

VERSATILIDAD Y EFICIENCIA DE LOS AUTÓMATAS CELULARES PARA LA SIMULACIÓN Y ANÁLISIS DE SISTEMAS COMPLEJOS EN INGENIERÍA

Pablo Sánchez-Cuevas¹, Fernando Diaz-del-Rio¹, Daniel Cagigas-Muñiz¹, José-Luis Guisado-Lizar¹, Maria Jose Morón-Fernández¹, Pedro Real²

¹*Department of Computer Architecture and Technology. University of Seville. Spain.*

²*Department of Applied Mathematics I. University of Seville. Spain.*

E-mail de correspondencia: pabsancue@alum.us.es , { fdiaz, dcagigas, jlguisado, mjmoron, real }@us.es

RESUMEN

Los autómatas celulares se componen de un conjunto de celdas (generalmente simples) interactuantes que evolucionan en pasos discretos, formando un sistema dinámico. Sus aplicaciones son múltiples y en muy diversos campos, no sólo dentro de la ingeniería sino dentro de las ciencias sociales, la economía, la biología, o las ciencias en general. Actualmente son una de las mejores maneras de simular un problema espacio-temporal, donde la vecindad y colaboración entre agentes (celdas) sea clave y resulte finalmente en uno o varios fenómenos emergentes. Además, su ventaja es que son intrínsecamente paralelos, permitiendo predecir el comportamiento de sistemas complejos con entradas diversas en muy poco tiempo, al poder repartirlos fácilmente en múltiples procesadores o en GPUs (Graphic Processing Units).

Palabras clave: Cellular Automata; Computer Parallelism; Emergent Phenomena; Graphic Processing Units; Digital Images.

1. INTRODUCCIÓN

Los autómatas celulares (ACs) son un modelo de computación concebidos por Konrad Zuse y Stanislaw Ulam en la década de 1940 y luego desarrollado por Von Neumann. A diferencia de otros paradigmas de simulación como la dinámica de sistemas, los ACs presentan un conjunto de celdas que interactúan entre sí localmente mediante un conjunto de reglas simples. Al reproducir este comportamiento en el tiempo, finalmente se dan lugar un conjunto de fenómenos emergentes complejos. En la naturaleza se pueden encontrar diferentes ejemplos de emergencia, como los panales de abejas o los bancos de peces. Por último, los ACs permiten el modelado de sistemas complejos no-lineales de manera sencilla y eficiente. Esta eficiencia, como se discute en el Apartado 3, viene dada por el paralelismo implícito de los ACs, explotable mediante las plataformas de cómputo paralelas actuales. Como se

describe en [7], un modelo de ACs se puede diseñar mediante la especificación de sus cuatro componentes:

- 1) **Estado de las celdas.** Qué son las celdas que componen el sistema y cómo se define su estado: un valor escalar, un vector de valores (características) u otra estructura de datos.
- 2) **Espacio de celdas.** Es una discretización del espacio real, donde cabe definir la dimensionalidad (lo más común: 2 dimensiones), el número de celdas que contiene, las condiciones de borde (ej., periódico o no) y el enrejado.
- 3) **Vecindad entre celdas.** Bajo qué esquema se define la conectividad de las celdas entre sí. Ejemplos: Moore (4-conectividad), Von Neumann (8-conectividad), Margolus, etc.
- 4) **Reglas de transición.** Definen la lógica mediante la cual las diferentes celdas interactúan con sus respectivas celdas vecinas, dependiendo del estado de todas ellas en el instante t . Este proceso resultará, en paralelo, en el estado de cada celda en el instante $t+1$.

Cabe destacar que los modelos de ACs definen un conjunto de parámetros, usados en las reglas de transición. Dependiendo de los valores dados en dichos parámetros, las reglas definidas darán lugar a resultados diferentes a nivel local y, más importante, alterarán el comportamiento emergente del sistema. Es decir, dentro de un mismo modelo de ACs, habrá regiones del espacio de configuraciones (parámetros) donde el comportamiento emergente (1) converja hacia un estado, (2) oscile periódicamente entre varios estados o (3) se dé de manera caótica. Esta propiedad es usada para validar el modelo de ACs con los datos experimentales.

2. VERSATILIDAD DE LOS AUTÓMATAS CELULARES PARA LA SIMULACIÓN Y ANÁLISIS

En la literatura se puede comprobar cómo han resultado ser una herramienta útil para el modelado y simulación de sistemas complejos. En [7] se detallan tres sistemas físicos y químicos donde la aplicación los ACs resulta exitosa: la dinámica del láser, la recristalización dinámica (DRX) durante la deformación en metales, y la oxidación del monóxido de carbono catalizada en superficies. Se consigue reproducir los comportamientos emergentes de manera similar a cómo estos procesos se dan en la experimentación real. En [4] se propone un sistema híbrido entre ACs y mod-

elado basado en agentes para evaluar el despliegue de una red de estaciones de carga de vehículos eléctricos en casco urbano. El resultado de las simulaciones da a conocer cómo los cuellos de botella de tráfico que rodean a una estación de carga afectan críticamente al tráfico global. En [6] se hace uso de un modelado epidemiológico basado en autómatas celulares probabilísticos (PCA) aplicado a la transmisión del virus COVID-19 en una población humana. A partir de las simulaciones, los autores analizan la importancia en la propagación del virus (fenómeno emergente) de parámetros como, por ejemplo, las probabilidades de exposición, de infección, de recuperación... En [5] se aplica un modelo de ACs para la simulación de crecimiento de tejido tumoral y se estudia la relación entre dicho comportamiento con parámetros como la probabilidad de división de las células madre o la tasa de mortalidad de las células.

3. EFICIENCIA DE LOS AUTÓMATAS CELULARES

Desde el punto de vista de la computación, la ventaja de los ACs es que son intrínsecamente paralelos, permitiendo así distribuir su carga de cómputo en múltiples procesadores o en GPUs (Graphic Processing Units). Existen paquetes en su mayoría en lenguajes interpretados (como Python, OCTAVE/MATLAB, etc.) que permiten la descripción de las reglas de los ACs de una forma cómoda, aunque son muy lentos en comparación de un programa compilado y optimizado. Para aplicar optimizaciones, cabe primero señalar que un AC usa una matriz de celdas de gran tamaño, por lo que el tiempo de ejecución es casi proporcional al ancho de banda de la memoria principal si el cacheado de los elementos no es eficiente, como indica el modelo del tejado (Roofline model [3]). Por tanto, el cuello de botella son los accesos a memoria, por lo que se pueden aplicar las siguientes optimizaciones: 1) Reducción del tamaño de memoria usado mediante la codificación eficiente de los tipos de datos de los estados. Por ejemplo, implementar valores binarios usando un bit en vez de 32 (*int* en lenguaje C); 2) Se puede evitar copiar las matrices de estados actuales y siguientes alternando simplemente el valor de los punteros de dichas matrices; 3) *Spatial blocking*: en vez de recorrer la matriz de estados fila a fila, iterar dentro de teselas rectangulares cuyo tamaño se adecue al de la caché de nivel L2; 4) *Data pipelining*: Guardar en registros de CPU los estados de las celdas recorridas en la iteración anterior ya que, por vecindad, son celdas otra vez leídas en la iteración actual; 5) Aprovechar el paralelismo entre celdas para empaquetar datos y aplicar operaciones vectoriales; 6) Similarmente a las optimizaciones 1) y 5), se puede empaquetar datos de diferentes celdas a nivel de codificación. Por ejemplo: 3 celdas con estado de 5 bits se pueden codificar en un bloque de 16 bits, en vez de en 3 bloques de 8 bits; 7) Para procesar

en paralelo los estados de las celdas para varios instantes de tiempo, se puede dividir el espacio en teselas (del tamaño de la caché L2 de cada núcleo) e ir calculando en una primera etapa los estados futuros solo cuando la dependencia de datos proceda exclusivamente de las celdas de cada tesela. Aquellos estados futuros descartados son luego computados paralelamente en una segunda etapa [2]; 8) Transformar las operaciones condicionales (*if-else*) en operaciones aritméticas.

4. CONCLUSIONES

Los Autómatas Celulares presentan un conjunto de propiedades que son de gran interés dentro del campo del modelado y la simulación. Se comprueba sobre todo su versatilidad: la capacidad de reproducir sistemas no-lineales complejos y comportamientos emergentes complejos mediante la definición de un conjunto de reglas locales sencillas aplicadas a un espacio discreto de celdas. Desarrollados mediante distintas técnicas, los ACs presentan un cómputo muy eficiente al aprovechar los recursos hardware existentes en arquitecturas paralelas y distribuidas. En conclusión, cabe explorar la aplicación de estos modelos a un conjunto amplio de sistemas complejos en Ingeniería, Física, Química, Biología, Medicina...

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo ha sido financiado parcialmente por el Ministerio de Ciencia e Innovación y los fondos AEI/FEDER (EU) a través de los proyectos TIN2017-89842-P (MABICAP), PID2019-110455GB-I00 (Par-HoT), US-1381077 (CIUCAP-HSF).

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- (1) **Díaz-del-Río, F. Cagigas-Muñiz, Guisado-Lizar, Jose Luis Sevillano-Ramos.** (en prensa). Efficient Parallel Implementation of Cellular Automata and Stencil Computations in Current Processors. En: Advances in Computing, Informatics, Networking and Cybersecurity. Eds: Nicopolitidis, Misra, Yang. Lecture Notes in Networks and Systems. Springer-Nature.
- (2) **Cagigas-Muñiz, D., Díaz-del-Río, F., López-Torres, M. R., Jiménez-Morales, F., & Guisado, J. L.** (2020). Developing efficient discrete simulations on multicore and GPU architectures. *Electronics*, 9(1), 189. <https://doi.org/10.3390/electronics9010189>

- (3) **Williams, S., Waterman, A., & Patterson, D.** (2009). Roofline: an insightful visual performance model for multicore architectures. *Communications of the ACM*, 52(4), 65-76. <https://doi.org/10.1145/1498765.1498785>
- (4) **García-Suárez, A.; Guisado-Lizar, J.-L.; Díaz-del-Río, F.; Jiménez-Morales, F. A** Cellular Automata Agent-Based Hybrid Simulation Tool to Analyze the Deployment of Electric Vehicle Charging Stations. *Sustainability* 2021, 13, 5421. <https://doi.org/10.3390/su13105421>
- (5) **Poleszczuk J, Enderling H. A** High-Performance Cellular Automaton Model of Tumor Growth with Dynamically Growing Domains. *Appl Math (Irvine)*. 2014;5(1):144-152. doi:10.4236/am.2014.51017
- (6) **Ghosh S, Bhattacharya S.** Computational Model on COVID-19 Pandemic Using Probabilistic Cellular Automata. *SN Comput Sci*. 2021;2(3):230. doi: 10.1007/s42979-021-00619-3. Epub 2021 Apr 22. PMID: 33907736; PMCID: PMC8061453.
- (7) **Jiří Kroc & Francisco Jiménez-Morales & J. L. Guisado & María Carmen Lemos & Jakub Tkáč**, 2019."Building Efficient Computational Cellular Automata Models Of Complex Systems: Background, Applications, Results, Software, And Pathologies," *Advances in Complex Systems (ACS)*, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., vol. 22(05), pages 1-38, August