n^{(k)}, j_n^{(l)})$$

Según [4] tenemos que h_I es el número promedio de bits necesarios para codificar un estado adicional del sistema si todos los estados previos son conocidos y $h_{I,J}$ es el número promedio de bits necesarios para obtener la misma transición pero cuando el proceso es afectado por la fuente. Podemos escribir

$$h_I = - \sum p(i_{n+1}, i_n^{(k)}) \log_2 p(i_{n+1} | i_n^{(k)}) = - \sum p(i_{n+1}, i_n^{(k)}, j_n) \log_2 p(i_{n+1} | i_n^{(k)})$$

Tal que en la ausencia de flujo de información de J a I , tenemos que h_I es equivalente a $h_{I,J}$, es decir, la fuente no afecta de manera alguna a la transición en el estado destino, tal que la siguiente igualdad es válida y la TE es cero.

$$p(i_{n+1} | i_n^{(k)}) = p(i_{n+1} | i_n^{(k)}, j_n)$$

Nuestro propósito es, darle un significado termodinámico al concepto de transferencia de entropía, lo cual en realidad no es necesario al ser esta una medida de la transferencia

de información, pero, ya que los conceptos de entropía en mecánica estadística y teoría de la información están ligados, podemos explorar esta opción para darle una interpretación a este objeto de manera que sea más comprensible para un estudiante en física.

4.1. Definición del sistema

Consideremos un sistema cercano al equilibrio, a cualquier tiempo n , el estado termodinámico I es especificado por un vector $i \in R^d$ considerando d variables, como podrían ser: presión, temperatura, concentración química, etc. Un vector de estado describe completamente el macroestado del sistema. Un estado termodinámico es considerado como una entidad efectiva, así que es natural pensar que probabilidades de transición como $p(i_{n+1}|i_n)$ pueden ser utilizadas para representar un proceso de muestreo. Cada macroestado se representa por un gran número de microestados, consistentes con las características macroscópicas del sistema. Es importante resaltar que en la teoría de la termodinámica fuera del equilibrio, al igual que en la termodinámica clásica, los microestados correspondientes a un macroestado son equiprobables.

La entropía es una propiedad extensiva de un sistema termodinámico, recordando la interpretación de Clausius, el cambio en la entropía es igual a la integral de $\frac{dQ}{T}$ entre el estado inicial y final, calculado a través de cualquier trayectoria reversible que una a ambos estados. El cambio de entropía entre dos estados de equilibrio se define como:

$$S = S_b - S_a = \oint_a^b \frac{dQ}{T}$$

Si la trayectoria sigue un ciclo, es decir que su entropía inicial y final son la misma; el valor de la integral anterior es cero, lo cual es conocido como el teorema de Clausius. La entropía es una función de estado por lo tanto no importa la trayectoria reversible que se siga entre dos estados, la diferencia de entropía solo depende del estado inicial y el final.

Se dice que la entropía de un sistema es una medida del desorden y que el universo transita de "orden" a "desorden", así que la entropía siempre aumenta. La palabra desorden tiene un sentido técnico en el que al removerse una restricción obtenemos un arreglo con mayor cantidad de estados (microscópicos) accesibles pero que despliega una misma característica (macroscópica) termodinámica. Fue Jaynes [6] quien tiempo después demostró que la entropía termodinámica puede ser interpretada desde la perspectiva de la mecánica estadística como una medida de la carencia de información de los microestados cuando se conoce el macroestado.

La relación de los microestados con el macroestado se debe a Boltzmann con su famosa fórmula $S = k \log \Omega$, donde Ω es el número de microestados correspondientes a un macroestado cumpliendo con ciertas especificaciones, que fueron tratadas en el primer capítulo, el problema físico que Boltzmann pretendía resolver puede ser planteado de la siguiente manera: Se quiere conocer la distribución de N moléculas interactuando débilmente, en

un volumen V y con una energía E .

Debemos entonces fijar nuestra atención en la dinámica molecular a un tiempo dado, tal que a distintos tiempos "congelamos la imagen" y subdividimos el espacio en celdas a las cuales les asignaremos un valor arbitrario ϵ_i ; asumiendo que las moléculas son distinguibles, les asignamos valores de 1 hasta N . El resultado de esto es que tendremos una "foto" en la que el espacio subdividido tendrá una población n_i de moléculas a cierto tiempo, a esto lo denominaremos microestado, entonces conocemos cuántas moléculas hay en la celda ϵ_i y cuáles de ellas son, ya que estas son distinguibles entre sí. La distribución de las moléculas en las celdas depende de las condiciones iniciales del sistema, así que si conocemos los atributos macroscópicos E , V y N , energía, volumen y número de partículas respectivamente, entonces existe una variedad de microestados a distintos tiempos que cumplen con las características macroscópicas del sistema.

En tiempos de la segunda guerra mundial, cuando los criptoanalistas luchaban por descifrar los mensajes transmitidos por el enemigo, surgió la entropía de Shannon. La cual es una generalización de la entropía de Boltzmann que dio pie a la teoría de la información que ha ganado cada vez más adeptos desde el trabajo [3]. Shannon destacaba que un sistema secreto comprenda un número finito (aunque probablemente muy elevado) de posibles mensajes, un número finito de posibles criptogramas, y entre medio, transformándose una a la otra, un número finito de claves, cada una de ellas con una probabilidad asociada, es notable que este problema guarda cierta similitud con el problema que Boltzmann abordó en su tiempo, pero en este caso las probabilidades asociadas a cada letra la cual conforma el mensaje están relacionadas, es decir, si el idioma es inglés y la primera letra es una t , existe una probabilidad muy alta de que la siguiente letra sea una h , esto indica que existe una condicionalidad entre las variables que no puede ser evitada con la suposición de que todos los microestados son igualmente probables.

El concepto de entropía en mecánica estadística puede ampliarse al considerar ahora que cada posibilidad (letras si estamos hablando de mensajes, acorde a un idioma) tiene una densidad de probabilidad condicional, en este caso tenemos que esta es la entropía de Shannon, tal que en el caso particular en que los eventos son equiprobables obtenemos la entropía de Boltzmann.

$$S = K \sum_{k=1}^m p_i \log p_i \quad (4.1)$$

Para poder dar una descripción apropiada del concepto de transferencia de entropía necesitamos discutir una idea desarrollada por Einstein en la cual se hace uso del concepto de probabilidad de transición entre diversos estados. Considerando dos macroestados con entropía S , S_0 y probabilidad relativa W_r , la cual es la relación entre W y W_0 siendo estos el número de microestados correspondientes a algún macroestado del sistema con entropías S y S_0 respectivamente, lo cual matemáticamente se puede representar de la

siguiente manera $S - S_0 = k \log W_r$. Esta expresión es importante ya que, la probabilidad W_r es la probabilidad de transición de un estado a otro en el tiempo de evolución normal del sistema. En el ejemplo considerado por Einstein, S_0 es la entropía de un sistema en un estado de equilibrio limitado por un volumen V_0 con n partículas que no interactúan entre sí, tal que la dinámica del sistema es tal que no se favorece ninguna porción del volumen, mientras que S es la entropía de un sistema fuera del equilibrio, el cual consiste en el mismo número de partículas pero ahora confinados a un subespacio V de V_0 .

Otro concepto importante a resaltar para darle forma a la nueva interpretación de transferencia de entropía es la producción de entropía. En general, la variación de entropía en un sistema S es igual a la producción de entropía σ más el cambio de entropía debido a las interacciones con el exterior S_{ext} : $S = \sigma + S_{ext}$, en caso de estar considerando un sistema cerrado

$$S_{ext} = \int \frac{dQ}{T}$$

Considerando lo propuesto por Einstein y tomando en cuenta un sistema que evoluciona de un estado con entropía S_0 a uno con entropía S , podemos reagrupar términos de la siguiente manera

$$\sigma = S - S_{ext} = (S - S_0) - S_{ext}$$

Si la transición de S_0 a S es un proceso irreversible $\sigma > 0$. Si el proceso al ocurrir la transición es reversible $\sigma = 0$, por lo que:

$$S - S_0 = \int \frac{dQ_{rev}}{T}$$

Se busca construir una interpretación termodinámica para este concepto, ayudado de la idea propuesta por Einstein. Consideremos los siguientes escenarios, uno es el caso en que la entropía cambia solo debido a procesos reversibles y en el segundo caso la entropía cambia por un proceso irreversible debido a interacciones con el exterior, a pesar de tener los mismos estados inicial y final, la transición sigue diferentes trayectorias.

El primer caso en que el proceso es reversible, se relaciona una probabilidad de transición W_{r1} con la probabilidad condicional $p(i_{n+1}|i_n)$ de la siguiente manera, con Z_1 un factor de normalización.

$$p(i_{n+1}|i_n) = \frac{1}{Z_1} W_{r1}$$

Considerando el caso análogo al propuesto por Einstein, tomando en cuenta que en nuestro caso la transición transcurre del estado i_n al estado i_{n+1} :

$$S(i_{n+1}) - S(i_n) = k \log W_{r1}$$

Por lo que la probabilidad de transición es

$$W_{r_1} = e^{(S(i_{n+1})-S(i_n))/k}$$

Lo que nos lleva a

$$p(i_{n+1}|i_n) = \frac{1}{Z_1} W_{r_1} = \frac{1}{Z_1} e^{(S(i_{n+1})-S(i_n))/k} \quad (4.2)$$

Ahora considerando el caso irreversible, tomamos en cuenta otro vector de estado j con un estado termodinámico J el cual puede o no estar acoplado a I de manera tal que las transiciones que se puedan dar de un estado i_n a uno i_{n+1} al verse afectadas por j_n , lo que correspondera a algún número W_{r_2} , tal que $\sigma_j = k \log_2 W_{r_2}$, con σ_j siendo la producción de entropía interna del sistema debido a j .

$$p(i_{n+1}|i_n, j_n) = \frac{1}{Z_2} W_{r_2} = \frac{1}{Z_2} e^{\sigma_j/k}. \quad (4.3)$$

Procedemos entonces a intentar darle un significado termodinámico al concepto de transferencia de entropía (TE). Haremos uso de medidas locales, las cuales al igual que la TE pueden ser expresadas como la diferencia de dos entropías condicionales.

$$t_{J \rightarrow I}(n+1) = h(i_{n+1}|i_n) - h(i_{n+1}|i_n, j_n) \quad (4.4)$$

Considerando un proceso reversible el primer término de la ecuación (4.4), puede ser relacionado con $S(i_{n+1}) - S(i_n)$ de la ecuación (4.2) de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} h(i_{n+1}|i_n) &= -\log_2 p(i_{n+1}|i_n) = -\log_2 \frac{1}{Z_1} e^{(S(i_{n+1})-S(i_n))/k} \\ &= \log_2 Z_1 - \frac{1}{k \log 2} (S(i_{n+1}) - S(i_n)) \end{aligned} \quad (4.5)$$

Por lo que la entropía local condicional $h(i_{n+1}|i_n)$ corresponde al cambio en la entropía al darse la transición del estado i_n al estado i_{n+1} . Ahora, es necesario interpretar el segundo término $h(i_{n+1}|i_n, j_n)$ de la ecuación (4.4), en este caso la entropía condicional es perturbada por algún agente externo, sin embargo, debemos seguir considerando los mismos estados i_n e i_{n+1} , solo así podemos caracterizar el cambio interno en la entropía, el cual es compensado por la fuente j_n . Tomando en cuenta esto y la ecuación (4.3)

$$h(i_{n+1}|i_n, j_n) = -\log_2 p(i_{n+1}|i_n, j_n) = -\log_2 \frac{1}{Z_2} e^{\sigma_j/k} = \log_2 Z_2 - \frac{\sigma_j}{k \log 2} \quad (4.6)$$

Tomando en cuenta (4.5) y (4.6) podemos reescribir (4.4) de manera que:

$$t_{J \rightarrow I}(n+1) = \log_2 \frac{Z_1}{Z_2} - \frac{1}{k \log 2} (S(i_{n+1}) - S(i_n) + \sigma_j) \quad (4.7)$$

Considerando fluctuaciones pequeñas, cercanas al equilibrio, donde $Z_1 \approx Z_2$ tal que el número de microestados correspondientes al macroestado no se ve afectado considerablemente, podemos desestimar la constante aditiva y tomando en cuenta la expresión para el cambio de entropía, la ecuación (4.7) se puede reescribir como:

$$t_{J \rightarrow I}(n+1) = -\frac{S_{ext}}{k \log 2} \quad (4.8)$$

De manera que la transferencia de entropía es proporcional a la producción de entropía provocada por la intervención de la fuente J . Tenemos entonces que TE capta la diferencia entre dos tasas de entropía en dos escenarios, uno en que se lleva a cabo un proceso reversible y en el otro uno irreversible afectado por la fuente, como se mencionó anteriormente. No es, como su nombre lo indica, una transferencia de entropía es formalmente una diferencia entre dos tasas de entropía. El signo negativo en la ecuación (4.8) indica la dirección de la producción de entropía debido a la fuente J , cuando $S_{ext} > 0$ la entropía aumenta durante la transición más que la que se produce internamente y la transferencia de entropía local es negativa, por lo tanto, la fuente desinforma con respecto a la transición entre microestados correspondientes al macroestado, destino I .

Por otro lado, cuando $S_{ext} < 0$ la producción de entropía interna es mayor al llevarse a cabo la transición en I , una parte de esta se disipa al exterior, tal que la transferencia de entropía local es positiva y se pueden hacer mejores predicciones de la transición en el estado macroscópico I si conocemos J .

Podemos también darle un significado termodinámico a TE partiendo de la definición de Clausius de la entropía, sin embargo en este caso la probabilidad condicional $p(i_{n+1}|i_n) = \frac{1}{Z_1} e^{(S-S_0)/k}$ no significa que la probabilidad de transición sea $W_1 = e^{(S-S_0)/k}$.

Tomando en cuenta esto, la probabilidad condicional puede ser relacionada con un proceso en el que se transfiere energía en forma de calor, tal que, al considerar la ecuación (4.5)

$$h(i_{n+1}|i_n) = \log_2 Z_1 - \frac{S(i_{n+1}) - S(i_n)}{k \log 2} = \log_2 Z_1 - \frac{1}{k \log 2} \int_{i_n}^{i_{n+1}} \frac{dQ_{rev}}{T} \quad (4.9)$$

Sabemos que para un proceso reversible la integral tiene el mismo valor sin importar el camino que se tome, siempre y cuando los estados inicial y final sean los mismos. Podemos entonces considerar la transición del sistema $i_n \rightarrow i_{n+1}$ provista por una fuente, es decir el sistema acoplado a un baño térmico a temperatura T tal que ocurre la transición y el macroestado I alcanza un nuevo equilibrio la probabilidad condicional local $h(i_{n+1}|i_n)$ se refiere a la transferencia de energía calorífica que permite la transición que se comentó anteriormente. De manera análoga tomando en cuenta la ecuación (4.6)

$$h(i_{n+1}|i_n, j_n) = \log_2 Z_2 - \frac{\sigma_j}{k \log 2} = \log_2 Z_2 - \frac{1}{k \log 2} \int_{i_n \xrightarrow{j_n} i_{n+1}} \frac{dQ}{T} \quad (4.10)$$

Donde $i_n \xrightarrow{j_n} i_{n+1}$ es una trayectoria diferente entre $i_n \rightarrow i_{n+1}$ tomando en cuenta j_n lo cual da pie a una producción de entropía σ_j , es decir los estados inicial y final son el mismo pero la trayectoria se ve afectada por la fuente. Esto puede ser ilustrado como una fuente a la misma temperatura T pero considerando que el flujo de calor es a través de una resistencia térmica J tal que se da la transición deseada, en este caso como mencionamos anteriormente el proceso es irreversible. Ahora tomando en cuenta (4.9) y (4.10) podemos decir que la transferencia de entropía local es

$$t_{J \rightarrow I}(n+1) = \log_2 \frac{Z_1}{Z_2} + \frac{1}{k \log 2} \left(\int_{i_n \xrightarrow{j_n} i_{n+1}} \frac{dQ}{T} - \int_{i_n}^{i_{n+1}} \frac{dQ_{rev}}{T} \right) \quad (4.11)$$

Considerando un proceso cuasi estático $Z_1 \approx Z_2$ la constante aditiva en (4.11) puede desestimarse. Si consideramos la transición cuando la resistencia es cero, podemos decir que es un proceso reversible, tal que la fuente j no afecta el cambio de entropía total del sistema y

$$\int_{i_n}^{i_{n+1}} \frac{dQ_{rev}}{T} = \int_{i_n \xrightarrow{j_n} i_{n+1}} \frac{dQ}{T}$$

Tal que la transferencia de entropía local $t_{J \rightarrow I} = 0$. Por el contrario, si el proceso es irreversible (la resistencia tiene un valor distinto de cero) $t_{J \rightarrow I} \neq 0$, de este modo podemos considerar que la transferencia de entropía local es igual al calor cedido o recibido por el sistema o sobre el sistema, desde el exterior.

4.2. Efecto Causal: Interpretación Termodinámica

Consideremos el efecto local que tiene la fuente j_n en el destino i_{n+1} cuando se impone $s = i_n$ como los estados pasados del destino.

$$f(a \rightarrow b|\hat{s}) = \log_2 \frac{p(b|\hat{a}, \hat{s})}{\sum_{a'} p(a'|\hat{s})p(b|\hat{a}', \hat{s})}$$

Las condiciones para que el flujo de información y la transferencia completa sean iguales fueron mencionadas en el capítulo anterior. Necesitamos que j_n e i_n sean los únicos contribuyentes causales. En un sentido termodinámico esto significa que no existe otra fuente que afecte la transición $i_n \rightarrow i_{n+1}$ aparte de j_n , al simplificar $p(i_{n+1}|\hat{j}_n, \hat{i}_n)$ y por último que la fuente j_n sea causal y condicionalmente independiente del destino i_n . De manera intuitiva la última condición implica que nada de lo que pase en el proceso I afecta al proceso fuente J .

Bajo estas consideraciones

$$f(j_n \rightarrow i_{n+1}|\hat{i}_n) = t_{J \rightarrow I}(n+1)$$

En el contexto de estas limitaciones los dos conceptos pueden representarse termodinámicamente, sin embargo si alguna de estas restricciones no se cumple la medida causal local (3.3) no logra reducirse y por lo tanto no se puede dar una interpretación termodinámica. La diferencia fundamental será que la transferencia local puede ser interpretada termodinámicamente al relacionarla con una fuente J que produce un cambio irreversible, mientras que la medida flujo de información es en general una medida que asume una intervención en el sistema de una manera particular.

Conclusiones

Desde la perspectiva de la teoría de la información hablamos de varias medidas que nos permiten describir la dinámica en sistemas complejos y las cuales utilizamos para definir la medida: transferencia de entropía y el flujo de información, siendo la primera capaz de identificar la transferencia de información tomando en cuenta la direccionalidad del proceso y con la segunda podemos identificar causalidad en un sistema.

Haciendo las consideraciones adecuadas se definen las medidas locales de transferencia de entropía y flujo de información, las que, se contrastan por medio de un automata celular, mostrando que convergen bajo ciertas restricciones. Por último se define un sistema y se llega a la conclusión de que transferencia de entropía bajo ciertas constricciones puede ser visto como la producción de entropía del sistema debido a la intervención de una fuente.

Transferencia de entropía es una herramienta que puede ser usada al analizar la bolsa de valores [8], donde identificando la dirección de la transferencia de información se puede detectar que compañía es más influyente.

Bibliografía

- [1] Prokopenko, M., Lizier, J.T. and Price, D.C. (2003) *On Thermodynamic Interpretation of Transfer Entropy*, Entropy Journal, Vol. 15, 8-15.
- [2] Ay, N. and Polani, D. (2006), *Information Flows in Causal Networks*, SFI working paper, 8-9.
- [3] Shannon, C.E. (1948), *A Mathematical Theory of Communication*, The Bell System Technical Journal, Vol. 27, 1-3.
- [4] Schreiber, T. (2000), *Measuring Information Transfer*, Physical Review Letters, Vol. 85 No 2, 1-3.
- [5] Bennett, C.H. (2003) *Notes on Landauer's principle, reversible computation, and Maxwell's Demon*. Studies in History and Philosophy of Science Part B: Studies in History and Philosophy of modern physics 34(3), 501-510.
- [6] Jaynes, E.T. (1957), *Information Theory and Statistical Mechanics*, Physical Review, Vol. 106 No 4, 620-630.
- [7] Lizier, J.T. and Prokopenko, M. (2010), *Differentiating information transfer and causal effect*, European Physical Journal B, Vol. 73, 605-615.
- [8] Baek, S.K., Kwon, O., Jung, W.S., Moon, H.T. (2005), *Transfer Entropy Analysis of Stock Market*, Korea Advanced Institute of Science and Technology.
- [9] Gleick, J. (2012) *La información*, Crítica, Barcelona.
- [10] García-Colín Scherer, L. *Introducción a la Física Estadística*, El Colegio Nacional, Mexico.
- [11] Szilard, L. (1929) *On the decrease of entropy in a thermodynamic system by the intervention of intelligent beings*, Zeitschrift für Physik, Vol 53, 840-856.

- [12] Wei Cai .: *Handout 7. Entropy*. Recuperado enero 2017, de http://micro.stanford.edu/~caiwei/me334/Chap7_Entropy_v04.pdf.
- [13] Nihat Ay y Daniel Polani (2008) *Information flow in causal networks*, Advances in Complex Systems, 17-41.