UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA

CENTRO DE INFORMÁTICA

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM INFORMÁTICA

ACELERAÇÃO DE AUTÔMATOS CELULARES NO CONTEXTO DE BIOLOGIA ATRAVÉS DE COMPUTAÇÃO PARALELA EM GPUS COM OPENCL

MAELSO BRUNO PACHECO NUNES PEREIRA

ORIENTADOR: PROF. DR. ALISSON VASCONCELOS DE BRITO

João Pessoa, Paraíba, Brasil

31 de Agosto de 2017

UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA

CENTRO DE INFORMÁTICA

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM INFORMÁTICA

ACELERAÇÃO DE AUTÔMATOS CELULARES NO CONTEXTO DE BIOLOGIA ATRAVÉS DE COMPUTAÇÃO PARALELA EM GPUS COM OPENCL

MAELSO BRUNO PACHECO NUNES PEREIRA

Dissertação submetida à Coordenação do Curso de Pós-Graduação em Informática da Universidade Federal da Paraíba como parte dos requisitos necessários para obtenção do grau de Mestre em Informática, área de concentração: Ciência da Computação

Orientador: Prof. Dr. Alisson Vasconcelos de Brito

João Pessoa, Paraíba, Brasil

31 de Agosto de 2017

Catalogação na publicação
Setor de Catalogação e Classificação

P436a Pereira, Maelso Bruno Pacheco Nunes.
Aceleração de autômatos celulares no contexto de biologia através de computação paralela em GPUS com OPENCL / Maelso Bruno Pacheco Nunes Pereira. – João Pessoa, 2017.
74 f. : il.

Orientador: Prof. Dr. Alisson Vasconcelos de Brito.
Dissertação (Mestrado) – UFPB/CI/PPGI

1. Ciência da computação. 2. Autômatos celulares (AC). 3. Aceleração (PRNG, SC). 4. Graphical Processing Unit (GPU). 5. Histograma. 6. Gerador de números pseudo-aleatórios. I. Título.

UFPB/BC CDU - 004(043)

UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA
CENTRO DE INFORMÁTICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM INFORMÁTICA

Ata da Sessão Pública de Defesa de Dissertação de Mestrado de Maelso Bruno Pacheco Nunes Pereira, candidato ao título de Mestre em Informática na Área de Sistemas de Computação, realizada em 31 de agosto de 2017.

Aos trinta e um dias do mês de agosto, do ano de dois mil e dezessete, às quatorze horas, no Centro de Informática da Universidade Federal da Paraíba, em Mangabeira, reuniram-se os membros da Banca Examinadora constituída para julgar o Trabalho Final do Sr. Maelso Bruno Pacheco Nunes Pereira, vinculado a esta Universidade sob a matrícula nº 2015105218, candidato ao grau de Mestre em Informática, na área de "Sistemas de Computação", na linha de pesquisa "Computação Distribuída", do Programa de Pós-Graduação em Informática, da Universidade Federal da Paraíba. A comissão examinadora foi composta pelos professores: Alisson Vasconcelos de Brito (PPGI-UFPB), Orientador e Presidente da Banca, Thais Gaudêncio do Rego (PPGI-UFPB), Examinador Interno, Jorge Gabriel Gomes de Souza Ramos (UFPB), Examinador externo ao programa, Elmar Uwe Kurt Melcher (UFCG), Examinador externo à instituição. Dando início aos trabalhos, o Presidente da Banca, cumprimentou os presentes, comunicou aos mesmos a finalidade da reunião e passou a palavra ao candidato para que o mesmo fizesse a exposição oral do trabalho de dissertação intitulado "Aceleração de autômatos celulares no contexto de biologia através de computação paralela em GPUs com OpenCL". Concluída a exposição, o candidato foi arguido pela Banca Examinadora que emitiu o seguinte parecer: "***aprovado***". Do ocorrido, eu, Clauirton de Albuquerque Siebra, Coordenador do Programa de Pós-Graduação em Informática, lavrei a presente ata que vai assinada por mim e pelos membros da banca examinadora. João Pessoa, 31 de agosto de 2017.

Prof. Dr. Clauirton de Albuquerque Siebra

Prof. Dr. Alisson Vasconcelos de Brito
Orientador (PPGI-UFPB)

Prof. Drª. Thais Gaudêncio do Rego
Examinador interno (PPGI-UFPB)

Prof. Dr. Jorge Gabriel Gomes de Souza Ramos
Examinador externo ao programa (UFPB)

Prof. Dr. Elmar Uwe Kurt Melcher
Examinador externo à instituição (UFCG)

AGRADECIMENTOS

Muito especialmente, desejo agradecer ao meu orientador Prof. Doutor Alisson Vasconcelos de Brito, pela disponibilidade, atenção dispensada, paciência, dedicação e profissionalismo. Muito obrigado.

Aos membros da banca avaliadora: Prof. Dra. Thaís Gaudencio do Rêgo, Prof. Dr. Elmar Uwe Kurt Melcher e, em especial, ao Prof. Dr. Jorge Gabriel G. de Souza Ramos. Obrigado por todas as valiosas contribuições.

À minha família, em particular, à minha avó Quitéria e meu avô Chiquinho.

Aos meus amigos, em especial, a Josué da Silva Gomes Júnior, pelo seu apoio.

Aos meus colegas de mestrado e do laboratório LaSER, pelos momentos de entusiasmo partilhados em conjunto.

A todos os professores e funcionários do PPGI que contribuíram com a minha formação.

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), pelo apoio financeiro.

E, finalmente, à minha amada esposa, Égina, por estar sempre ao meu lado durante todo este período.

"Se a educação sozinha não transforma a sociedade, sem ela, tampouco, a sociedade muda."

Paulo Freire

RESUMO

Autômatos Celulares (AC) têm suas origens no trabalho de Von Neumann na década de 40 e, desde então, tornou-se um tema de pesquisa importante com uma ampla gama de aplicações, que vão desde modelagem de sequência de DNA até a dinâmica ecológica. Um aspecto que pode ser interessante durante uma simulação de AC é a evolução no número de indivíduos de cada espécie ao longo do tempo. Esta análise pode fornecer informações importantes sobre o domínio de certas espécies em um sistema dinâmico, ou identificar aspectos que possam favorecer uma ou mais espécies em detrimento de outras. As simulações de AC podem ser tarefas computacionalmente muito custosas. Dependendo do tamanho do domínio de simulação, do número de dimensões ou do número de indivíduos, essas simulações podem levar várias horas para serem concluídas. A avaliação do número de indivíduos em cada *time-step* de simulação é uma tarefa igualmente custosa. Várias técnicas de aceleração foram desenvolvidas para melhorar o desempenho das simulações de AC, e algumas delas levam em consideração a evolução no número de indivíduos ao longo da simulação. Neste trabalho, é proposto um simulador de AC, capaz de avaliar de forma eficiente a evolução no número de indivíduos de cada espécie. O alto desempenho é obtido através do uso do paralelismo maciço de GPUs. A abordagem apresentada alcançou uma aceleração de 44 vezes em comparação com uma implementação sequencial e 26 vezes em comparação com uma abordagem tradicional também na GPU.

Palavras-chave: Autômatos Celulares; GPU; GPGPU; Histograma; PRNG; Gerador de números pseudo-aleatórios.

ABSTRACT

Cellular Automaton (CA) have its origins in the work of Von Neumann in the 40s and, since then, have become an important research topic with a wide range of applications, ranging from DNA sequencing to ecological dynamics. One aspect that may be of interest during a CA simulation is the evolution in the number of individuals of each species along time. This analysis can give important information about the dominance of certain species in a dynamical system, or identify aspects that might favor one or more species in detriment of others. CA simulations can be computationally very expensive tasks. Depending on the simulation domain size, number of dimensions or the number of individuals, these simulations can take several hours to complete. The evaluation of the number of individuals at each simulation time-step is an equally expensive task. Several acceleration techniques have been developed to improve the performance of CA simulations, and some of them take into account the evolution in the number of individuals along the simulation. In this work we propose an CA simulator which is capable of efficiently evaluate the evolution in the number of individuals of each species. High performance is obtained through the use of the massive parallelism of GPUs. The presented approach achieved a speed-up of 44 times when compared to a sequential implementation, and 26 times when compared to a traditional approach also in GPU.

Keywords: Cellular Automata; GPU; GPGPU; Histogram; PRNG; Pseudo Random Number Generator.

LISTA DE FIGURAS

LISTA DE TABELAS

LISTA DE CÓDIGOS FONTE

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

AC: Autômato Celular

CUDA: *Compute Unified Device Architecture*

FPGA: *Field Programmable Gate Array*

GID: *Global ID*

LID: *Local ID*

OpenCL: *Open Computing Language*

PE: *Processing Element*

PRNG: *Pseudo-Random Number Generator*

SIMD: *Single Instruction Multiple Data*

SPMD: *Single Process Multiple Data*

VA: Vida Artificial

SUMÁRIO

Capítulo 1

INTRODUÇÃO

Vida Artificial (VA) é um campo de estudo que procura entender a vida natural utilizando mecanismos artificiais, buscando reproduzir características e comportamentos de sistemas vivos. A VA aplica, em sistemas artificiais, regras e características encontradas na natureza, objetivando simular o comportamento natural. Através da VA é possível observar, por exemplo, como se comporta um ecossistema ao longo de milhões de anos, em apenas alguns segundos. A VA é um tema de estudo aberto que ainda tem muito que se pesquisar, e oferece desafios para estudiosos de diferentes áreas, uma vez que este tema caracteriza-se como multidisciplinar.

Pesquisas em VA podem beneficiar problemas pendentes na biologia, a exemplo de como a vida se originou na terra e as possibilidades em outras partes do universo, como se deu a evolução cultural, o que contribui para a singularidade da natureza, como ocorre a manutenção dos seres ou a formação de padrões na estrutura dos ecossistemas naturais [1] . É nesse último ponto que se delimita esta pesquisa, pois este trabalho apresentará estudos envolvendo implementações eficientes do modelo computacional de Autômatos Celulares (AC).

O progresso computacional em relação ao armazenamento de dados de poder de computação aumentou a diversidade de pesquisas sobre o assunto. Recentemente, a computação paralela permitiu o desenvolvimento de sistemas mais elaborados, uma vez que as arquiteturas de muitos núcleos, a exemplo das Unidades de Processamento Gráfico (GPUs), agora estão sendo usadas para acelerar tais simulações. A simulação de Autômatos Celulares (AC), incluindo a contagem do número de cada espécie em determinada frequência é uma tarefa computacional dispendiosa. Várias técnicas de aceleração foram desenvolvidas para melhorar o desempenho das simulações de AC, e algumas delas levam em consideração a evolução no número de indivíduos ao longo da simulação [2] [3] [4] [5] [6]. Neste trabalho, é proposto

uma implementação paralela de um Autômato Celular em GPU, programado em OpenCL. Este trabalho usa uma abordagem eficiente para contar o número de espécies em cada passo da simulação.

1.1 Motivação

Muitos estudos sobre dinâmica populacional utilizam modelos matemáticos, a exemplo de equações diferenciais, para extrair informações sobre fenômenos naturais. Modelar matematicamente um sistema, mesmo que ele possua características simples, é uma tarefa considerada complicada. Hoje em dia, apesar das muitas maneiras de estudar sistemas complexos, as simulações estocásticas tornaram-se uma ferramenta universal e têm sido amplamente utilizadas para investigar comportamentos coletivos na natureza. Aplicando um conjunto de regras simples que são avaliadas aleatoriamente, o procedimento tem sido empregado em uma diversidade de cenários [7], [8], [9], [10], [11].

Os computadores têm desempenhado importante papel durante a execução de tais simulações, uma vez que tornou possível que vários experimentos pudessem ser executados e finalizados com eficiência. No entanto, em alguns cenários, quando se começa a adicionar mais variáveis nas simulações computacionais, na tentativa de desenvolver experimentos mais realísticos, a execução pode levar horas ou dias, podendo até mesmo chegar a ser inviável o tempo de espera, necessitando de décadas de processamento ininterrupto.

Nesse sentido, a comunidade científica começou a adotar *hardwares* que oferecem alto poder computacional, para computar grande parte dos algoritmos numéricos. As GPUs, uma vez que possuem unidades de processamento compostas por centenas ou milhares de núcleos, vêm sendo cada vez mais utilizadas em pesquisas científicas nas últimas décadas, em cenários nos quais se deseja aumentar o desempenho computacional.

Esses novos recursos trazem consigo desafios por trás de um novo paradigma, a computação paralela. As implementações realizadas com a computação sequencial convencional não são válidas para essa nova arquitetura computacional. Hoje há uma necessidade de habilidades distintas e esforço extra para gerar novas soluções compatíveis com esses dispositivos. Mas uma vez implementadas, podem atingir um desempenho computacional muito superior as soluções sequenciais.

1.2 Objetivos

1.2.1 Objetivo Geral

Este trabalho objetiva propor uma técnica para aceleração de Autômatos Celulares aplicados para simulação de sistemas dinâmicos naturais através de uma implementação paralela em GPU com OpenCL.

1.2.2 Objetivos Especificos

- Modelar processos biológicos para o entendimento do comportamento de sistemas reais;
- Implementar um sistema de autômatos celulares bidimensional sequencial com C;
- Implementar um sistema de autômatos celulares bidimensional paralelo com OpenCL;
- Aplicar e/ou desenvolver técnicas paralelas para aceleração de Autômatos Celulares;
- Quantificar o ganho computacional com uso de GPUs.

1.3 Estrutura da Dissertação

O trabalho está dividido em 6 capítulos, além das referências e apêndice.

O Capítulo 2 apresenta uma fundamentação teórica acerca dos dois principais temas que delimitam este trabalho: Vida Artificial e Computação Paralela em GPUs. O Capítulo 3 apresenta o estado da arte sobre implementações que de alguma forma se assemelham à esta pesquisa. No Capítulo 4 encontra-se a descrição de como o experimento foi modelado, envolvendo regras, características e tipos de interações utilizadas no Autômato Celular, sua respectiva implementação em OpenCL e as técnicas utilizadas para aceleração computacional. O Capítulo 5 mostra os resultados obtidos durante os experimentos realizados. No Capítulo 6 está a conclusão do trabalho. No apêndice A encontra-se a publicação de uma aplicação para o Autômato Celular desenvolvido neste trabalho.

Capítulo 2

FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 Vida Artificial

Vida Artificial é uma abordagem utilizada para estudar sistemas complexos naturais [1] e procura modelar o comportamento dos indivíduos vivos em computadores e outros métodos artificiais, na busca do entendimento do processo evolutivo e comportamental [12]. Ensaios sobre a criação de sistemas artificiais com características de sistemas vivos remetem à década de 1950, período de evolução dos próprios computadores [13], os quais tornaram possível a investigação acerca do tema, baseando-se em simulações computacionais.

Os pioneiros no desenvolvimento de pesquisas sobre VA, mesmo antes de ser chamada de tal forma, foram Alan Turing, John Von Newmann e Grey Walter. Turing ficou conhecido como o pai da computação, devido os seus trabalhos relevantes desenvolvidos, a exemplo da máquina universal [14], hoje conhecida como máquina de Turing, é um modelo de um computador e pode computar qualquer problema que um computador atual compute. Em seus anos finais, Turing toma interesse em pesquisar sobre o desenvolvimento de padrões em organismos: replicação, adaptação e cognição, áreas conhecidas hoje como Vida Artificial e Inteligência Artificial, dando fundamental contribuição. Em 1952, publica um trabalho sobre morfogênese [15], ou seja, o desenvolvimento de formas em organismos vivos. Nesse tempo, Newmann desenvolvera o conceito de Autômatos Celulares, vindo a publicá-lo apenas em 1966 [16].

John Von Newmann, responsável por criar a arquitetura dos primeiros computadores, a qual recebe o seu nome, contribuiu significativamente para o desenvolvimento da VA (na época ainda não era utilizado tal termo, nesse caso, os estudos faziam parte da cibernética). Neumman sempre se perguntava quais as regras necessárias para que um robô construísse

uma cópia de si mesmo. Responsável por conceber a ideia de Autômatos Celulares, deu início a investigar se regras simples poderiam dar origem ao desenvolvimento de comportamentos complexos. Newmann propôs um modelo de autorreprodução fundamentado no próprio AC, que posteriormente Watson e Crick descobririam semelhanças no processo de reprodução celular baseado no DNA [13].

Também no início da década de 1950, o neurologista Grey Walter construiu um dos primeiros robôs eletrônicos autônomos da história. Eram bem simples, formados basicamente por três rodas, cada uma com um motor independente, um sensor de luz e outro de contato, e uma bateria para alimentação. Nomeados de tartarugas, faziam apenas duas coisas, seguiam um feixe de luz e recuavam ao colidir com algum obstáculo. Quando o feixe de luz era muito forte, os robôs também recuavam. Walter representava animais fototrópicos, a exemplo da mariposa. Os robôs apresentavam características de aleatoriedade, incerteza e independência, pertencentes ao comportamento animal e humano. Esses foram os primeiros robôs da área de Vida Artificial, apresentando características de seres vivos [17].

De acordo com [13] VA e IA tiveram aparecimento simultâneo, porém a IA teve um desenvolvimento mais acentuado, tanto que "Turing ficou mais conhecido pelo teste de Turing do que pelo trabalho com morfogênese". Passados anos, as pesquisas sobre VA voltam a se fazer necessárias para resolver problemas não incluídos pela IA. Então, em 1987 Langton organiza o 1º workshop sobre Vida Artificial, reunindo diversos pesquisadores de diferentes áreas.

Para a efetivação do estudo de Vida Artificial, alguns mecanismos podem ser utilizados, ao exemplo de algoritmos genéticos, mundos virtuais, seres artificiais e autômatos celulares. Existem alguns outros, além dos citados, porém acredita-se que esses são os principais.

2.1.1 Algoritmos genéticos

Na natureza, populações de indivíduos modificam suas características hereditárias ao longo das gerações, como afirma Darwin em sua teoria da evolução [18]. Os algoritmos genéticos desenvolvidos por John Holland 1975 [19] são inspirados nesse processo, tendo três funções principais: seleção, cruzamento e mutação. Quando aplicado no estudo de VA, é possível modelar e observar o processo de um sistema evolutivo e suas mutações ao longo do tempo. Pode-se observar como os indivíduos artificiais reagem ao meio, reproduzindo comportamentos característicos de sistemas reais naturais, como adaptação ao alimento, a diversificação das espécies, entre outros.

2.1.2 Mundos Virtuais

Mundo Virtual é uma técnica que busca modelar as regras e os relacionamentos existentes no mundo real e sintetizá-las no computador, sendo bastante difundida no estudo de VA. Essa técnica consiste em criar um mundo artificial, geralmente com duas dimensões, adicionar algumas criaturas que irão se mover, competir e evoluir. As criaturas, também conhecidas com agentes, podem carregar informações, como o seu identificador, tipo de presas, idade, energia, quantidade de filhos, entre outras informações que se façam importantes dependendo do problema. O agente pode ainda perceber outros agentes inseridos no sistema, através de seu campo de visão e tomar decisões a partir daí.

2.1.3 Seres Artificiais

A robótica móvel é a área que permite a materialização da VA. Como falado no início deste capítulo, foi Grey Walter [17] quem deu início as criações no campo da robótica que simula organismos vivos, através de seus robôs apelidados de tartarugas. Hoje, ainda encontramos limitações tecnológicas nesse campo, o que impede de reproduzir algumas características, como autorreprodução e autorregeneração. Porém, muitos estudos estão sendo desenvolvidos utilizando características da VA na robótica móvel.

A robótica móvel inspirada na vida tenta entender comportamentos como auto-organização, adaptação, auto-agregação e comportamento coletivo para resolução de tarefas. Existem robôs que reproduzem características de colônias vivas, a exemplo de colônias de formigas e de abelhas. Nesse caso, os robôs são especializados em desenvolver uma atividade coletiva, porém quando colocados individualmente não conseguem realizar. Um projeto de destaque é o Swarm-bots[1], que foca em características de insetos sociais.

2.1.4 Autômato Celular

Autômato Celular, idealizado por Ulam e Jonh Von Neumann na década de 1940 e publicado por Burk [16], consiste em um modelo de abstração autorreplicante de organismos vivos, para simulação de sistemas complexos naturais [20]. Um Autômato Celular é representado por uma matriz[2] *n*-dimensional de células. Cada célula dessa matriz é ocupada por um autômato. Autômatos são máquinas de estados finitos, que recebem um estímulo, exe-

[1] http://www.swarm-bots.org/

[2] Também será referenciado como *grid*, ao decorrer deste trabalho.

cutam uma regra ou função de transição e mudam de estado. Cada célula da matriz ou rede representa um indivíduo, o valor da célula pode modificar-se infinitas vezes durante a execução. Cada célula da rede pode estar em qualquer um dos possíveis estados existentes, que são atualizados periodicamente sob as mesmas regras. O estado futuro de uma célula depende de seu estado atual e dos estados das células vizinhas, mantendo uma constante interação.

É possível definir diferentes tipos de vizinhanças de AC. Os tipos de vizinhanças frequentemente utilizadas em AC são a vizinhança de Von Neumann e a vizinhança de Moore. Na vizinhança de Von Neumann, uma célula pode acessar qualquer posição que esteja há uma distância de Manhattan igual a 1. Na vizinhança de Moore, uma célula consegue alcançar qualquer outra em uma distância Chebyshev igual a 1. Apesar de não ser muito comum, essa distância pode apresentar valores maiores que 1 em trabalhos utilizando variações de AC.

No final dos anos 60, o matemático Conway desenvolveu o *Game of Life*. Talvez um dos mais conhecidos modelos de AC, representa um sistema de vida e morte entre organismos, um conjunto simples de regras para estudar o comportamento macroscópico de uma população. O *Game of Life* é formado por um *grid* bidimensional, utilizando a vizinhança de Moore e possui as seguintes regras:

- Sobrevivência, se uma célula viva possuir dois ou três vizinhos vivos ele sobreviverá;
- Morte, se a célula viva possuir mais de 3 ou menos de 2 vizinhos vivos ela morrerá;
- Nascimento, uma célula morta irá renascer se três de seus vizinhos estiverem vivos.

Os ACs são frequentemente utilizados para representar sistemas evolutivos dinâmicos. As configurações produzidas nos ajudam a entender a mecânica da formação, propagação e interação em sistemas naturais. Algumas aplicações utilizam AC para estudo do crescimento tumoral [21], [22], [23], dinâmica ecológica [24], interações entre bactérias [25], [26], crescimento urbano [27], auto-organização [28], modelagem de sequência de DNA [29], etc.

Um modelo de Autômato Celular foi utilizado para entender como um padrão de expressão gênica diferenciado pode ser estabelecido e gerar de forma ordenada um organismo com diferentes tipos celulares [30]. A diferenciação celular é o processo pelo qual a célula se modifica, desenvolvendo os diferentes sistemas do corpo, assim torna-se possível a formação de um organismo complexo e capacitado. No estudo, o genoma das células é representado por uma matriz quadrática (Autômato Celular), povoada com valores representando os genes,

que são atualizados simultaneamente. Essa dinâmica é o que provoca a diferenciação celular. No processo de evolução natural os mais bem adaptados sobrevivem, essa adaptação é resultado da capacidade de mudança das espécies conseguindo variar o seu material genético através da diferenciação celular. Sabendo que a diferenciação celular remota ao surgimento dos primeiros seres multicelulares, percebe-se o poder que os ACs possuem, uma vez que foi possível a modelagem do processo utilizando-os.

Mudando a forma como as interações entre as células acontecem, resultará em uma variação do AC. Alguns modelos de ACs apresentam características de sistemas formados por indivíduos competidores, lutando pela sobrevivência. Sendo assim, também são utilizados para estudar a coexistência entre espécies concorrentes [25], [26]. Para esse modelo, o AC é povoado com indivíduos de diferentes tipos, cada tipo representando uma espécie competidora. Esses estudos reforçaram alguns fatores responsáveis pela coexistência, entre eles estão o alcançe da interação [25] e a formação de grupos com indivíduos do mesmo tipo.

Outra característica modelada nos Autômato Celular e responsável pela coexistência é a competição cíclica. No modelo de dominância cíclica existe uma presa para cada predador e vice-versa. É possível representar esse tipo de relacionamento com o tradicional jogo pedra-papel-tesoura, em que a pedra esmaga a tesoura, a tesoura corta o papel e o papel embrulha a pedra. O sistema é formado por três indivíduos de espécies distintas, realizando um domínio mútuo cíclico. Desta forma, qualquer que seja a estratégia utilizada, todas possuem iguais chances de vencer ou perder, não existindo um competidor superior a todos. O modelo de competição cíclica é apontado como responsável pela preservação da biodiversidade na natureza [31], [32] e adotado em aplicações com AC [33], [34], [35].

Nesse sentido, surge outra característica importante em aplicações com AC, que é calcular a densidade de cada espécies ao decorrer da simulação. É possível verificar se uma espécie se extingue ou pode haver coexistência entre elas acompanhando o tamanho das populações [35]. Além disso, calcular esse número também é importante para idenficar outras caracteristicas, como analisar a taxa de propagação de agentes infecciosos [2] [3] [4] [5] ou identificar fatores que favorecem ou desfavorecem as espécies [6].

2.2 GPU (*Graphical Processing Unit*) e Paralelismo

O aumento contínuo da capacidade de processamento é algo buscado desde o surgimento dos primeiros computadores. O co-fundador da Intel, Gordon Earle Moore, estabeleceu uma previsão sobre essa evolução. Ele chegou a afirmar que o número de transistores em um

chip de microprocessador dobraria a cada ano [36], resultando no aumento do poder de processamento. Após sua previsão se concretizar, ele refez a análise e atualizou o tempo de duplicação para 2 anos [37], ficando conhecida como lei de Moore.

Após a entrada no século XXI, com os processadores atingindo limites de desempenho, abordagens envolvendo *hardwares* multicores e *many cores*, a exemplo de GPUs, ganham ênfase quando se deseja aumentar o desempenho computacional em aplicações que demandam alto poder de processamento.

Unidades de Processamento Gráfico (*Graphics Processing Unit* - GPU) possuem centenas ou milhares de núcleos e realizam uma computação massivamente paralela. As GPUs foram criadas para a renderização de gráficos, mas devido seu alto poder computacional, a comunidade científica passou a utilizá-las para auxiliar na resolução problemas científicos. Com isso, dá-se o aparecimento do conceito Unidade de Processamento Gráfico de Propósito Geral (*General Purpose Graphics Processing Unit* - GPGPU), ou seja, as GPUs não apenas executam rotinas de processamento gráfico, mas passam a executar tarefas que eram realizadas pela Unidade Central de Processamento (*Central Processing Unit* - CPU).

2.2.1 Arquitetura GPU

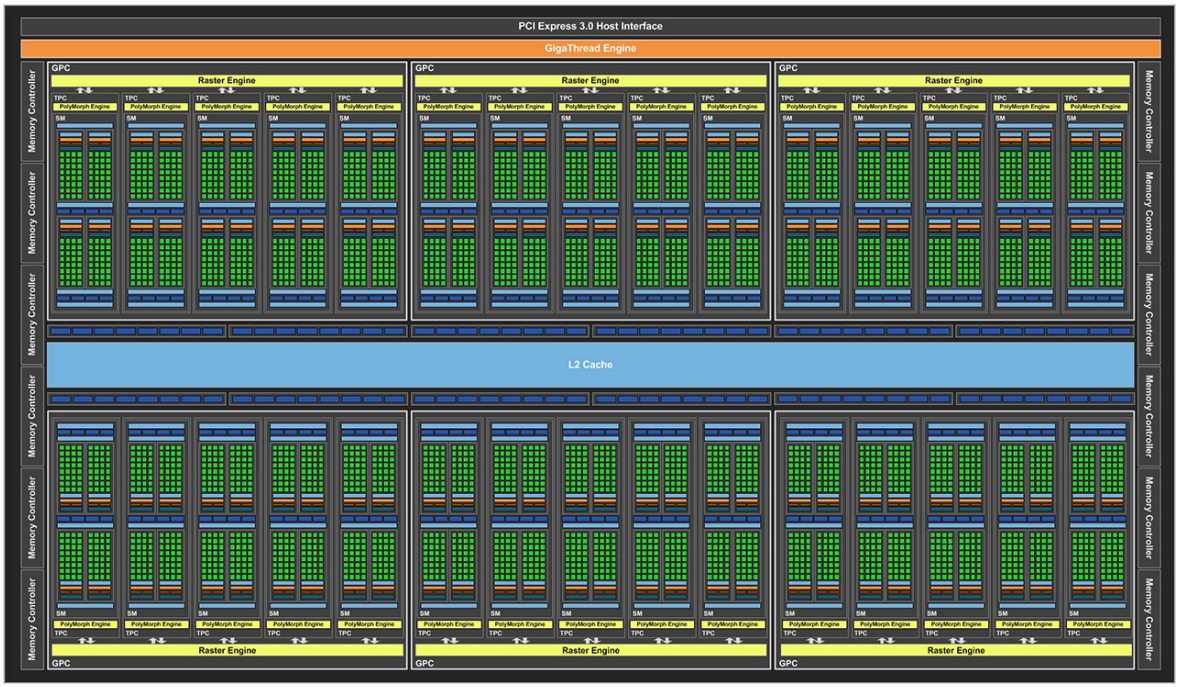


Figura 2.1: Nvidea Titan Xp.

Enquanto uma CPU comporta alguma unidades de *cores* para execução de tarefas se-

quenciais, a GPU possui uma arquitetura massivamente paralela, composta por centenas ou milhares de núcleos de processamento. A figura 2.1 mostra a arquitetura da GPU mais potente atualmente (Agosto de 2017), contendo 3840 cores (identificados na cor verde) e capaz de realizar 12 trilhões de operações de ponto flutuante por segundo (*FLoating-point Operations Per Second* - FLOPs).

2.2.2 Programação para GPU

Entre os *frameworks* atualmente disponíveis para programação de GPU, CUDA e OpenCL são os mais populares.

- CUDA (*Compute Unified Device Architecture*): Segundo a NVIDIA, CUDA^{TM} é uma plataforma de computação paralela e um modelo de programação lançada pela NVIDIA. Ela permite aumentos significativos de performance computacional ao aproveitar a potência da unidade de processamento gráfico (GPU), somente para GPUs da NVIDIA.

- OpenCL: Mantido pelo Khronos *group*, tem como principal objetivo fornecer uma API padrão, aberta, fácil de usar e sem qualquer limitação de dispositivo.

  O fato de CUDA ser proprietário e estar limitado a ser usado apenas com GPUs NVidia, enquanto o OpenCL é um padrão aberto e de plataforma cruzada, para *hardware* heterogêneo, levou à decisão de escolher o *framework* OpenCL para ser utilizado neste trabalho.

  A nomenclatura do OpenCL se diferencia da utilizada em CUDA em alguns momentos, a Tabela 2.1 expõe as diferenças entre as duas.

2.2.2.1 *Open Computing Language* - OpenCL

O OpenCL padroniza o desenvolvimento de programação paralela, pois oferece um conjunto comum de ferramentas para tomar vantagem de qualquer dispositivo com suporte à OpenCL para o processamento de código paralelo, por criar uma interface de programação bem próxima ao *hardware* [38].

De acordo com as especificações do OpenCL [39], sua arquitetura consiste em uma hierarquia de modelos abstratos. No nível mais alto, existe o modelo de plataforma (Figura 2.2), que assume a existência de um *host*, geralmente representado por uma CPU, que será responsável por controlar e coordenar o trabalho de um conjunto de dispositivos OpenCL. Um

Tabela 2.1: Comparativo entre as nomenclaturas CUDA e OpenCL

CUDA	**OpenCL**
Streamming Multiprocessor (SM)	*Compute Unit (CU)*
Streamming Processor (SP)	*Processing Element (PE)*
Host	*Host*
Device	*Device*
Kernel	*Kernel*
Thread	*Work Item*
Block	*Work Group*
Grid	*NDRange*
Memória Global	Memória Global
Memória Constante	Memória Constante
Memória Compartilhada	Memória Local
Memória Local	Memória Privada

dispositivo OpenCL pode assumir várias formas, incluindo CPUs, GPUs e FPGAs. Neste trabalho, o dispositivo OpenCL será restrito a uma GPU. Os dispositivos OpenCL são ainda subdivididos em *computer units*, e estes em *processing elements*. *Processing elements* dentro de um *computer units* executa o código como unidades contendo um único fluxo de instruções e múltiplos fluxos de dados (*Single Instruction Multiple Data* - SIMD). No contexto atual, os *processing elements* corresponderão aos núcleos GPU.

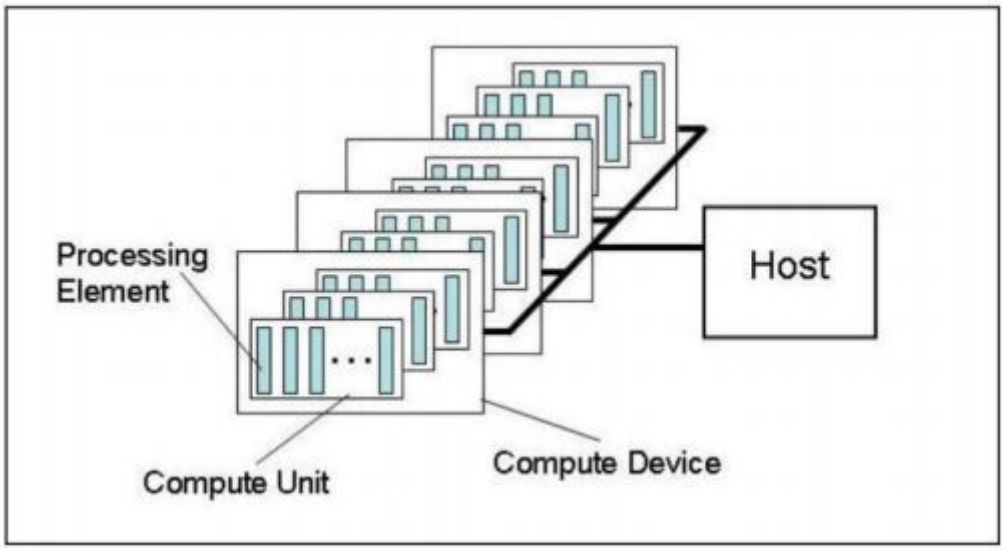


Figura 2.2: Modelo de Plataforma OpenCL

Durante o desenvolvimento de um programa com OpenCL, algumas tarefas devem ser inevitavelmente executadas. Tarefas essas que são repetitivas e algumas realizadas em baixo nível. São elas:

- Identificar plataforma;
- Identificar dispositivos;
- Criar contexto;
- Criar fila de comando;
- Alocar *buffers*;
- Passar argumentos;
- Transferir e capturar dados no dispositivo;
- Compilar *kernel*;
- Liberar memória alocada.

No *host*, programado em C/C++, executa-se os passos descritos anteriormente, enquanto no *device* é executado o *Kernel*, função programada em OpenCL e compilada em tempo de execução.

O modelo de execução (Figura 2.3) pressupõe que os *work items* do OpenCL (*threads*) são elementos de um espaço *n*-dimensional indexável chamado *NDRange*. Cada *work item* representa uma instância de um *kernel* OpenCL, na verdade, uma função a ser executada em um dispositivo OpenCL, e eles são agrupados em *work groups*. Os *work items* são divididos em toda a plataforma OpenCL, de modo que todos os *work items* de um mesmo *work group* sejam atribuídos à mesma *computer unit*. Além disso, os *work items* no mesmo *work group* podem ser sincronizados através do uso de barreiras e cercas. A única maneira de sincronizar *work items* localizados em *work groups* distintos é iniciar a execução de um novo *kernel*.

Cada *work item* possui um ID global, distinto, que é usado para gerenciar quais os dados que serão processados por aquele *work item*, e um ID local, sendo único apenas dentro do *work group*. Cada *work group* possue um único ID para distingui-los.

O modelo de memória (Figura 2.4) descreve a estrutura hierárquica da memória OpenCL. No nível mais baixo, existe a memória global, que geralmente será associada à maior quantidade de memória disponível no dispositivo. Ela pode ser lida e escrita por qualquer *work item* em execução e, geralmente, apresentará maior latência. A memória constante é uma memória de leitura e, geralmente, muito pequena, que é fortemente armazenada em cache. Em geral, a memória constante é usada para armazenar pequenas quantidades de dados que

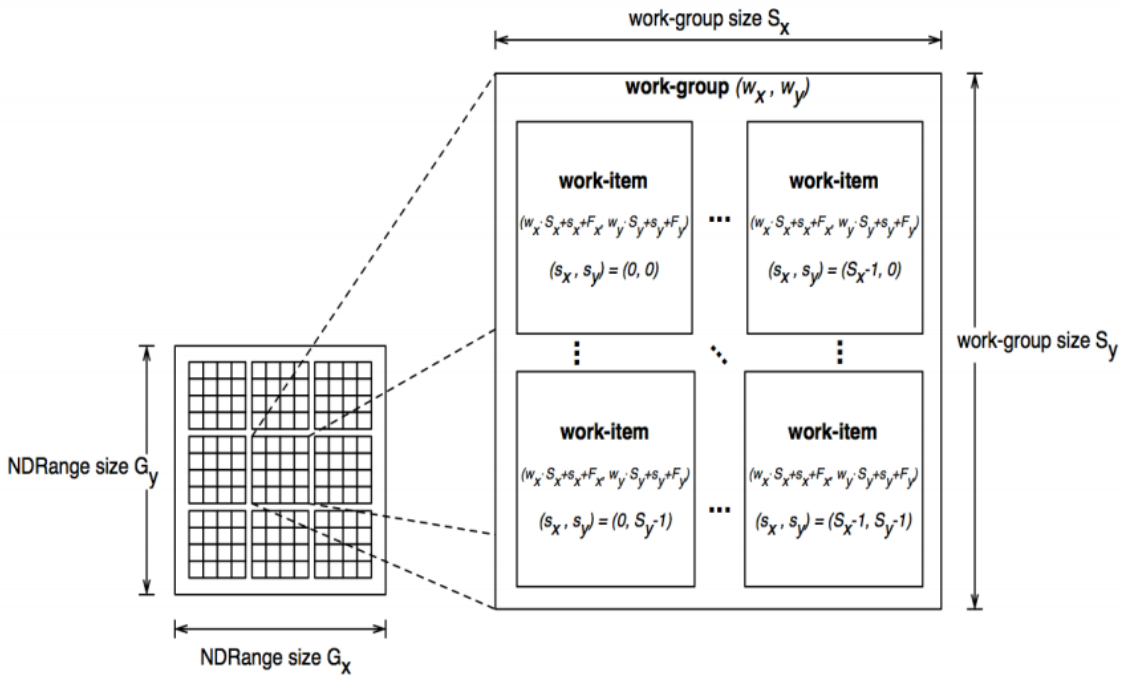


Figura 2.3: Modelo de Execução OpenCL

devem ser lidos com frequência pelos *work items*. A memória constante só pode ser escrita, ou seja, inicializada, pelo *host* e seu conteúdo persiste ao longo das chamadas do *kernel*.

A memória local é um pequeno pedaço de memória de leitura e gravação localizado em cada *computer unit*. Os *work items* que residem no mesmo *work group* (sendo executados pela mesma *computer unit*) podem usar a memória local para trocar informações. Atualmente, não há nenhuma maneira para *work items* localizados em *work groups* distintos trocar informações através da memória local. Nesse caso, os *work items* devem recorrer à memória global mais lenta, que é visível para todos os *work items*. A memória privada, sob a forma de registros, é a memória mais rápida disponível e pode ser lida e escrita apenas pelo *work item* atual. Os registradores geralmente são usados para armazenar variáveis locais, incluindo *arrays* estáticos.

Para aproveitar ao máximo o paralelismo maciço da GPU, temos que manter todos os seus *processing elements* tão ocupados quanto possível, maximizando a utilização. A utilização pode ser definida como a porcentagem de elementos de processamento que estão ativos em um determinado instante de tempo. Entre os fatores que podem afetar a utilização, podemos citar a localidade de dados, o caminho de fluxo médio de execução de código, o número de registros usados pelo núcleo, entre outros.

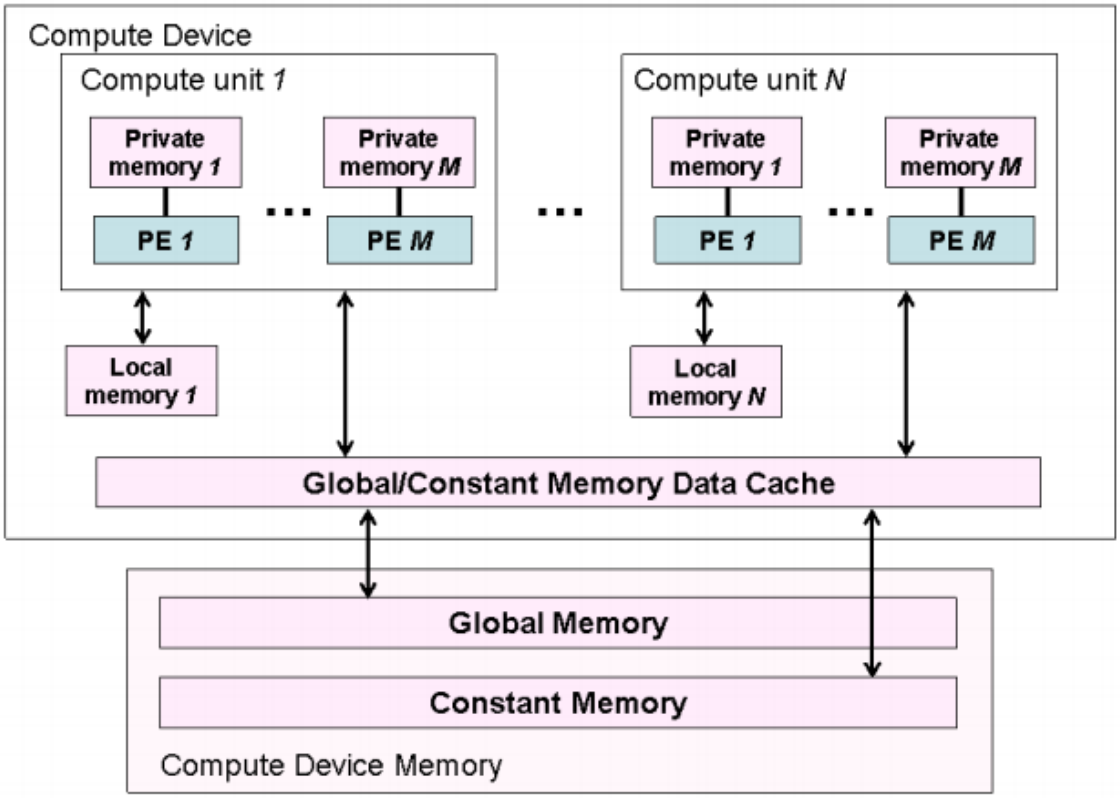


Figura 2.4: Modelo de Memória OpenCL

No caso de programas limitados de memória, o acesso à memória não coalescido afeta a utilização com limitações de largura de banda. O *hardware* da GPU é otimizado para acessos coalescidos à memória, isto é, quando os *work items* com IDs sequenciais acessam posições de memória sequenciais. Embora alguns experimentos tenham mostrado que as GPUs são menos afetadas por acessos de memória não coalescidos do que as CPUs [40], sua largura de banda ainda é limitado. Uma prática comum para melhorar o desempenho na programação GPU é usar a memória local em vez da memória global. No entanto, isso só pode ser feito quando os dados apresentam algum grau de localidade.

Certos subgrupos de *work items* são executados de forma SIMD. A divergência do caminho do fluxo de execução entre os itens de trabalho nesses subgrupos faz com que a execução de todos os itens de trabalho divergentes seja serializada pela GPU. Esses subgrupos não são realmente definidos claramente na especificação OpenCL, mas correspondem a *warps* na nomenclatura NVidia [41] ou *wavefronts* na especificação AMD [42]. Assim, é aconselhável evitar a divergência do caminho do fluxo entre itens de trabalho, especificamente para aqueles pertencentes a esses subgrupos específicos.

Embora o número máximo de *work items* por *work group* seja prescrito por cada for-

necedor, esses números geralmente são baseados nos melhores casos. Como o número de registros disponíveis é limitado, o número máximo real de *work items* por *work group* dependerá do número de registros disponíveis e do número de registros necessários para o *kernel*. Assim, é aconselhável manter sempre o menor número de variáveis privadas do *kernel*, de modo que mais *work items* possam ser executados simultaneamente.

Capítulo 3

TRABALHOS RELACIONADOS

A simulação de Autômatos Celulares e a identificação da densidade de cada espécie são problemas que exigem a implementação de outros recursos importantes, como a geração massiva de números aleatórios e a contagem de elementos.

3.1 Aceleração sob a ótica da memória

O trabalho de [43] mostra técnicas de aceleração de um AC semelhante ao Jogo da Vida. No trabalho, o AC estudado possui 3 dimensões, isso implica que para a atualização de cada célula, aplicando a vizinhança de Moore, 27 células devem ser analisadas. Se o AC é posicionado apenas na memória global, cada *thread* realizará 27 acessos à essa memória. Como 2 células vizinhas compartilham 18 células em suas vizinhanças, então [43] propuseram uma abordagem com memória compartilhada (memória local na nomenclatura OpenCL). Um bloco de células é transferido para a memória compartilhada, acessível por *threads* dentro do mesmo *work group*. Então, para 2 células vizinhas, são necessários 36 acessos à memória global, ao invés de 54, pois as células em comum são acessadas apenas uma vez. Para computar cada novo estado, a vizinhança é lida da memória compartilhada, em vez da memória global, e o novo estado obtido é escrito na memória global. Com essa estratégia, obteve-se um *speedup* de 1.5x em relação a abordagem com apenas memória global.

O trabalho de [44] apresenta como a memória local da GPU pode ser usada para melhorar o desempenho dos modelos de Autômatos Celulares de *water flow*. Basicamente, cada *work item* em um *work group* lê sua própria célula e armazena-a na memória local, onde fica acessível para outros *work items* do mesmo *work group*. Com essa estratégia a memória local é usada para simular uma memória *cache*. Como os acessos a memória global foram reduzi-

dos, conseguiu-se obter uma aceleração de até 4x em comparação com a implementação que utiliza apenas memória global.

No ano seguinte, [45] realizou uma avaliação de desempenho para o mesmo modelo de autômatos celulares. Dessa vez ele utiliza uma GPU com arquitetura Fermi. A arquitetura Fermi foi lançada pela Nvidia como uma tecnologia sucessora para a arquitetura de suas placas e, entre várias vantagens, ela oferece memória cache para operações com memória local e global [46]. Então, os resultados de [45] mostram que o acesso em cache à memória global implementada nos processadores Fermi equilibra e supera o cache manual implementado no algoritmo de memória local do trabalho anterior [44].

3.1.1 Discussão

Acima são apresentadas as principais técnicas encontradas na literatura para casos semelhantes ao problema trabalhado aqui. Os métodos de [43] e [44] defendem o uso da memória local mais rápida na tentativa de aumentar o desempenho. Porém, como a memória local é menor que a global, uma vez que essa memória local não puder comportar a matriz, essa matriz deve ser dividida em pedaços menores ou sub-matrizes. Essas sub-matrizes podem agora ser transferidas para as memórias locais, onde serão processadas em paralelo, mas o processamento de cada sub-matriz é feito de forma independente, por diferentes *work groups*. O fato das sub-matrizes serem processadas de forma independentemente, representa um problema para as simulações de ACs, pois, neste caso, a ideia de continuidade do domínio é violada e as alterações ocorridas em uma determinada sub-matriz não se propagarão ao restante da rede, transformando o AC em uma espécie de mosaico.

A abordagem utilizada para remediar esse problema é replicar a informação das células de fronteiras para outras sub-matrizes. Apesar da efetividade, essa abordagem implica em um maior consumo de memória. Além disso, estratégias complexas de sincronização devem ser empregadas para permitir a propagação adequada das mudanças da matriz entre as sub-matrizes. As maiores demandas computacionais associadas a essa abordagem, geralmente irão superar os benefícios obtidos com o uso de memórias locais, como já observado por Topa [45]. Sendo assim, neste trabalho, a memória global foi a escolhida para posicionar o AC.

3.2 Técnicas de contagem utilizando GPU

Existem alguns trabalhos que calculam o número de elementos para gerar histogramas. O trabalho de [47] apresenta uma solução desenvolvida em CUDA, na qual vários *thread blocks* calculam as sub-partes do histograma. Depois que a computação de cada sub-parte é completada, um algoritmo de redução no *block* é realizado para reunir as subpartes distribuídas. Durante a computação, operações atômicas na memória compartilhada são empregadas.

No algoritmo apresentado por [48] para cada posição de uma matriz existe, além do seu valor, um contador associado, o qual é inicializado com 1. Durante a execução do algoritmo de ordenação, se dois elementos vizinhos forem idênticos, o do lado direito recebe o valor armazenado no contador do lado esquerdo, enquanto este recebe zero. Quando a ordenação é finalizada, todos os contadores relacionados a uma sequência são zerados, com exceção do último, que conterá o acumulado de todos os outros contadores, ou seja, a quantidade de elementos da sequência.

Já [49] combinaram um passo de pré-processamento com estratégias cuidadosas de otimização de compensação, para reduzir a quantidade de funções atômicas conflitantes entre *threads* que acessam a mesma localização na memória.

É apresentado por [50] uma abordagem baseada em replicação para eliminar conflitos de posição, já que foi utilizada uma abordagem onde várias *threads* tentam modificar a mesma posição de memória. Essa implementação é mais semelhante a abordagem convencional, na qual se tem os contadores que são incrementados para formar os valores do histograma. Porém, neste caso, são armazenados vários sub-histogramas em vez de um grande. Assim, os autores garantem que o número de conflitos de memória pode ser significativamente reduzido.

3.2.1 Discussão

Em nosso trabalho, implementamos uma abordagem acelerada para contar o número de espécies com base na técnica apresentada por [48], que é um avanço em relação a uma solução anterior [51]. Em [48], diferentemente dos demais trabalhos, não é necessário realizar nenhuma operação atômica, pois nenhum conflito de acesso a memória ocorre. No entanto, uma variável extra é adotada para acumular o número de elementos em cada linha da matriz. Na abordagem apresentada neste trabalho, como é de conhecimento prévio a quantidade de espécies no sistema, essa variável acumuladora pode ser eliminada. Neste caso, o número de

identificação do *work item* é usado em vez disso, economizando espaços de memória.

Capítulo 4

METODOLOGIA E DESENVOLVIMENTO

4.1 Modelagem do Autômato Celular

A modelagem de um AC pode ser parametrizado por vários fatores, incluindo dimensão, número de células, tipo de vizinhança, número de espécies, os tipos de interações entre elas, entre outros. Este trabalho está focado em ACs bidimensionais, no entanto, os conceitos aqui apresentados extendem-se para ACs de dimensões superiores.

A configuração assume uma estrutura bidimensional composta por L^2 células. Cada espécie é indicada por um índice i, onde $i = 1, 2, ..., \eta$, com η sendo o número de espécies. O número de indivíduos de cada espécie é indicado por S_i e, no início da simulação, eles são idênticos. Todos os indivíduos são distribuídos uniformemente sobre a rede antes da simulação. Os espaços vazios também são distribuídos na mesma proporção utilizada para a distribuição dos indivíduos, sendo K o número de células vazias. Então, temos que, $L^2 = S_i + S_{\mathrm{i+1}}, ..., S_n + K$.

As interações básicas envolvem mobilidade, reprodução e predação, cada uma ocorrendo aleatoriamente com as seguintes probabilidades prescritas: mobilidade = 0,5, reprodução = 0,25 e predação = 0,25. O alcance das interações é local, um indivíduo só poderá se relacionar com suas células vizinhas de primeiro grau, e descrita pela vizinhança de Moore. Assumimos que o AC apresenta condições de fronteira cíclicas, *i.e.* a vizinhança das células em cada fronteira da matriz incluirá as células no limite oposto. A Figura 4.1 mostra um indivíduo selecionado (preto) e as células com as quais ele pode interagir (cinza). As células restantes (branco) são inacessíveis.

Cada passo de tempo da simulação compreende quatro etapas, na seguinte ordem:

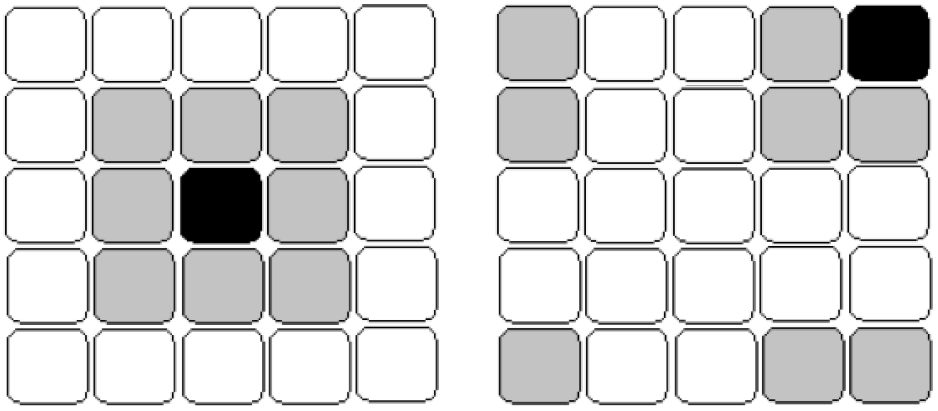


Figura 4.1: Vizinhança e alcance das interações

- Seleção da celular que irá executar uma ação;
- Seleção da célula vizinha, que receberá a ação;
- Seleção do tipo de interação;
- Atualização da rede.

Inicialmente, uma célula $L[i, j]$ da matriz é selecionada aleatoriamente. Se $L[i, j]$ estiver vazia, nenhuma alteração é aplicada à matriz e o passo de tempo da simulação atual é concluído. Se $L[i, j]$ não estiver vazio, uma célula vizinha $L[s,t]$ é selecionada aleatoriamente. No próximo passo, uma dentre três possíveis interações é selecionada aleatoriamente, de acordo com suas probabilidades, e é verificada se o tipo da interação selecionada é válido de $L[i, j]$ para $L[s,t]$. Se for válido, a ação é executada de acordo com um sistema de competição cíclico [52] e a rede é atualizada. Se não for válido, nenhuma alteração é aplicada à rede e o passo de tempo da simulação atual é concluído. Os detalhes relativos à validade do tipo de interação e atualização de rede são apresentados no Algoritmo 1. Após a execução desses quatro passos, dizemos que ocorreu uma interação no sistema. No final de L^2 interações, um ciclo é contado.

4.2 Implementação com OpenCL

O objetivo é melhorar o desempenho das simulações de AC através do uso de *hardware* massivamente paralelo. Neste caso, a abordagem usual é ter tantos *work items* como células

Algorithm 1 Verifica a validade das interações e atualiza a matriz

```
1:  procedure CHECKVALIDITYUPDATE(L, I, i, j, s, t)
2:      if I == Move then
3:          if L[s,t] == ∅ then
4:              L[s,t] ← L[i, j]
5:              L[i, j] ← ∅
6:          end if
7:      else if I == Reproduce then
8:          if L[s,t] == ∅ then
9:              if ExistNeighborSameSpecies(L[i, j]) then
10:                 L[s,t] ←CreateIndividual(L[i, j].species)
11:             end if
12:         end if
13:     else if I == Predate then
14:         if L[i, j].species != L[s,t].species then
15:             if Predate(L[i, j], L[s,t]) then
16:                 L[s,t] ← ∅
17:             end if
18:         end if
19:     end if
20: end procedure
```

na matriz, sendo cada *work item* responsável pelos cálculos envolvendo sua célula correspondente. Enquanto na abordagem sequencial, o AC evolui uma célula por vez, na abordagem paralela todas as células do Autômato realizam uma ação no mesmo passo computacional, ou seja, L^2 células por vez.

Apesar da maior latência da memória global, como já foi discutido na Seção 2.2.2.1, ela foi a memória escolhida para armazenar a matriz devido duas razões principais. Primeiro, sua maior capacidade permite o armazenamento de matrizes maiores. Isto é especialmente importante no caso de ACs de maior dimensão, uma vez que as demandas de memória aumentam exponencialmente com a dimensão. Em segundo lugar, reduz a complexidade do algoritmo de simulação. Essas e outras características foram embasadas em trabalhos da literatura e discutidas na Seção 3.1.1.

De acordo com o modelo de execução OpenCL, os *work items* devem ser agrupados em *work groups*. Uma vez que a rede é armazenada na memória global, devemos agrupar *work itens* de forma que possamos nos beneficiar do acesso coalescido à memória. Assim, seguindo a abordagem apresentada por [45], decidimos agrupar nos mesmos *work groups*, *work items* que compartilham a mesma linha na matriz. Sendo assim, para cada linha da matriz existirá um *work group* associado. A quantidade de *work items* distribuidos neste

work group será igual a quantidade de células presentes da linha da matriz. Então dada uma matriz N^2, teremos N *work groups*, com N *work items* em cada um deles. Desta forma, é alcançado o máximo de paralelismo para este cenário.

4.3 Aceleração

4.3.1 *Pseudo-Random Number Generator*

Um dos principais gargalos na implementação de soluções em GPUs é a realização de transferências de dados entre a memória do *host* e a memória da GPU. O desempenho do nosso primeiro simulador foi muito afetado por constantes transferências de dados, devido a geração de matrizes de números aleatórios na CPU para serem consumidas pela GPU. Sendo assim, o primeiro passo para melhoria do algoritmo objetivou-se em reduzir a troca de dados realizadas na implementação inicial. Para eliminar essa comunicação, os próprios *work items* devem ser capazes de selecionar aleatoriamente células vizinhas e os tipos de interações entre eles.

Uma outra vantagem é que, com um Gerador de Números Pseudo-Aleatórios (*Pseudo-Random Number Generator* - PRNG) no *device*, além de reduzir a comunicação entre *host* e *device*, também será atingida uma redução da carga de trabalho da CPU, ou seja, menos código sequencial. Essa substituição é importante, pois as partes do programa que não podem ser paralelizadas limitam o aumento de velocidade geral disponível com o paralelismo [53].

Sendo assim, foi necessário implementar uma estrutura voltada para a geração de números pseudo-aleatórios em ambientes massivamente paralelos. Como o OpenCL ainda não fornece nenhuma mecanismo nativo para esse problema, a solução foi desenvolver um algoritmo paralelo para geração de números aleatórios.

```
1 int genRand(unsigned long int* seed, int limit){
2       (*seed) ^= (*seed) >> 12;
3       (*seed) ^= (*seed) << 25;
4       (*seed) ^= (*seed) >> 27;
5
6       int number_generated = ( (*seed) * 2185787173673268 53) %
           limit;
7       if (number_generated < 0) {
8             number_generated *= -1;
9       }
```

```
10      return number_generated;
11  }
```

Código Fonte 4.1: PRNG executado por cada *work item.*

O PRNG pode ser visto no código 4.1 e é uma implementação baseada no *Xorshift Genarator* [54], o qual se apresenta como um gerador simples e rápido, quando comparado com outras soluções [55]. Para cada tipo de plataforma, [56] determinaram o algoritmo mais apropriado para gerar cada tipo de número aleatório, sendo o *Xorshift* o melhor gerador para uma distribuição uniforme em uma GPU. Por esses motivos, foi escolhido o *Xorshift* para ser utilizado neste trabalho.

O Código 4.2 é o *kernel* em OpenCL com a implementação do AC, o qual descreve o comportamento de cada célula do AC. O código será executado por cada um dos *work-items* na GPU. A palavra reservada `__Kernel` informa que a função `cellular_automata` é um *kernel*, e o `__global`, entre parênteses, indica que os valores passados como atributos para o *kernel* serão posicionados na memória global da GPU. Os parâmetros são a matriz que representa o Autômato Celular e um *array* de sementes para geração de números pseudo-aleatórios.

```
1  __kernel void cellular_automata(__global int *matrix, __global
       int *seed){
2
3          __private int gid = get_global_id(0);
4          __private int lid = get_local_id(0);
5          __private int gp_id = get_group_id(0);
6          __private int neighbor;
7          __private int neighbor_position;
8          __private int action;
9          __private int size = 512;
10
11         __private unsigned long int seed_content = (unsigned
               long int)((gid + seed[0]) + (gid * seed[1]) + (gid *
               seed[2]));
12
13         action = genRand(&seed_content, 100);
14         neighbor_position = genRand(&seed_content, 8);
15
16         switch (neighbor_position) {
```

```
17          //right
18          case 0:
19                  neighbor = gp_id*size+((lid+1)%size);
20                  break;
21          //bottom
22          case 1:
23                  neighbor = (gp_id+1)%size * size + lid;
24                  break;
25          //top
26          case 2:
27                  neighbor = ((gp_id - 1 + size) % size) * size +
                       lid;
28                  break;
29          //left
30          case 3:
31                  neighbor = gp_id * size + ( (lid - 1 + size) %
                       size);
32                  break;
33          //bottom left
34          case 4:
35                  neighbor = ((gp_id + 1) % size) * size + ((lid -
                        1 + size) % size);
36                  break;
37          //top right
38          case 5:
39                  neighbor = ((gp_id - 1 + size) % size) * size +
                       ((lid + 1) % size);
40                  break;
41          //bottom right
42          case 6:
43                  neighbor = ((gp_id + 1) % size) * size + ((lid +
                        1) % size);
44                  break;
45          //top left
46          case 7:
47                  neighbor = ((gp_id - 1 + size) % size) * size +
                       ((lid - 1 + size) % size);
```

```
48                  break;
49          default:
50                  break;
51          }
52
53          //Move
54          if (action < 50) {
55                  if (matrix[gid] != 0 && matrix[neighbor] == 0){
56                          matrix[neighbor] = matrix[gid];
57                          matrix[gid] = 0;
58                  }
59          }
60          //Reproduce
61          else if (action >= 50 && action < 75) {
62                  if (matrix[gid] != 0 && matrix[neighbor] == 0){
63                          matrix[neighbor] = matrix[gid];
64                  }
65          }
66          //Predate
67          else if (action >= 75 && action < 100) {
68                  if (matrix[gid] != 0 && matrix[neighbor] != 0){
69                          if (((matrix[gid] + 1) % 3) == (matrix[
                               neighbor] %3)) {
70                                  matrix[neighbor] = 0;
71                          }
72                  }
73          }
74  }
```

Código Fonte 4.2: Implementação do Autômato Celular.

4.3.2 *sort* e *count*

A contagem é um procedimento trivial em uma configuração sequencial. Basicamente, é preciso declarar uma ou mais variáveis de contagem que serão incrementadas à medida que o processo de contagem progride. Em uma configuração paralela, onde temos potencialmente várias *threads*, a manutenção das variáveis de contagem é um pouco mais complicado, de-

vido às condições de corrida, ou seja, se um *work item* tentar incrementar uma posição de memória, os demais devem aguardar até que a ação seja finalizada, a fim de garantir que nenhum outro sobrescreva o valor e altere o resultado final. A abordagem simples seria o uso de operações de incremento atômico. No entanto, tornaria o procedimento de contagem paralela totalmente ineficiente, uma vez que todas as operações de incremento seriam serializadas. O OpenCL também não possui nenhuma função para contagem paralela eficiente de elementos de uma matriz.

A técnica de contagem proposta neste trabalho, foi construída com base em um algoritmo usado para o cálculo paralelo de histogramas, originalmente apresentados em [48]. A abordagem adotada neste trabalho difere em relação ao procedimento de contagem. Como no método anterior, começamos por ordenar os elementos. No entanto, no segundo passo, nós executamos um *kernel* responsável por detectar onde a sequência do elemento muda. Esse *kernel* é executado por uma série de *work items* iguais aos dos elementos da matriz. Cada *work item* irá verificar as posições da matriz correspondentes ao seu *global ID* e ao seu *global ID* $+1$. Se os valores armazenados nessas duas posições forem diferentes, a quantidade de elementos da sequência será igual ao ID do *work item*. Por exemplo, dado que a posição n possui o elemento i e a posição $n+1$ possui o elemento j, logo podemos inferir que existem $n+1$ elementos do tipo i. Esta situação está ilustrada na Figura 4.2.

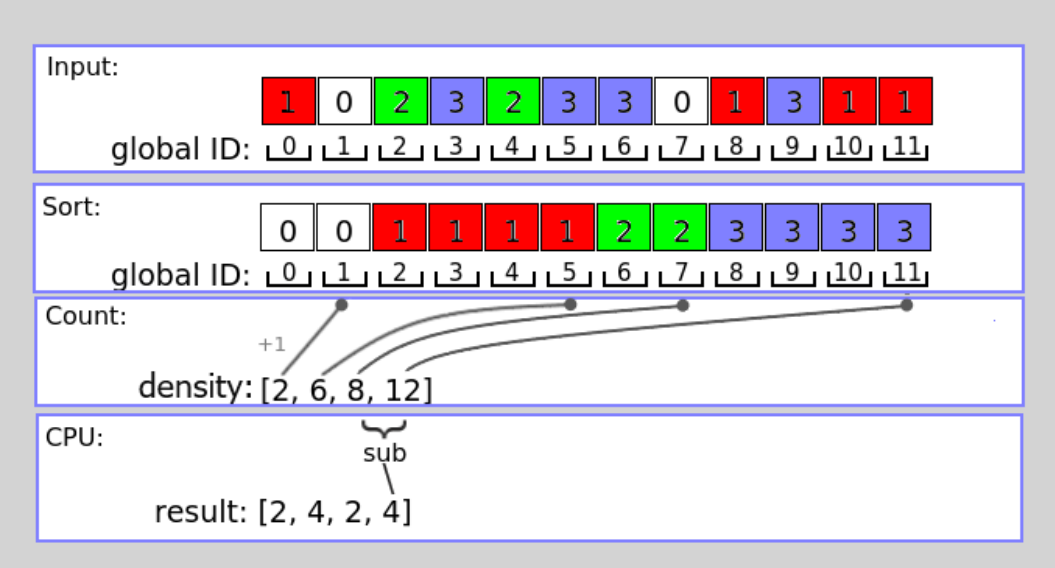


Figura 4.2: Sort and count.

O *kernel* utilizado para a contagem dos elementos, uma vez que a matriz já está ordenada, é apresentado no Código Fonte 4.3. Ele recebe como argumento a matriz ordenada e um *array* auxiliar de tamanho $n+1$, sendo n a quantidade de espécies presentes no AC. A

representação de espécies através de números inteiros simplifica a contagem porque permite estabelecer uma relação entre o tipo de elemento e a posição da matriz.

```
1  __kernel void count(__global int *matrix,  __global int *density
       ){
2
3      int gid = get_global_id(0);
4      private int pivot = matrix[gid];
5      private int next_pivot = matrix[gid+1];
6
7      if(pivot != next_pivot ){
8          density[pivot] = gid+1;
9      }
10 }
```

Código Fonte 4.3: ***Kernel count.***

A quantidade de espaço alocado para o *array* auxiliar depende do número de espécies presentes no AC. Por exemplo, suponha que, no caso mostrado na Figura 4.2, existem apenas três espécies diferentes, neste caso, a matriz auxiliar deve ter apenas quatro elementos, um para cada tipo de espécie e um para a quantidade de espaços vazios. Assim, o método permite um consumo de memória reduzido, no caso em que o número de espécies diferentes é conhecido com antecedência. Também é possível utilizar esta técnica quando não se sabe previamente a quantidade de espécies, mas, neste caso, o espaço alocado deve ser igual à quantidade máxima possível de espécies que podem existir no AC, ou seja, será o tamanho do próprio AC, assumindo que existe apenas um elemento de cada tipo.

Quanto ao algoritmo de ordenação, existem muitas implementações paralelas eficientes na literatura e qualquer uma pode ser utilizada. Uma técnica pode conseguir um melhor desempenho dependendo dos dados que estiverem sendo manipulados. Para este trabalho foi escolhido o *Bitonic Sort*, pois mostrou maior eficiência quando comparado com outros algoritmos paralelos em um cenário semelhante [57].

Capítulo 5

AVALIAÇÃO EXPERIMENTAL E RESULTADOS

Neste capítulo serão apresentados dados sobre aceleração de Autômatos Celulares, obtidos através de diferentes simulações de um AC. Será feito um comparativo entre uma solução sequencial e sua solução equivalente com paralelismo, bem como técnicas utilizadas para melhorar o desempenho da solução paralela.

5.1 Experimentos

Serão apresentados 3 cenários envolvendo Autômatos Celulares: 1 sequencial e 2 paralelos. Para cada um dos 3 cenários, foram realizadas 3 execuções com ACs de diferentes dimensões, 128^2, 256^2 e 512^2, totalizando 9 experimentos. Para todos os experimentos, os ACs foram modelados com as mesmas características descritas no Capítulo 4. Em todos os experimentos, cada Autômato Celular foi executado durante 10 mil ciclos. Quanto aos recursos computacionais, utilizados para a execução dos experimentos que serão apresentados neste capítulo, estão descritos na Tabela 5.1.

Tabela 5.1: Configuração de *hardware* e *software*

CPU	Intel® Xeon(R) CPU E5620 @ 2.40GHz x 4
GPU	NVidea Quadro 600, 96 cores, 1280MHz
OS	Ubuntu 14.04 x64

5.1.1 Experimento I - Sequencial

Como ponto de partida, foi realizada uma implementação do AC utilizando uma abordagem sequencial com C++. Esta implementação foi importante para servir como modelo

de referência de um AC convencional, pois um fator essencial na programação paralela é garantir a consistência dos dados, ou seja, o resultado obtido em uma implementação sequencial deve ser reproduzido também em uma implementação paralela. As abordagens são diferentes, porém, o resultado deve ser o mesmo. Então, esta implementação será usada na seção de análise dos resultados, como comparativo com as implementações paralelas. Para esta implementação, também foi coletado o tempo de execução após 10 mil ciclos, utilizando apenas a CPU, o qual está disposto na Figura 5.1.

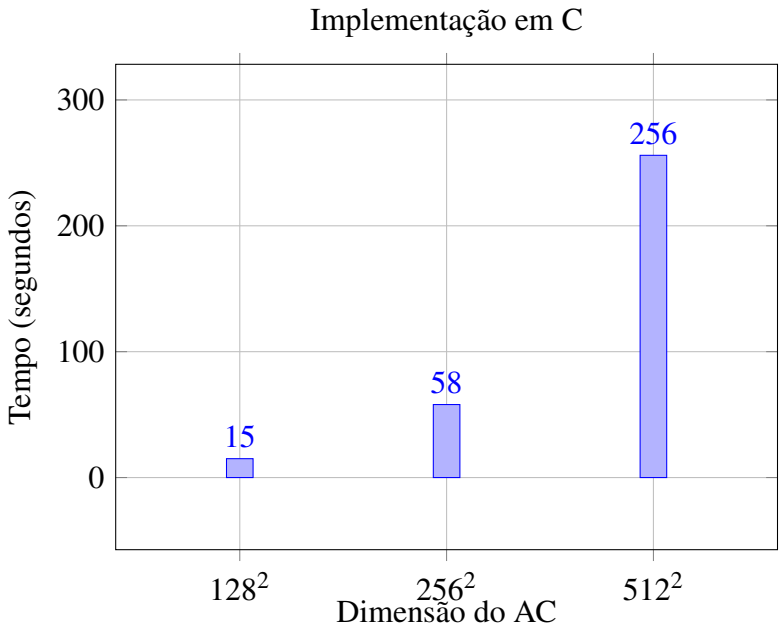


Figura 5.1: Tempo de execução do AC sequencial.

5.1.2 Experimento II - PRNG na CPU e interações na GPU

Neste experimento foi utilizado um algoritmo paralelo, implementado com OpenCL, para atualização de todas as células do AC. Como o OpenCL não fornece nenhum gerador de números aleatórios, a CPU ficou encarregada de realizar a escolha de todos os números aleatórios necessários para a simulação e mandar para a GPU, que por sua vez realiza as ações de forma paralela. A partir deste experimento, deve ser assumido CPU e GPU como *host* e *device*, respectivamente.

Iniciado o experimento, o *host* se encarregou de gerar o Autômato Celular. Em seguida, o AC foi posicionado na memória global do *device*. Sabe-se que para cada elemento (célula) do AC realizar uma ação, este precisará de um vizinho e a própria ação, os quais são escolhidos aleatoriamente. Portanto, a estratégia utilizada neste experimento se deu por reservar

mais 2 matrizes com as mesmas dimensões do AC. A primeira matriz foi povoada com N^2 números entre 0 e 7, correspondentes aos vizinhos. Desse mesmo modo, a CPU gerou mais N^2 números, variando entre 0 e 1, para representar as ações. Após todos os $2N^2$ números gerados, suficientes para 1 ciclos de execução do AC, a CPU encaminhava à GPU as 2 matrizes. Uma vez que todos os dados necessários para a execução do ciclo do AC estavam no *device* (matriz do AC, matriz dos vizinhos e a matriz com as ações), dava-se início à execução do algoritmo paralelo.

N^2 *work itens* foram disparados, 1 para cada posição do AC, e agrupados em N *work groups*. O próprio identificador do *work item* (GID) foi utilizado para fazer o mapeamento da posição da matriz. Nesse sentido, temos que o elemento na posição GID do AC irá tentar realizar a ação que está armazenada na posição GID da matriz de ações (respeitando as regras de movimento, reprodução e predação), sobre um dos seus 8 possíveis vizinhos, o qual está descrito na posição GID da matriz de vizinhos. Utilizando o GID para mapear as posição das matrizes, consegue-se maximizar o número de acessos coalescidos à memória. Na Figura 5.2 temos um detalhamento do tempo de execução gasto nessa solução durante 10 mil ciclos do AC.

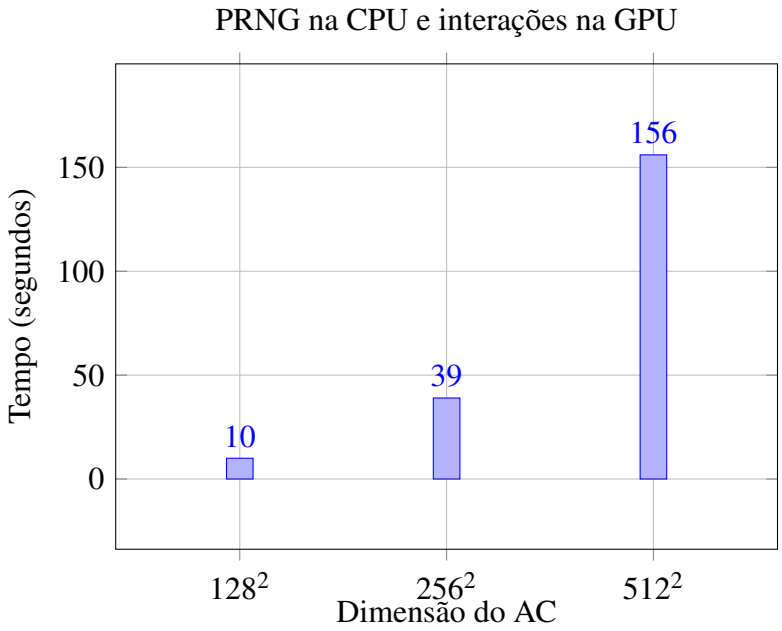


Figura 5.2: Tempo de execução do experimento II.

5.1.3 Experimento III - PRNG e interações na GPU

Este experimento é uma melhoria do algoritmo utilizado no caso anterior. Aqui foi aplicado o PRNG na própria GPU, objetivando reduzir a carga de trabalho do *host* e a comunicação entre *host* e *device*. As técnicas de aceleração mencionadas na Seção 4.3 foram aplicadas para este cenário.

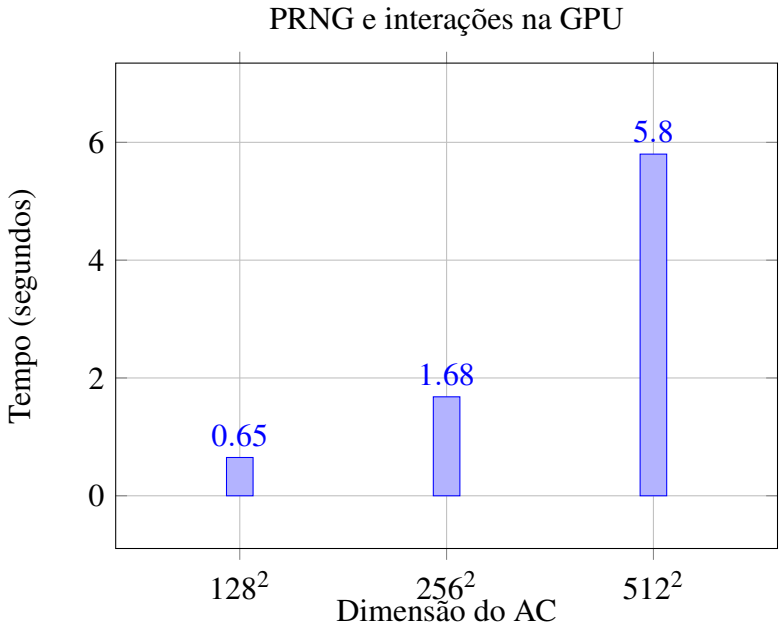


Figura 5.3: Tempo de execução do experimento III.

O tempo de execução gasto nesta abordagem, durante 10 mil ciclos, pode ser visualizado na Figura 5.3. Com um PRNG no *work item*, evitou-se a necessidade de envio dos dados do *host* para o *device* a cada ciclo, o que causou ganhos diretos no desempenho. Ao mesmo tempo, a carga de trabalho para geração se números aleatórios na CPU foi reduzida, pois uma parte da implementação pôde ser substituída de sequencial para paralelo.

5.1.4 Análises dos experimentos

5.1.4.1 Experimentos I e II

Como comentado anteriormente, quando algum algoritmo é paralelizado, este deve refletir o resultado da solução sequencial equivalente. Então, o primeiro passo será analisar a evolução e a formação de padrões entre o experimento sequencial e o paralelo. A Figura 5.4 ilustra as configurações iniciais e finais das duas abordagens. As cores vermelha, verde e azul representam as 3 espécies concorrentes no experimento, enquanto a cor branca representa os

espaços vazios. As subfiguras (a) e (c) mostram a distribuição aleatória inicial, enquanto (b) e (d) mostram a estrutura do AC após executar 10.000 ciclos. É importante notar que para os dois cenários foi utilizada a mesma configuração inicial.

Ambos os cenários refletiram comportamentos semelhantes, sendo possível observar a formação de padrões e a coexistência entre espécies, resultante das regras aplicadas durante a modelagem deste AC.

No experimento II o AC é enviado uma única vez, no início da execução, enquanto as matrizes de vizinhos e de ações são enviadas com novos dados a cada ciclo do AC. A diferença entre a implementação do 2º experimento e a solução sequencial é que, na abordagem paralela, todas as células do Autômato realizam uma ação no mesmo passo computacional, N^2 células por vez. Enquanto na abordagem sequencial, o AC evolui 1 célula por vez. O tempo de execução gasto em cada uma das abordagens pode ser visto na Figura 5.5.

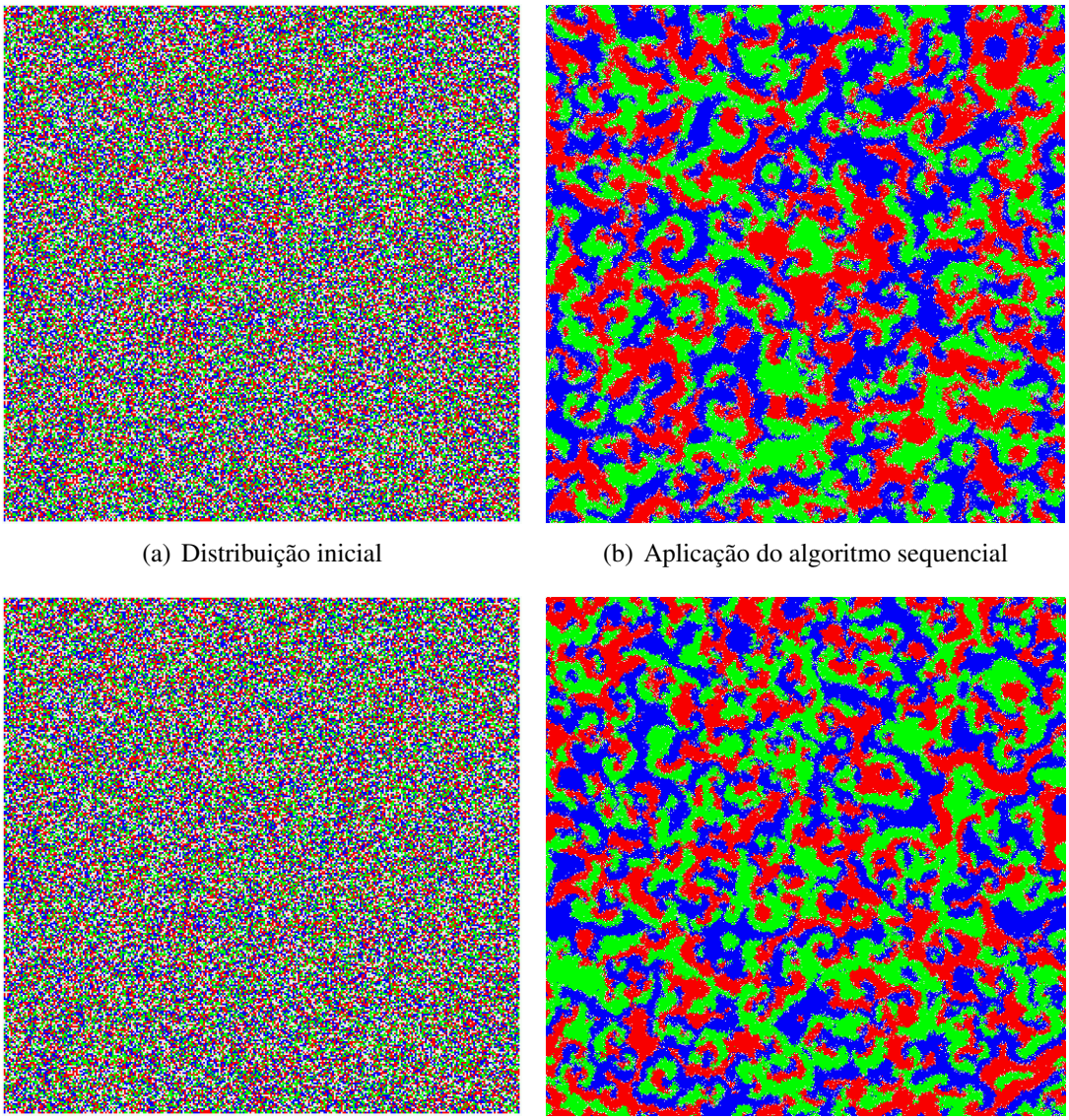
5.1.4.2 Experimentos II e III

Temos que no 2º experimento utilizamos o gerador de números pseudoaleatórios (PRNG) no *host*, com a função *rand* pertencente à biblioteca stdlib.h da linguagem C. Enquanto no 3º experimento, usamos um PRNG maciço no *device*, com sua própria implementação. Com os números aleatórios sendo gerados na própria GPU, o gargalo no desempenho produzido pela transferência de dados entre *host* e *device* pôde ser eliminado. A comparação entre os tempos gastos para ambos os experimentos é apresentado na figura 5.6. Ao observar a execução com AC de tamanho 512^2, é possível ver uma considerável diferença de desempenho entre as abordagens. Enquanto o experimento II necessitava de 2,6 minutos, no experimento III a execução foi concluída em apenas 5,8 segundos após a inicialização, o que significa uma aceleração de 26 vezes.

A partir desses dados podemos quantificar a aceleração obtida com o uso de um PRNG no *device*. A Figura 5.7 ilustra a aceleração que foi obtida ao adicionar o PRNG no *device*. A aceleração a partir do experimento II foi de 15, 23 e 26 para os ACs com dimensões 128^2, 256^2 e 512^2, respectivamente. Em comparação com a implementação sequencial, a aceleração alcançou até 44x.

5.1.4.3 *Sort* e *Count*

O contador apresentado na Seção 4.3.2 foi usado para capturar a evolução da densidade das espécies a cada 10 ciclos. O resultado pode ser visto na Figura 5.8, onde é possível obser-



(a) Distribuição inicial

(b) Aplicação do algoritmo sequencial

(c) Distribuição inicial

(d) Aplicação do algoritmo paralelo

Figura 5.4: Formação do Autômato Celular antes e depois de 10.000 ciclos. Comparativo entre modelo sequencial e paralelo.

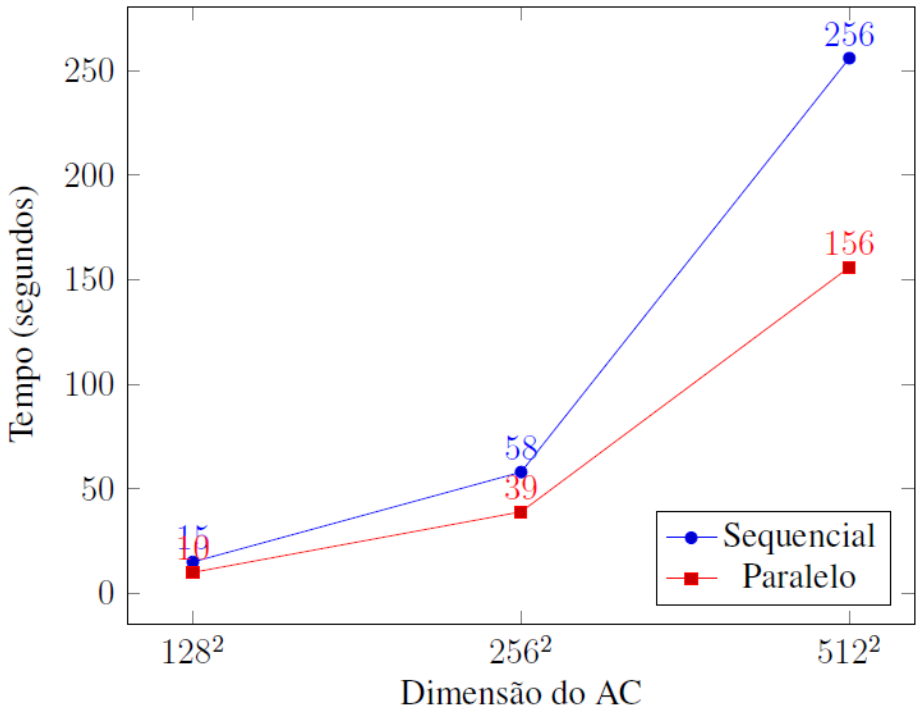


Figura 5.5: Tempo de execução, experimento I e II.

var um revezamento do domínio entre as espécies. Apesar de ser um cenário de competição, as três espécies podem coexistir devido a característica cíclica. As cores que representam a espécie seguem o mesmo padrão que a Figura 5.4, com exceção dos espaços vazios, que agora são representados pela cor preta.

Conforme mostrado na solução de Sham [48], a operação de contagem deve executar $n(\log n)^2$ operações em média. Esta quantidade é a aproximação do número de comparações feitas durante a ordenação com *Bitonic Sort*. No entanto, com a técnica apresentada neste trabalho, as operações entre contadores podem ser eliminadas. Portanto, uma vez que não precisamos configurar essas operações dentro do código de ordenação, qualquer algoritmo pode ser utilizado, incluindo soluções proprietárias de código fechado. Além disso, menos memória de GPU é gasta, uma vez que não é necessário armazenar contadores para cada posição da matriz.

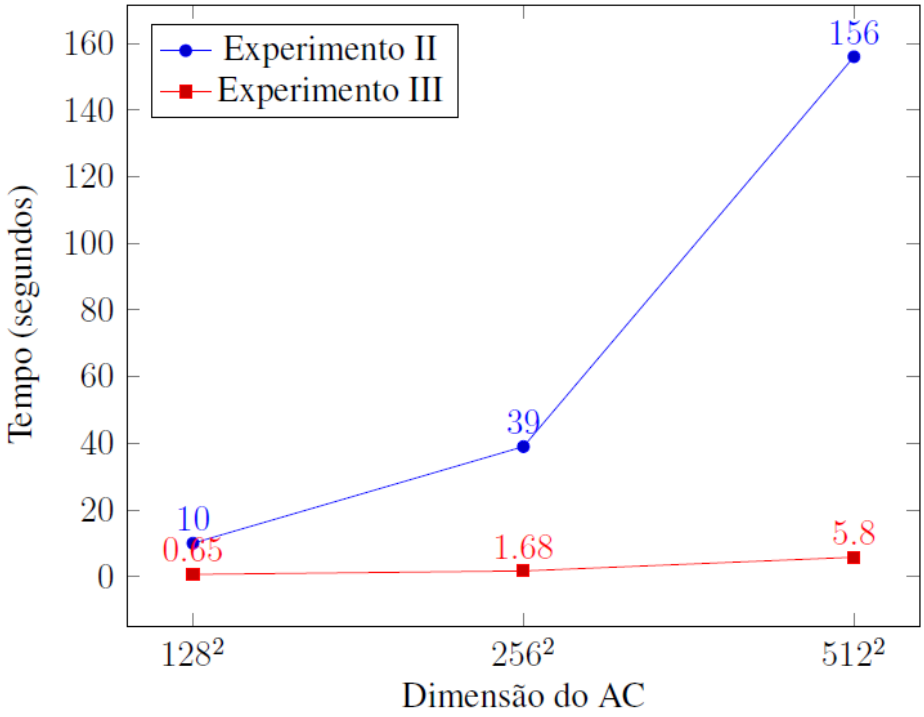


Figura 5.6: Tempo de excução, experimento II e III.

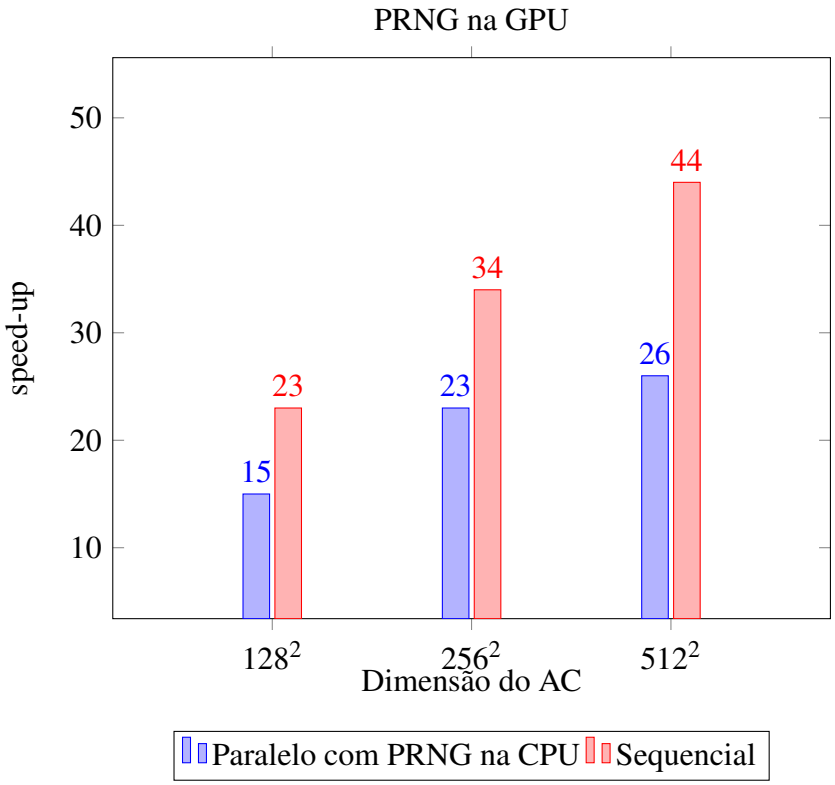


Figura 5.7: *Speedup* **do PRNG na GPU.**

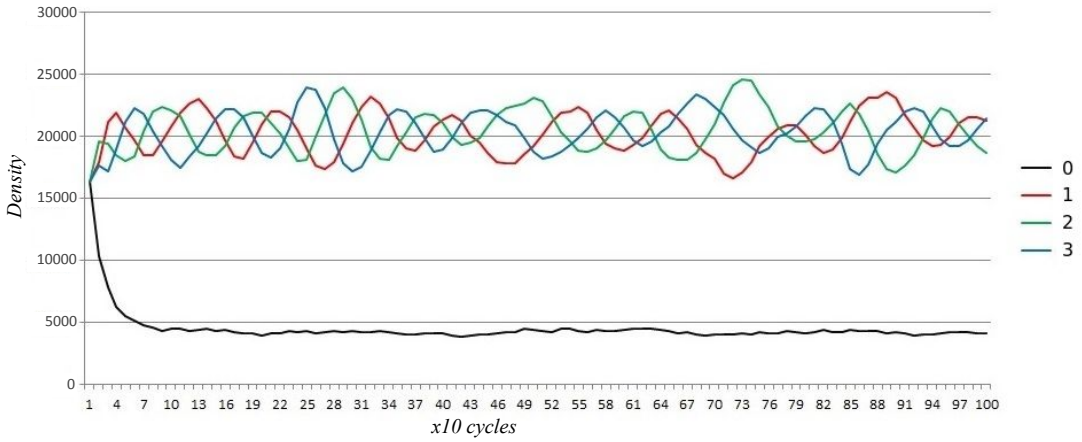


Figura 5.8: Densidade das espécies durante a simulação.

5.2 Publicações

5.2.1 Técnicas de aceleração

As técnicas desenvolvidas nesta pesquisa foram submetidas e aceitas para publicação no *8th Workshop on Applications For Multi-Core Architectures* – WAMCA, na linha de Aplicações, Algoritmos e Modelos de Programação. O trabalho que será publicado encontra-se no apêndice A deste trabalho.

5.2.2 Simulação estocástica de sistemas naturais

O algoritmo desenvolvido nesta pesquisa foi aplicado em um estudo envolvendo Autômatos Celulares para a identificação e quantificação do caos em simulações estocásticas utilizadas para estudar a biodiversidade na natureza. O trabalho sugere uma nova abordagem, baseada no conceito de distância de Hamming e na contagem da densidade de máximos da abundância das espécies, para a identificação da presença de caos na evolução estocástica e para quantificar as medidas de correlação através de uma realização experimental simples com ACs. Os resultados do trabalho podem ser amplamente utilizados para estudar processos complexos, como os que aparecem em Geologia, Meteorologia, Biologia Evolutiva e em muitas outras áreas de ciência não-linear. O estudo pode ser encontrado no apêndice B deste trabalho.

Capítulo 6

CONCLUSÃO

Este trabalho buscou aplicar métodos e técnicas computacionais voltados ao processamento de alto desempenho, com computação paralela e GPUs, para aceleração de experimentos na área de Vida Artificial, usando Autômatos Celulares para simulação de sistemas dinâmicos complexos. O tipo dos dados do objeto de estudo possibilitou adaptações e melhorias dos algoritmos encontrados na literatura. No caso do contador, foi possível chegar na solução usando menos memória e quantidade de instruções.

A solução apresentada neste trabalho foi capaz de calcular e acompanhar de forma eficiente a evolução de um AC. Foi alcançado um *speedup* de até 26x em relação à implementação padrão com paralelismo e até 44x quando comparada com uma implementação eficiente em C. Os experimentos foram executados durante 10 mil ciclos, mas se analisarmos em uma escala maior, 1 milhão de ciclos por exemplo, essa simulação com o algoritmo sequencial e com o primeiro algoritmo paralelo, levaria 7 e 4 horas, respectivamente, enquanto que com o algoritmo apresentado aqui, apenas 9 minutos seriam suficientes. Este aumento de desempenho também é importante para simulações envolvendo matrizes maiores, já que existe uma complexidade quadrática com relação ao tamanho da matriz.

É importante ressaltar que os resultados foram obtidos com *hardware* de baixo custo (como mostrado na Tabela 5.1 do Capítulo 5), sem a necessidade de adquirir componentes caros ou estruturas computacionais sofisticadas como *clusters*. Como trabalhos futuros, pretende-se associar a entropia do AC como regra para sua evolução. Para isso, o contador desenvolvido nesta pesquisa será essencial, uma vez que o cálculo necessitará dos valores das densidades de cada espécie. Além disso, estima-se que serão necessários bilhões de ciclos de execução do AC, ou seja, inviável o uso de computação sequencial ou de alguma implementação paralela simples.

REFERÊNCIAS

[1] C. G. Langton, *Artificial life: An overview*. Mit Press, 1997.

[2] Y. Mo, B. Ren, W. Yang, and J. Shuai, "The 3-dimensional cellular automata for hiv infection," *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 399, pp. 31–39, 2014.

[3] A. T. Crooks and A. B. Hailegiorgis, "An agent-based modeling approach applied to the spread of cholera," *Environmental Modelling & Software*, vol. 62, pp. 164–177, 2014.

[4] M. Khabouze, K. Hattaf, and N. Yousfi, "Three-dimensional cellular automaton for modeling the hepatitis b virus infection," *International Journal for Computational Biology (IJCB)*, vol. 4, no. 1, pp. 13–20, 2015.

[5] L. Chaves and L. Monteiro, "Oscillations in an epidemiological model based on asynchronous probabilistic cellular automaton," *Ecological Complexity*, vol. 31, pp. 57–63, 2017.

[6] X. Han, B. Chen, and C. Hui, "Symmetry breaking in cyclic competition by niche construction," *Applied Mathematics and Computation*, vol. 284, pp. 66–78, 2016.

[7] U. Dieckmann, R. Law, and J. A. Metz, *The geometry of ecological interactions: simplifying spatial complexity*. Cambridge University Press, 2000.

[8] S. Nee, "Evolutionary dynamics: Exploring the equations of life," *Nature*, vol. 444, no. 7115, p. 37, 2006.

[9] T. Reichenbach, M. Mobilia, and E. Frey, "Mobility promotes and jeopardizes biodiversity in rock-paper-scissors games," *arXiv preprint arXiv:0709.0217*, 2007.

[10] M. Pinsky and S. Karlin, *An introduction to stochastic modeling*. Academic press, 2010.

[11] J. C. Claussen and A. Traulsen, "Cyclic dominance and biodiversity in well-mixed populations," *Physical review letters*, vol. 100, no. 5, p. 058104, 2008.

[12] C. G. Langton *et al.*, "Artificial life," 1989.

[13] L. Correia, "Vida artificial," in *XXV Congresso da Sociedade Brasileira de Computação, julho, UNISINOS–São Leopoldo/RS*, 2005.

[14] A. M. Turing, "On computable numbers, with an application to the entscheidungsproblem," *Proceedings of the London mathematical society*, vol. 2, no. 1, pp. 230–265, 1937.

[15] A. Turing, "The chemical theory of 185. morphogenesis," *Phil. Trans. Roy. Soc. B*, vol. 7, 1952.

[16] J. Von Neumann, A. W. Burks *et al.*, "Theory of self-reproducing automata," *IEEE Transactions on Neural Networks*, vol. 5, no. 1, pp. 3–14, 1966.

[17] W. G. Walter, "An imitation of life," *Scientific American*, vol. 182, no. 5, pp. 42–45, 1950.

[18] C. Darwin, "On the origin of species," 1859.

[19] J. H. Holland, "Adaptation in natural and artificial systems. an introductory analysis with application to biology, control, and artificial intelligence," *Ann Arbor, MI: University of Michigan Press*, 1975.

[20] S. Wolfram, "Universality and complexity in cellular automata," *Physica D: Nonlinear Phenomena*, vol. 10, no. 1-2, pp. 1–35, 1984.

[21] J. Santos and Á. Monteagudo, "Study of cancer hallmarks relevance using a cellular automaton tumor growth model," in *International Conference on Parallel Problem Solving from Nature*. Springer, 2012, pp. 489–499.

[22] S. W. McCue, D. G. Mallet *et al.*, "A cellular automata model to investigate immune cell–tumor cell interactions in growing tumors in two spatial dimensions," in *Mathematical Models of Tumor-Immune System Dynamics*. Springer, 2014, pp. 223–251.

[23] A. K. Cooper and P. S. Kim, "A cellular automata and a partial differential equation model of tumor–immune dynamics and chemotaxis," in *Mathematical Models of Tumor-Immune System Dynamics*. Springer, 2014, pp. 21–46.

[24] S. J. McCoy, S. Allesina, and C. A. Pfister, "Ocean acidification affects competition for space: projections of community structure using cellular automata," in *Proc. R. Soc. B*, vol. 283, no. 1826. The Royal Society, 2016, p. 20152561.

[25] B. Kerr, M. A. Riley, M. W. Feldman, and B. J. Bohannan, "Local dispersal promotes biodiversity in a real-life game of rock–paper–scissors," *Nature*, vol. 418, no. 6894, pp. 171–174, 2002.

[26] H. Majeed, O. Gillor, B. Kerr, and M. A. Riley, "Competitive interactions in escherichia coli populations: the role of bacteriocins," *The ISME journal*, vol. 5, no. 1, pp. 71–81, 2011.

[27] J. J. Arsanjani, M. Helbich, W. Kainz, and A. D. Boloorani, "Integration of logistic regression, markov chain and cellular automata models to simulate urban expansion," *International Journal of Applied Earth Observation and Geoinformation*, vol. 21, pp. 265–275, 2013.

[28] D. Griffeath, "Self-organizing two-dimensional cellular automata: 10 still frames," in *Designing Beauty: The Art of Cellular Automata*. Springer, 2016, pp. 1–12.

[29] C. Mizas, G. C. Sirakoulis, V. Mardiris, I. Karafyllidis, N. Glykos, and R. Sandaltzopoulos, "Dna cellular automata," in *Designing Beauty: The Art of Cellular Automata*. Springer, 2016, pp. 127–128.

[30] H. Silva and M. Martins, "A cellular automata model for cell differentiation," *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 322, pp. 555–566, 2003.

[31] J. Jackson and L. Buss, "Alleopathy and spatial competition among coral reef invertebrates," *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 72, no. 12, pp. 5160–5163, 1975.

[32] B. Sinervo and C. M. Lively, "The rock-paper-scissors game and the evolution of alternative male strategies," *Nature*, vol. 380, no. 6571, p. 240, 1996.

[33] H. Shi, W.-X. Wang, R. Yang, and Y.-C. Lai, "Basins of attraction for species extinction and coexistence in spatial rock-paper-scissors games," *Physical Review E*, vol. 81, no. 3, p. 030901, 2010.

[34] P. G. Esteban and A. Rodríguez-Patón, "Simulating a rock-scissors-paper bacterial game with a discrete cellular automaton," in *International Work-Conference on the Interplay Between Natural and Artificial Computation*. Springer, 2011, pp. 363–370.

[35] T. Nagatani, K. Sato, G. Ichinose, and K.-i. Tainaka, "Space promotes the coexistence of species: Effective medium approximation for rock-paper-scissors system," *Ecological Modelling*, vol. 359, pp. 240–245, 2017.

[36] G. Moore, "Cramming more components onto integrated circuits', electronics, vol. 38, no. 8," 1965.

[37] G. E. Moore *et al.*, "Progress in digital integrated electronics," in *Electron Devices Meeting*, vol. 21, 1975, pp. 11–13.

[38] R. Banger and K. Bhattacharyya, *OpenCL Programming by Example*. Packt Publishing, 2013. [Online]. Available: https://books.google.com.br/books?id=W2lpAgAAQBAJ

[39] Khronos OpenCL Working Group, *The OpenCL Specification, version 1.2 revision 19*, 2012.

[40] J. Bikker, "Ray tracing for real-time games," Ph.D. dissertation, TU Delft, 2012.

[41] NVidia, *CUDA C Programming Guide PG-02829-001_v8.0*, 2017.

[42] AMD, *OpenCL User Guide rev1.0*, 2015.

[43] J. Caux, P. Siregar, and D. Hill, "Accelerating 3d cellular automata computation with gp gpu in the context of integrative biology," in *Cellular Automata-Innovative Modelling for Science and Engineering*. InTech, 2011.

[44] P. Topa and P. Młocek, "Using shared memory as a cache in high performance cellular automata water flow simulations," *Computer Science*, vol. 14, no. 3, p. 385, 2013.

[45] P. Topa, "Cellular automata model tuned for efficient computation on gpu with global memory cache," in *Parallel, Distributed and Network-Based Processing (PDP), 2014 22nd Euromicro International Conference on*. IEEE, 2014, pp. 380–383.

[46] F. NVidia, "Nvidia's next generation cuda compute architecture," *NVidia, Santa Clara, Calif, USA*, 2009.

[47] S. Chen, J. Qin, Y. Xie, W.-M. Pang, and P.-A. Heng, "Cuda-based acceleration and algorithm refinement for volume image registration," in *BioMedical Information Engineering, 2009. FBIE 2009. International Conference on Future*. IEEE, 2009, pp. 544–547.

[48] R. Shams, P. Sadeghi, R. Kennedy, and R. Hartley, "Parallel computation of mutual information on the gpu with application to real-time registration of 3d medical images," *Computer methods and programs in biomedicine*, vol. 99, no. 2, pp. 133–146, 2010.

[49] C. Vetter and R. Westermann, "Optimized gpu histograms for multi-modal registration," in *Biomedical Imaging: From Nano to Macro, 2011 IEEE International Symposium on*. IEEE, 2011, pp. 1227–1230.

[50] J. Gómez-Luna, J. M. González-Linares, J. I. Benavides, and N. Guil, "An optimized approach to histogram computation on gpu," *Machine Vision and Applications*, vol. 24, no. 5, pp. 899–908, 2013.

[51] R. Shams and N. Barnes, "Speeding up mutual information computation using nvidia cuda hardware," in *9th Biennial Conference of the Australian Pattern Recognition Society on Digital Image Computing Techniques and Applications (DICTA 2007)*, Dec 2007, pp. 555–560.

[52] P. Avelino, D. Bazeia, L. Losano, and J. Menezes, "von neummann's and related scaling laws in rock-paper-scissors-type games," *Physical Review E*, vol. 86, no. 3, p. 031119, 2012.

[53] G. M. Amdahl, "Validity of the single processor approach to achieving large scale computing capabilities," in *Proceedings of the April 18-20, 1967, spring joint computer conference*. ACM, 1967, pp. 483–485.

[54] G. Marsaglia *et al.*, "Xorshift rngs," *Journal of Statistical Software*, vol. 8, no. 14, pp. 1–6, 2003.

[55] R. P. Brent *et al.*, "Note on marsaglia's xorshift random number generators," *Journal of Statistical Software*, vol. 11, no. 5, pp. 1–4, 2004.

[56] D. B. Thomas, L. Howes, and W. Luk, "A comparison of cpus, gpus, fpgas, and massively parallel processor arrays for random number generation," in *Proceedings of the ACM/SIGDA international symposium on Field programmable gate arrays*. ACM, 2009, pp. 63–72.

[57] F. G. Khan, O. U. Khan, B. Montrucchio, and P. Giaccone, “Analysis of fast parallel sorting algorithms for gpu architectures’,” in *Frontiers of Information Technology (FIT), 2011*. IEEE, 2011, pp. 173–178.

Apendice A

APENDICE A

A seguir encontra-se um *paper* atualmente aceito para publicação no *8th Workshop on Applications For Multi-Core Architectures* – WAMCA, na linha de Aplicações, Algoritmos e Modelos de Programação.

Pereira, M. B. P. N., Pagot, Gomes Júnior, J. S., C. A., Ramos, J. G. G. S., Brito, Nascimento, T. P. & A. V., De Oliveira, B., (2017). Acceleration of Cellular Automata through Parallel Computing with OpenCL.

Acceleration of Cellular Automata through Parallel Computing with OpenCL

Maelso Bruno Pacheco Nunes Pereira[1], Christian Azambuja Pagot[1], Josue da Silva Gomes Junior[1], Jorge Gabriel Gomes de Souza Ramos[2], Tiago P. Nascimento[1], Alisson V. Brito[1]

[1]Centro de Informatica - CI
[2]Departamento de Fisica
Universidade Federal da Paraiba - UFPB
Joao Pessoa, Brazil
Email: maelso.bruno@dce.ufpb.br, christian@ci.ufpb.br, alisson@ci.ufpb.br

***Abstract*— Cellular Automata (CA) have its origins in the work of Von Neumann and, since then, have become an important research topic with a wide range of applications, ranging from DNA sequencing to ecological dynamics. One aspect that may be of interest during a CA simulation is the evolution in the number of individuals of each species along time. This analysis can give important information about the dominance of certain species in a dynamical system, or identify aspects that might favor one or more species in detriment of others. CA simulations can be computationally expensive tasks. Depending on the simulation domain size, number of dimensions or the number of individuals, these simulations can take several hours to complete. The evaluation of the number of individuals at each simulation step is an equally expensive task. Several acceleration techniques have been developed to improve the performance of CA simulations, and some of them take into account the evolution in the number of individuals along the simulation. In this work we propose an efficient CA simulator which is capable of efficiently evaluate the evolution in the number of individuals of each species. High performance is obtained through the use of the massive parallelism of GPUs. The presented approach achieved a speed-up of 44 times when compared to a sequential implementation, and 26 times when compared to a traditional approach also in GPU.**

I. Introduction

Cellular Automata (CA) idealized by Ulam and Jonh Von Neumann in the 40s and published by Burk [1], consists of a self-replicating abstraction model of living organisms, for complex system simulation. A CA is represented by an n-dimensional grid of cells, where each cell of this grid is occupied by an automaton. Mainly addressed during Computer Theory studies, they are finite state machines, which receive a stimulus, execute a transition rule or function, and change state. Each cell in the network can be in any of the possible existing states, which are updated periodically under the same rules. The state of a cell is affected by neighboring cell states as they interact with each other.

CA are often used to represent dynamic evolutionary systems. The configurations produced help us understand the mechanics of formation, propagation and pattern interaction in natural systems. Among the applications using CA there are, interactions between bacteria [2] [3], study of tumor growth [4] [5] [6], ecological dynamics [7], self-organization [8], modeling of DNA sequence [9], etc.

The computational progress in relation to the computing power and data storage has increased the diversity of research on this field. Recently, parallel computing has allowed the development of more elaborate systems, since many-cores architectures (*ie.* Graphics Processing Units (GPUs)) are now being used to accelerate such simulations. The simulation of Cellular Automata (CA), including counting the number of each species at certain frequency is an expensive computational task. Several acceleration techniques have been developed to improve the performance of CA simulations, and some of them take into account the evolution of the number of individuals along the simulation [10][11][12][13][14].

For some applications, like study of species evolution, equilibrium and competition, is essential to know how many specie there are in the simulation. This would be a trivial task for a sequential implementation, but is it not for a parallel one. In this work we propose a parallel implementation of a Cellular Automaton simulator running on GPU, programmed in OpenCL. We present an efficient approach to count the number of species at each 10 simulation cycles, which resulted in an acceleration of 44 times compared to the sequential version of the same CA, and 26 times compared to a traditional approach implemented in the same GPU. This approach was applied in another work to validate a method to characterize chaotic systems [15].

II. Related work

The simulation of CA and the tracking the quantity of each specie are problem that demand the implementation of other important features, such as the massive generation of pseudo-random numbers and the ordering of species to accelerate the counting. In the literature is possible to see an special concern related to the problem of massive generation of numbers. The massive generation of pseudo-random numbers is recurring in some systems, such as the Cellular Automata and evolutionary systems. It is seen in the literature a concern in the generation of pseudo-random numbers, such in the quality of the distribution, as in obtaining gain of performance.

The work of Salmon [16] presents an API for generating pseudo-random numbers, using a multi-stream and sub-stream approaches. In the multi-stream approach, the

applications use K as a single key for each computational unit and generate their own set of pseudo-random numbers in parallel by incrementing their own counters. In the sub-stream approach, the applications split and share the counter among all computing unit, which generate their own pseudo-random number, using the same key.

In [17], the authors suggest an implementation of the Mersenne Twister (MT) algorithm in parallel using CUDA. MT is one of the most well-known and tested pseudo-random number generation algorithms. It presents some characteristics such as: efficient memory usage, good distribution and high performance. In [18] is presented a library for generating pseudo-random numbers in CPU and GPU, in addition to a comparative study between existing libraries and the proposed one applying Monte Carlo simulations. In [19] a pseudo-random number generator is presented based on the worst case of lattice problems, and GPU tests have reached results close to expected based on the theoretical reference values.

The other important feature is to calculate the number of species at each simulation time-step. Some works have dedicated to calculate this number in order to verify if in a competition system, a specie goes extinct or there may be coexistence between them [20], or to analyze the spread rate of infectious agents [10][11][12][13] and to identify factors that favor or disfavor species [14].

Other works calculate the number of elements to generate histograms [21] [22] [23]. In our work, we implement an accelerated approach to count the number of species based on the technique presented by [21], which is an advance in relation to a previous solution [22]. In that work, an extra variable is assigned for each elements of the matrix. In our approach, the identification number of the work item is used instead, saving memory spaces.

III. Parallel Programming with OpenCL

Meant initially to accelerate graphics applications, the Graphics Processing Units (GPUs) have quickly evolved into massively parallel processors capable of executing general purpose computations. Among the frameworks currently available for GPU programming, CUDA and OpenCL are the most popular. CUDA is proprietary and meant to be used with NVidia GPUs. OpenCL, on the other hand, is an open and cross-platform standard designed for the programming of heterogeneous hardware. In this work we have opted for using the OpenCL framework.

The execution model assumes that the OpenCL work-items (a.k.a. threads) are elements of an n-dimensional indexable space called NDRange [24]. Each work-item represents one instance of an OpenCL kernel, actually a function to be executed in a OpenCL device, and they are normally grouped into work-groups. Work-items are split across the OpenCL platform such that all work-items of a work-group get assigned to the same compute unit. Also, work-items in the same work-group can be synchronized through the use of barriers and fences. The only way to synchronize work-items located in distinct work-groups is to start the execution of a new kernel.

The memory model describes the hierarchical OpenCL memory structure. At the lowest level there is the global memory, which will be usually associated to the largest chunk of memory available on the device. It can be read and written by any work-item in execution and will usually present the higher latency. The constant memory is a read-only, and usually very small, piece of memory that is heavily cached. The constant memory is usually used to store small amounts of data that must be read very frequently by the work-items. The constant memory can only be written, *i.e.* initialized, by the host and its contents persist along the kernel calls.

The local memory is a small piece of read-write memory located at each compute unit. Work-items residing in the same work-group (thus, being executed by the same compute unit) might use the local memory to exchange information. Currently, there is no way for work-items located in distinct work-groups to exchange information through the local memory. In this case, the work-items must resort to the slower global memory, which is visible to all work-items. Private memory, in the form of registers, are the fastest memory available, and can be read and written only by the current work-item. Registers are usually used to store local variables, including static arrays.

A. Performance

In order to take full advantage of the massive parallelism of the GPU we have to keep all its processing elements as busy as possible, maximizing utilization. Utilization can be defined as the percentage of processing elements that are active in a given instant of time. Among the factors that might affect the utilization, we could mention the data locality, the code execution average flow path, the number of registers used by the kernel, among others. The hardware of the GPU is optimized for coalesced memory access, *i.e.* when work-items with sequential IDs access sequential memory positions.

Certain subgroups of work-items are executed in SIMD fashion. Execution flow path divergence among work-items in these subgroups causes the execution of all diverging work-items to be serialized by the GPU. These subgroups are not actually clearly defined in the OpenCL specification, but correspond to *warps* on the NVidia nomenclature [25] or *wavefronts* in the AMD specification [26]. Thus, it is advisable to avoid flow path divergence among work-items, specifically to those pertaining to those specific subgroups.

Although the maximum number of work-items per work group is prescribed by each vendor, theses numbers are usually based on best cases. Since the number of registers available is limited, the actual maximum number of work-items per work group will depend on the number of available registers and the number of registers needed by the kernel. Thus, it is advisable to always keep the number of private variables of the kernel at a minimum such that more work-items can be executed simultaneously.

IV. IMPLEMENTATION

The design of CA can be parameterized by several factors, including dimension, number of cells, neighborhood type, number of species and the types of interactions between them, among others. This work is focused on bidimensional CA, nonetheless, the extension of the concepts herein presented to higher dimensional CA is straightforward.

The basic interactions will involve mobility, reproduction and predation, each one occurring randomly with the following prescribed probabilities: mobility = 0.5, reproduction = 0.25 and predation = 0.25. The range of the interactions is local and described by the Moore's neighborhood. We assume that the lattice present cyclic boundary conditions, *i.e.* the neighborhood of cells at the boundaries will include cells at the opposite boundary. Figure 1 shows a selected individual (black) and the cells with whom it may interact with (gray). The remaining cells (white) are unreachable.

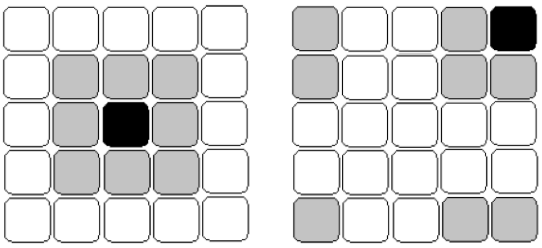


Fig. 1. Range of interactions

Each simulation timestep comprises four steps, in the following order: 1) cell selection; 2) neighbor selection; 3) selection of interaction type and, finally, 4) lattice update. Initially, a cell $L[i, j]$ is randomly selected from the lattice. If $L[i, j]$ is empty, no changes are applied to the lattice and the current simulation time-step is finished. If $L[i, j]$ is not empty, a neighboring cell $L[s, t]$ is randomly selected. In the next step, one of the three possible interaction types is randomly selected according to their probabilities and it is verified if the selected interaction type (I) is valid for $L[s, t]$. If it is valid, it is executed according to a cyclic competition system [27] and the lattice is updated. If it is not valid, no changes are applied to the lattice and the current simulation time-step is finished. Details regarding the interaction type validity and lattice update are presented in Algorithm 1. After the execution of these four steps, we say that one interaction happened in the system. At the end of L^2 interactions, one cycle is counted.

A. OpenCL Implementation

We are interested in improving the performance of CA simulations through the use of massively parallel hardware. In this case, the usual approach is to have as many work-items as cells in the lattice, being each work-item responsible for the computations involving its corresponding cell. While in the sequential approach the CA evolves a cell at a time, in the parallel approach all Automaton cells perform an action on the same computational step, L^2 cells at a time.

Algorithm 1 Check the validity of interactions and update lattice

```
1:  procedure CHECKVALIDITYUPDATE(L, I, i, j, s, t)
2:      if I == Move then
3:          if L[s,t] == ∅ then
4:              L[s,t] ← L[i,j]
5:              L[i,j] ← ∅
6:          end if
7:      else if I == Reproduce then
8:          if L[s,t] == ∅ then
9:              if ExistNeighborSameSpecies(L[i,j]) then
10:                 L[s,t] ←CreateIndividual(L[i,j].species)
11:             end if
12:         end if
13:     else if I == Predate then
14:         if L[i,j].species != L[s,t].species then
15:             if Predate(L[i,j], L[s,t]) then
16:                 L[s,t] ← ∅
17:             end if
18:         end if
19:     end if
20: end procedure
```

Despite the higher latency of the global memory, as already discussed in Section III, it was the memory chosen to store the lattice due two main reasons. First, its larger capacity allows for the storage of larger lattices. This is specially important in the case of higher dimensional CA, where memory demands increases exponentially with dimension. Second, it reduces memory consumption and the complexity of the simulation algorithm. Some methods advocate the use of the faster local memory in an attempt to increase performance. Since the lattice will usually not fit into the smaller local memory, it must be broken into smaller pieces, or tiles. These tiles can now be loaded into the local memories where they can be processed in parallel, but independently by distinct work-groups. The fact that tiles are processed independently poses a problem to CA simulations because, in this case, the domain continuity assumption is violated and alterations occurred in a given tile will not propagate to the rest of the lattice. The usual approach, in this case, is to replicate the boundary cell information to other tiles. Despite the effectiveness, this approach implies higher memory consumption. Additionally, intricate synchronization strategies must be employed in order to allow for the proper propagation of lattice changes among tiles. The higher computational demands associated to this approach will usually outperform the benefits obtained with the use of local memories, as already observed by Topa [28].

According to the OpenCL execution model, work-items must be further grouped into work-groups. Since the lattice is stored in the global memory, we should group work-items such that we could benefit from coalesced memory access. Thus, following the approach presented by Topa [28], we

have decided to group, under the same work-groups, work-items sharing the same row in the lattice.

In the first version of our simulator, the host was responsible for computing the initial state of the lattice L and for generating, before each simulation timestep, a neighbor positions matrix G and a interaction matrix I. Right before the first timestep, the three matrices should be sent to the GPU which, in turn, would evaluate the first interaction evaluating the interaction between the lattice element $L[i, j]$ and its selected neighbor $L[G[i, j]]$ according to the selected interaction $I[i, j]$. From the second simulation timestep on, only G and I needed to be recomputed by the CPU and sent to the GPU. Despite its effectiveness and improved performance over sequential simulators, this approach is still quite inefficient due the need of constant data transfers between the CPU and the GPU. Thus, a second version of the simulator, which completely avoids data transfers between CPU and GPU, was developed. Its implementation is described in the next section.

B. Improved CA Simulator

1) Pseudo-Random Number Generator: The performance of our first simulator is greatly affected by the constant data transfers between CPU and GPU. In order to eliminate this communication, work-items themselves should be able to randomly select neighboring cells and interaction types. Thus, a framework targeted at the generation of pseudo-random numbers in massively parallel environments was implemented.

2) Sort and count: Counting is a trivial procedure in a sequential setting. Basically, one has to declare one or more counting variables which will be incremented as the counting procedure progresses. In a parallel setting, where we have potentially several counting threads, the maintenance of counting variables is a little more tricky due race conditions. The naïve approach would be to use atomic increment operations. However, it would render the parallel counting procedure totally inefficient, since all increment operations would be serialized.

The counting procedure proposed in this work was built upon an algorithm used for the parallel computation of histograms originally presented in [21]. According to this algorithm, for each position in a matrix there is, in addition to its value, a counter which is initialized to one. During the execution of the sorting algorithm, if two neighboring elements are identical, the one on the right receives the value stored in the counter of the on the left, while this one receives zero. When the sorting is finished, all counters related to a sequence are zeroed, with the exception of the last one, which will contain the number of elements in the sequence.

The approach adopted in this work is similar to that of [21], but differs with respect to the counting procedure. As in the previous method, we start by sorting the elements. However, in the second step, we execute a kernel that is responsible for detecting where the element sequence changes. This kernel is executed by a number of work-items equal to that of the matrix elements. Each work-item will check the matrix positions corresponding to its global ID and its global ID + 1. If the values stored at these two positions are different, the density of elements of the sequence is equal to the work-item ID + 1. For instance, suppose that the position n of the matrix contains the value i and position $n + 1$ contains j. Thus, we can infer that there are $n + 1$ elements of type i. This situation is illustrated in Figure 2.

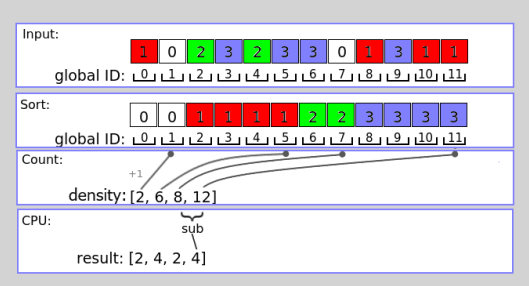


Fig. 2. Sort and count

The kernel used for counting is presented in the Listing 1. Its arguments are the sorted matrix and an auxiliary array containing $n + 1$ elements, being n the total number of species in the CA. The representation of species through integers simplifies counting because it allows to establish a relationship between the element type and array position.

The amount of space allocated for the auxiliary array depends on the number of different species present in the CA. Thus, the method allows for reduced memory consumption in the case where the number of different species is known in advance. For instance, suppose that in the example shown in Figure 2 there are only three different species. In this case, the auxiliary array must have only four elements, one for each type of species and one for the amount of empty spaces. The proposed method can be used also in situations where the number of species is not known in advance. In this case, however, the auxiliary array must have a number of elements that match that of the lattice.

Listing 1. Kernel count

```
__kernel void count(__global int *
    matrix, __global int *density){

    int gid = get_global_id(0);
    private int pivot = matrix[gid];
    private int next_pivot = matrix[
        gid+1];

    if(pivot != next_pivot ){
        density[pivot] = gid+1;
    }
}
```

With respect to the GPU-based sorting algorithm, there are several possibilities, and any of them could have been used. Depending on how the elements are distributed over the

lattice, some algorithms may perform better than others. In this work, we have used the Bitonic Sort algorithm, because it has shown better performance with respect to others in similar scenarios [29].

V. Results

We have implemented the CA with the features described in Section IV, for 3 different dimensions, 128^2, 256^2, and 512^2. One of the executions is illustrated in the Figure 3. The red, green and blue colors represent the 3 competing species in the experiment, while the white color represents the empty spaces. The first image shows the initial random distribution, while the second image shows the structure of the CA after execution for 10,000 cycles. It is possible to observe the formation of patterns and the coexistence between species, this is a result of the rules applied during the modeling of this CA.

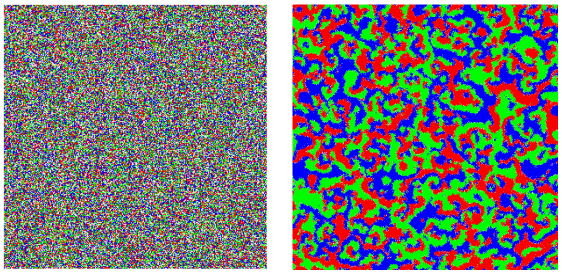


Fig. 3. Cellular Automata formation before and after 10,000 cycles

For each of the 3 sizes of the CA implemented, we did a comparison between 2 scenarios. In the first scenario, we used Pseudo-Random Number Generator (PRNG) on the host, with the *rand* function belonging to the stdlib.h library of the C language. In the second scenario, we used a massive PRNG in the device, with its own implementation. Both scenarios used the same computational resources described in Table I.

TABLE I
Hardware and software configuration

CPU	Intel® Xeon(R) CPU E5620 @ 2.40GHz × 4
GPU	NVidea Quadro 600, 96 cores, 1280MHz
OS	Ubuntu 14.04 x64

In the second scenario, the numbers were generated by the device and the communication bottleneck generated by the bus could be eliminated. Figure 4 is a chart illustrating the necessary time to compute all simulations for the 3 different sizes of CA. By observing the execution with 512^2 species, it can be seen a wide performance difference between the approaches. For example, the simulation of CA with 512^2 species consumed 256 seconds in the sequential version, while 156 seconds using GPU with traditional approach to count species (scenario 1), and only 5.8 seconds using our approach. This means our approach achieved a speed-up of 26 times in comparison with traditional GPU approach. This speedup was 15 and 23 for CA with 128^2 and 256^2 species, respectively.

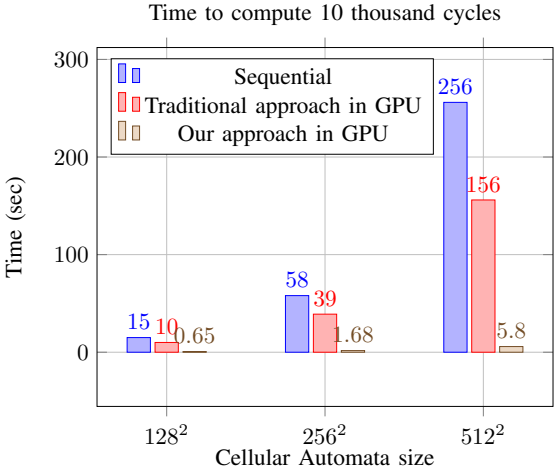


Fig. 4. Performance comparison to simulate 10 thousand cycles in automata with 3 different sizes.

The counter presented in Section IV was used to capture the evolution of species density every 10 cycles. The result can be seen in Figure 5. Where it is possible to observe a rotation of the dominion between the species. This result would not be achieved in practical time if an inefficient approach were used. Our approach enabled to count species during the simulation, without prejudice considerably the total time. Another important result is the observation an expected behavior present in nature.

Although the initial aleatory configuration and execution, the equilibrium tend to be achieved. Despite it is a competition scenario, the three species can coexist due to cyclical characteristics. The colors representing the species follow the same pattern as the Figure 3, with the exception of the empty spaces, which are now represented by black color. This behavior validates our simulations and opens the opportunity to experiment and validate other theories. In [15] we propose a method to characterize chaotic systems, and the simulation presented here was important to validate this method.

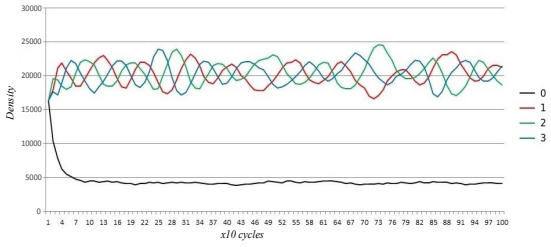


Fig. 5. Density of species during simulation

As shown in the solution of Sham [21], the counting

operation must run $n(\log n)^2$ operations in average. This quantity is the approximation of the number of comparisons made during sorting with Bitonic Sort. However, with the technique presented in this work, operations between counters can be neglected. Therefore, since we do not need to set these operations within the sort code, any sorting can be used, including proprietary solutions. In addition, less GPU memory is spent, since it is not necessary to store counters for each array position.

VI. Final considerations

In this work we propose an efficient Cellular Automata (CA) simulator accelerated by GPU through the usage of an parallel implementation in OpenCL. the presented solution is capable of efficiently calculate the evolution in the number of individuals of each species. Our approach opens the opportunity to amplify the research about species competition, evolution, adaptation, etc.

The evaluation of the number of individuals at each 10 simulation steps is an expensive task, which was mitigated in this work. Our approach demonstrated to be an efficient CA simulator which is capable of efficiently evaluate the evolution in the number of individuals of each species. Even executing the simulation in regular GPU (96 cores) the time to execute 10 thousand cycles of a Cellular Automaton with 512^2, also counting species at each 10 cycles was considerably short, only 5.8 seconds. This means a speed-up of 26 times when comparing with traditional approach to count elements running in the same GPU. This enables the simulation of even larger CA if GPU with larger memory is used.

References

[1] J. Von Neumann, A. W. Burks *et al.*, "Theory of self-reproducing automata," *IEEE Transactions on Neural Networks*, vol. 5, no. 1, pp. 3–14, 1966.

[2] B. Kerr, M. A. Riley, M. W. Feldman, and B. J. Bohannan, "Local dispersal promotes biodiversity in a real-life game of rock–paper–scissors," *Nature*, vol. 418, no. 6894, pp. 171–174, 2002.

[3] H. Majeed, O. Gillor, B. Kerr, and M. A. Riley, "Competitive interactions in escherichia coli populations: the role of bacteriocins," *The ISME journal*, vol. 5, no. 1, pp. 71–81, 2011.

[4] J. Santos and Á. Monteagudo, "Study of cancer hallmarks relevance using a cellular automaton tumor growth model," in *International Conference on Parallel Problem Solving from Nature*. Springer, 2012, pp. 489–499.

[5] S. W. McCue, D. G. Mallet *et al.*, "A cellular automata model to investigate immune cell–tumor cell interactions in growing tumors in two spatial dimensions," in *Mathematical Models of Tumor-Immune System Dynamics*. Springer, 2014, pp. 223–251.

[6] A. K. Cooper and P. S. Kim, "A cellular automata and a partial differential equation model of tumor–immune dynamics and chemotaxis," in *Mathematical Models of Tumor-Immune System Dynamics*. Springer, 2014, pp. 21–46.

[7] S. J. McCoy, S. Allesina, and C. A. Pfister, "Ocean acidification affects competition for space: projections of community structure using cellular automata," in *Proc. R. Soc. B*, vol. 283, no. 1826. The Royal Society, 2016, p. 20152561.

[8] D. Griffeath, "Self-organizing two-dimensional cellular automata: 10 still frames," in *Designing Beauty: The Art of Cellular Automata*. Springer, 2016, pp. 1–12.

[9] C. Mizas, G. C. Sirakoulis, V. Mardiris, I. Karafyllidis, N. Glykos, and R. Sandaltzopoulos, "Dna cellular automata," in *Designing Beauty: The Art of Cellular Automata*. Springer, 2016, pp. 127–128.

[10] Y. Mo, B. Ren, W. Yang, and J. Shuai, "The 3-dimensional cellular automata for hiv infection," *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, vol. 399, pp. 31–39, 2014.

[11] A. T. Crooks and A. B. Hailegiorgis, "An agent-based modeling approach applied to the spread of cholera," *Environmental Modelling & Software*, vol. 62, pp. 164–177, 2014.

[12] M. Khabouze, K. Hattaf, and N. Yousfi, "Three-dimensional cellular automaton for modeling the hepatitis b virus infection," *International Journal for Computational Biology (IJCB)*, vol. 4, no. 1, pp. 13–20, 2015.

[13] L. Chaves and L. Monteiro, "Oscillations in an epidemiological model based on asynchronous probabilistic cellular automaton," *Ecological Complexity*, vol. 31, pp. 57–63, 2017.

[14] X. Han, B. Chen, and C. Hui, "Symmetry breaking in cyclic competition by niche construction," *Applied Mathematics and Computation*, vol. 284, pp. 66–78, 2016.

[15] D. Bazeia, M. Pereira, A. Brito, B. De Oliveira, and J. Ramos, "A novel procedure for the identification of chaos in complex biological systems," *Scientific Reports*, vol. 7, 2017.

[16] J. K. Salmon, M. A. Moraes, R. O. Dror, and D. E. Shaw, "Parallel random numbers: as easy as 1, 2, 3," in *International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC)*. IEEE, 2011, pp. 1–12.

[17] V. Podlozhnyuk, "Parallel mersenne twister," *NVIDIA white paper*, 2007.

[18] L. Y. Barash and L. N. Shchur, "Prand: Gpu accelerated parallel random number generation library: Using most reliable algorithms and applying parallelism of modern gpus and cpus," *Computer Physics Communications*, vol. 185, no. 4, pp. 1343–1353, 2014.

[19] P.-L. Cayrel, M. Meziani, O. Ndiaye, R. Lindner, and R. Silva, "A pseudorandom number generator based on worst-case lattice problems," *Applicable Algebra in Engineering, Communication and Computing*, pp. 1–12, 2017.

[20] T. Nagatani, K. Sato, G. Ichinose, and K.-i. Tainaka, "Space promotes the coexistence of species: Effective medium approximation for rock-paper-scissors system," *Ecological Modelling*, vol. 359, pp. 240–245, 2017.

[21] R. Shams, P. Sadeghi, R. Kennedy, and R. Hartley, "Parallel computation of mutual information on the gpu with application to real-time registration of 3d medical images," *Computer methods and programs in biomedicine*, vol. 99, no. 2, pp. 133–146, 2010.

[22] R. Shams and N. Barnes, "Speeding up mutual information computation using nvidia cuda hardware," in *9th Biennial Conference of the Australian Pattern Recognition Society on Digital Image Computing Techniques and Applications (DICTA 2007)*, Dec 2007, pp. 555–560.

[23] T. Scheuermann and J. Hensley, "Efficient histogram generation using scattering on gpus," in *Proceedings of the 2007 symposium on Interactive 3D graphics and games*. ACM, 2007, pp. 33–37.

[24] Khronos OpenCL Working Group, *The OpenCL Specification, version 1.2 revision 19*, 2012.

[25] NVidia, *CUDA C Programming Guide PG-02829-001_v8.0*, 2017.

[26] AMD, *OpenCL User Guide rev1.0*, 2015.

[27] P. Avelino, D. Bazeia, L. Losano, and J. Menezes, "von neummann's and related scaling laws in rock-paper-scissors-type games," *Physical Review E*, vol. 86, no. 3, p. 031119, 2012.

[28] P. Topa, "Cellular automata model tuned for efficient computation on gpu with global memory cache," in *Parallel, Distributed and Network-Based Processing (PDP), 2014 22nd Euromicro International Conference on*. IEEE, 2014, pp. 380–383.

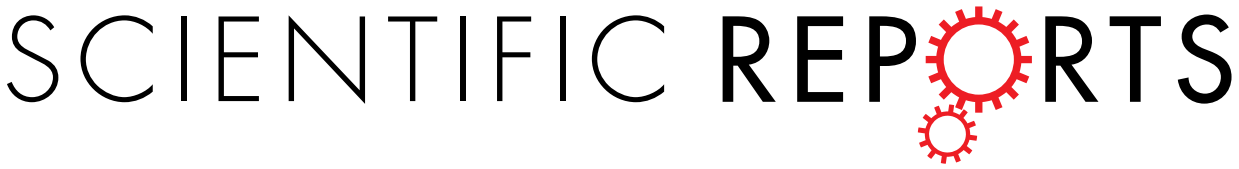
[29] F. G. Khan, O. U. Khan, B. Montrucchio, and P. Giaccone, "Analysis of fast parallel sorting algorithms for gpu architectures'," in *Frontiers of Information Technology (FIT), 2011*. IEEE, 2011, pp. 173–178.

Apendice B

APENDICE B

A seguir encontra-se um *paper* publicado na *Scientific Reports, Nature Publishing Group*.

Bazeia, D., Pereira, M. B. P. N., Brito, A. V., De Oliveira, B., & Ramos, J. G. G. S. (2017). A novel procedure for the identification of chaos in complex biological systems. Scientific Reports, 7.



OPEN

A novel procedure for the identification of chaos in complex biological systems

Received: 16 November 2016
Accepted: 14 February 2017
Published: 21 March 2017

D. Bazeia[1], M. B. P. N. Pereira[2], A. V. Brito[2], B.F. de Oliveira[3] & J. G. G. S. Ramos[1]

We demonstrate the presence of chaos in stochastic simulations that are widely used to study biodiversity in nature. The investigation deals with a set of three distinct species that evolve according to the standard rules of mobility, reproduction and predation, with predation following the cyclic rules of the popular rock, paper and scissors game. The study uncovers the possibility to distinguish between time evolutions that start from slightly different initial states, guided by the Hamming distance which heuristically unveils the chaotic behavior. The finding opens up a quantitative approach that relates the correlation length to the average density of maxima of a typical species, and an ensemble of stochastic simulations is implemented to support the procedure. The main result of the work shows how a single and simple experimental realization that counts the density of maxima associated with the chaotic evolution of the species serves to infer its correlation length. We use the result to investigate others distinct complex systems, one dealing with a set of differential equations that can be used to model a diversity of natural and artificial chaotic systems, and another one, focusing on the ocean water level.

In his book on the origin of species, Darwin settled the foundation of evolutionary biology, foreseen the interplay between non-linearity and stochastic processes. Due to the unpredictability of the systems that evolve driven by natural selection rules, over the years several approaches to investigate the problem have been developed. The general procedure relies on eliminating irrelevant information to deal with the appropriate issue, as one sees, for instance, in the Brownian motion, the Langevin and the Fokker-Planck equations, and the Onsager, Uhlenbeck, and Chandrasekhar theories.

Nowadays, despite the many ways to study complex systems, stochastic simulations have became a universal tool, and have been largely used to investigate collective behavior in nature. Based on a set of simple rules that are assessed randomly, the procedure has been employed in a diversity of scenarios to model and understand the experimental data. For a small set of investigations concerned mainly with biodiversity, see, e.g., the works[1–12] and references therein.

Without loss of generality, in this work we consider stochastic network simulations of the May and Leonard type[5,7], following two recent investigations, one describing how local dispersal may promote biodiversity in a real-life game[8] and the other suggesting that population mobility may be central feature to describe real ecosystems[10]. These studies develop simulations that engender cyclic competition, which is modeled as in the rock-paper-scissors game, controlled by the simple rules: paper wraps rock, rock crushes scissors and scissors cut paper[6]. We consider the standard system with three distinct species a, b, and c, identified with the colors red, blue, and yellow, respectively, and one notes an interesting behavior of the stochastic simulations which is the pattern formation, indicating a subjacent law. Thus, the separation between the random and the dynamical and kinematical mechanisms that may perhaps contribute to the temporal evolution is of fundamental importance to its understanding.

The study focuses mainly on the presence of chaos, and we go on motivated by the fact that the mechanisms that control the evolution of the system are capable of imprinting the spatial patterns, with the pattern formation being sensible to subtle changes in the initial conditions, driven by the number of individuals in each species. The subject has been investigated before in many different contexts, with very interesting works being carried out on the chaotic behavior in biological systems and in other stochastic situations. Here we recall the works[13–31] that are

[1]Departamento de Física, Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa, Paraíba, 58051-970, Brazil. [2]Centro de Informática, Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa, Paraíba, 58055-000, Brazil. [3]Departamento de Física, Universidade Estadual de Maringá, Maringá, Paraná, 87020-900, Brazil. Correspondence and requests for materials should be addressed to D.B. (email: dbazeia@gmail.com)

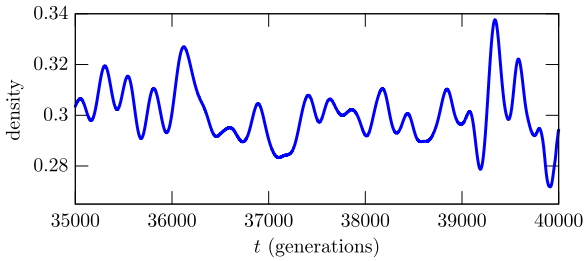


Figure 1. The blue Bézier curve shows the evolution of the abundance of a typical species in the interval in between 35000 and 40000 generations. The curve is built from the data corresponding to the blue species that appears in Fig. 4, as described in Sec. Methods.

closely related to the current investigation. In particular, in refs 13–21 the authors put a great deal of effort into the identification of chaos, but in the current work we suggest a new route, which is based on the Hamming distance concept[32], and on the counting of the density of maxima[33] of the abundance of the species, which we explain below. Other issues that are considered in refs 22–31 deal with generalizations of the standard three-species system to consider systems with four or more species, with the addition of other rules that may jeopardize biodiversity. Specific possibilities are studied in ref. 24 with the addition of diffusion, which may block the spiral pattern formation due to mobility, and also in ref. 26, when one adds players that never change their strategy, regardless of the neighborhood. Moreover, in the recent work[28] the authors investigate how to preserve biodiversity despite the presence of a spatially heterogeneous environment.

There are other studies on the cyclic dominance in evolutionary games, as one can find, for instance, in the recent review[27]. Some works investigate mechanisms that can be used to describe distinct kind of invasion rates between competing species, to act to jeopardize biodiversity. Specific examples can be found in the recent investigations[29–31], which can be of direct interest to the current study, as we further comment in the Sec. Results.

We study the system with three distinct species and standard rules of evolution. The main motivation to deal within this well-known environment is to unveil the chaotic behavior incontestably. We move on encouraged by decades of studies in the physics of compound nuclei and nuclear resonances, and more recently by theories developed to investigate mesoscopic systems[33], in order to offer a positive answer to this issue. Specifically, we identify the presence of chaos in the stochastic evolution and use it to quantify correlation measurements through a single and simple experimental realization of the system. As we show below, instead of following the standard way to describe the chaotic behavior, we pave a new route, with the result relating the correlation length to the average density of maxima of the abundance or density of individuals of a typical species in the system. It is the main result of the work, and is due to the chaotic properties of the stochastic evolution, which we identify and measure in the current study. We also show that it is a general result and can be used in a diversity of situations, to infer the correlation length of systems that evolve in time chaotically. We first identify the finding, and then illustrate it with two distinct applications, one dealing with a set of first-order differential equations, and the other with the ocean water level.

Results

We use stochastic simulations and follow standard procedure to investigate a system with three distinct species[8,10]. The approach is implemented in Sec. Methods, and there one includes detailed investigation that allows to develop all the results that we describe in the current Section. In particular, one describes the abundance or density of individuals of all the three species. A typical result appears in Fig. 1, where one uses the Bézier algorithm to display in blue the abundance of a given species. It shows a pattern that evolves in time oscillating around an average value, developing an apparently unpredictable number of maxima. As it is known, however, the cyclic behavior shown in the figure is in general required to generate stable evolution in a system described by a set of species that fight among themselves under specific rules. In a relatively short time scale, some species may tend to be suppressed, while others increase their abundance, but the dominance of a typical species over another one changes with the time, decreasing and inverting behavior, inducing an average value in a long time evolution. This cyclic equilibrium behavior is the central issue of the current work, and is used to identify the chaotic behavior even in a single and short time evolution of the system, as it is assured by the maximum entropy principle and the ergodic theorem.

The pattern displayed in Fig. 1 presents a number of maxima that can be related to the correlation length, due to the intrinsic chaotic behavior of the density of individuals. The study allows us to express the main result of the current work in the form

$$\tau = \frac{1}{6\langle\rho\rangle}. \tag{1}$$

It relates the correlation length τ to the average density of maxima $\langle\rho\rangle$ of the abundance of a typical species which is illustrated in Fig. 1. The counting of maxima is related to the tendency of the system to return to equilibrium, so the higher the density of maxima, the faster the tendency to approach equilibrium, although the system never relax to the state with the abundance fixed at the corresponding average value. The quantification that appears in

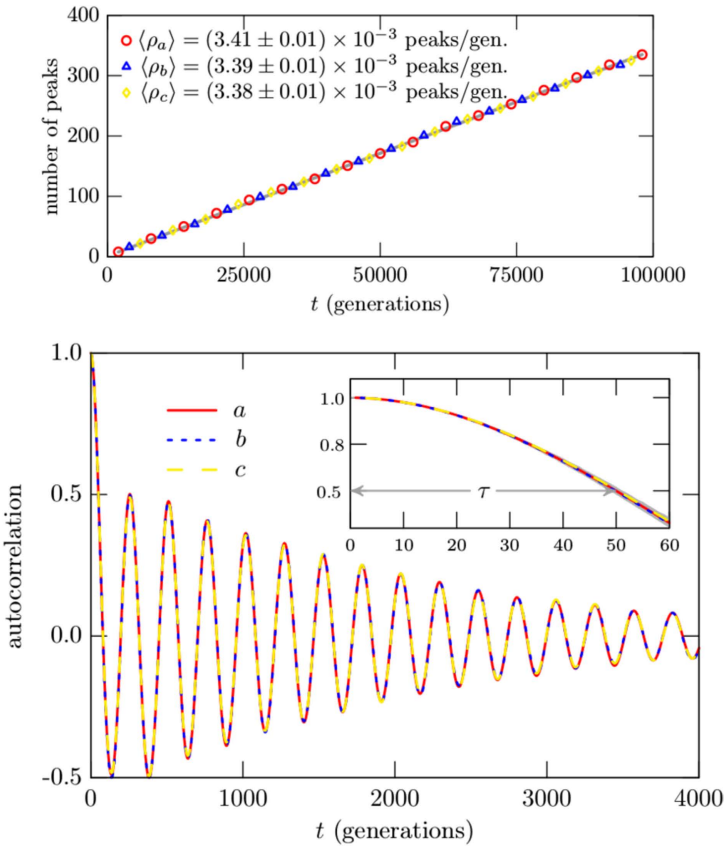


Figure 2. (Top) The counting of the number of peaks for the three species with the corresponding colors blue, red and yellow, with an almost invisible gray line depicting the fitting curve. (Bottom) The correlation function is displayed for the three species in a long time evolution, showing the general behavior. In the inset, it is depicted for a short time evolution, enough to show the correlation length. The shadow region in the inset displays the standard deviation. See Sec. Methods for details.

Eq. (1) is due to the chaotic pattern of the stochastic evolution, which we identify and measure using standard techniques. Before working this out, however, in this Fig. 1 one counts the number of maxima in the interval in between 35000 and 40000 generations to get the average density $\langle\rho\rangle \approx 0.0034$, compatible with the values indicated in Fig. 2 (Top). We then use (1) to get $\tau \approx 49$, consistent with the value suggested in the inset in Fig. 2 (Bottom). The results displayed in Fig. 2 are obtained from an ensemble of stochastic simulations which we explain in Sec. Methods.

The above expression (1) is of very practical use, because it allows us to infer the correlation length with a single and simple assessment to the time evolution of the chaotic variable under consideration, being it of natural or artificial origin, so it is of wide applicability. It follows from the identification that the stochastic simulation which is generically used in biodiversity engenders chaotic behavior. To focus on this, in Sec. Methods one describes the numerical procedure to be employed in this work. We then use it to assess the random processes engendered by the dynamical evolution. However, due to the impossibility to directly control the randomness of the simulations, the strategy elaborated follows a procedure which generates two distinct final states starting from initial states that are slightly different from each other.

Owing to quantify the chaotic behavior, we employ the Hamming distance[32] to measure the difference between the two final states, which is a simple and appropriate manner to distinguish quantities such as vectors, matrices, etc, and can be illustrated with binary vectors. Since it counts the number of sites in the second vector that do not match with the corresponding sites of first one, the distance between (0,0,0,1) and (1,0,1,1) is two, for instance. We use the Hamming distance $H(t)$ to measure the difference between the two final states, which are now seen as two distinct $N \times N$ matrices. In Fig. 3 one displays the Hamming distance density $h(t) = H(t)/N^2$ with the solid green curve that represents an average obtained from a set of 100 simulations, each one starting with a distinct initial state. We recall that it is actually nontrivial to distinguish chaos from randomness, but here one has to emphasize that the new algorithm that we have implemented to account for the Hamming distance, which is described in Sec. Methods, provides the possibility to access the chaotic behavior that underlies the stochastic simulations very clearly.

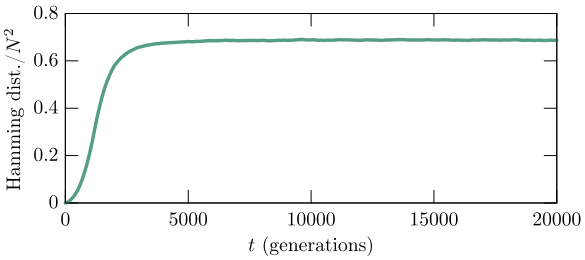


Figure 3. The Hamming distance density is shown in green in a long time interval. It represents an average obtained from a set of 100 simulations, each one starting with a distinct initial state.

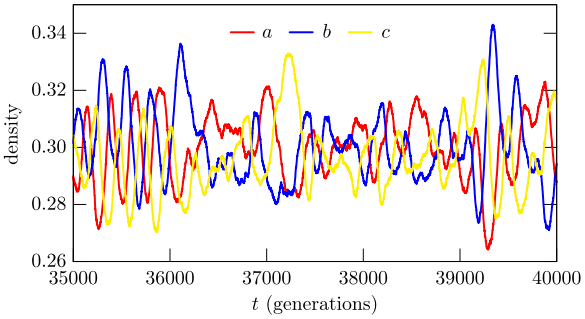


Figure 4. Evolution of the abundance of the three species, depicted with the corresponding colors, in the long interval in between 35000 and 40000 generations. The data corresponding to the blue species is used to depict the Bézier curve in Fig. 1.

The behavior that appears in Fig. 3 is a key result of the work. It shows that the Hamming distance density increases smoothly and then converges to a given value inside an interval with very narrow width. It is asymptotically stable and does not fill the full lattice. For an animated illustration on this, see the video at https://youtu.be/nzLP-XcCvWc. We have implemented other simulations, changing the values of the parameters (m,r,p), the size of the lattice and the number of species in the system, and observed the same qualitative behavior, showing its universality.

As we have further noted, if one modifies the rules that control the time evolution, the profile of the Hamming distance density displayed in Fig. 3 may change drastically. For instance, if the modification of the rules does not jeopardize biodiversity, the Hamming distance density gets the universal behavior shown in Fig. 3. However, if one follows the investigations considered in refs 29–31, for instance, and modifies the rules in order to destroy biodiversity, the Hamming distance density starts increasing, oscillating in the interval [0,1], but it ends up vanishing in the long run, if the two initial states evolve to become the same final state, or become unit, if the two final states are completely different from each other. The result shows that the asymptotic stability of the Hamming distance density is intrinsically connected with biodiversity. We are now investigating how the amplitude and width of the Hamming distance density behave for three, four and five species, as one increases the mobility to higher and higher values, reaching the region that jeopardizes biodiversity, as firstly shown in ref. 10 and further explored in the more recent works[34,35]. We hope to offer a detailed investigation on this issue in the near future, emphasizing that the Hamming distance behavior is directly related with the evolution of the abundance of a typical species that is displayed in Fig. 1, which was built from the data corresponding to the blue species that appears in Fig. 4. The results depicted in Fig. 4 are further described in Sec. Methods, and show that the abundance of each one of the three species fluctuates around the same average value, as shown in red, blue and yellow.

Knowing that the stochastic processes engender chaotic behavior, it is of interest to further explore the above result. Here one should ask for the behavior of the system under perturbations, the presence of attractors, the Lyapunov spectrum etc. Instead of this standard route, however, we move forward inspired by the previous study[33] and focus attention on counting the density of maxima of the time evolution of the abundance of the species. In this sense, one takes l_i to describe the abundance of one of the three species $i = a$ (red), b (blue), or c (yellow), and considers the investigation developed at the end of the Sec. Methods to calculate the average density of maxima $\langle \rho_i \rangle$. The main results are shown in Eqs (5–8), and can be used to write $\langle \rho_i \rangle$ in the form

$$\langle \rho_i \rangle = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\langle l_i''^2 \rangle}{\langle l_i'^2 \rangle}}. \tag{2}$$

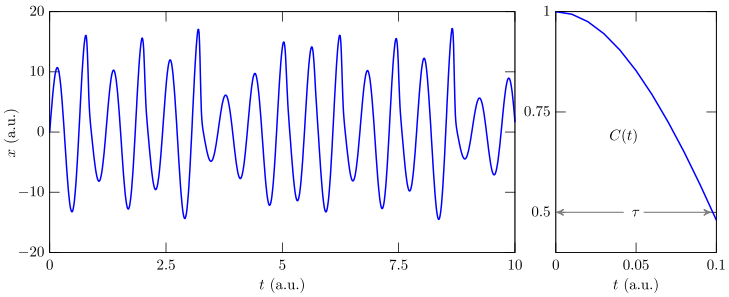


Figure 5. The blue curve in the left panel describes the $x(t)$ evolution that follows from the set of equations (4). The right panel displays the corresponding correlation function.

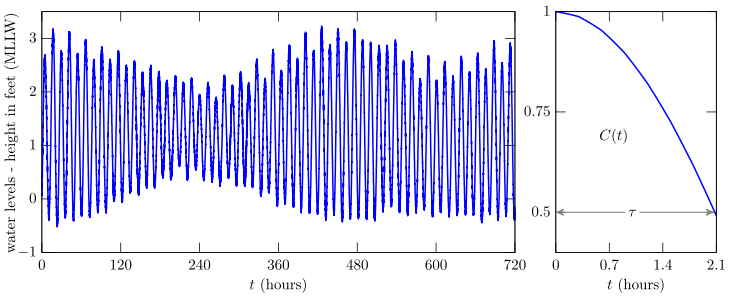


Figure 6. The ocean water level for the station ID 1770000, Pago Pago, American Samoa, is shown in the left panel for the period from 01/Aug/2016 - 00h00 GMT to 30/Aug/2016 - 23h59 GMT. The right panel displays the corresponding correlation function.

This is another key result of the work, and offers a new quantity that arises from the chaotic behavior imprinted in the stochastic simulations. To verify its validity, we implemented a procedure to create an ensemble of events to obtain the correlation function, which is used to calculate the correlation length. As it is known, the correlation length τ is extracted from the correlation function as the width at half height, so we use the fitting function $C(t) = \cos(\kappa t)$ to write $\kappa\tau = \pi/3$, and from Eqs (2) and (7) one gets to

$$\langle \rho \rangle = \frac{\kappa}{2\pi}. \tag{3}$$

This allows to relate the density of maxima to the correlation length in the form $\tau = 1/(6\langle \rho \rangle)$, as we have anticipated in Eq. (1).

The result offers a way to measure the correlation length from a single experimental assessment to the system under investigation, calculating the average density of maxima, as it is illustrated in Fig. 1. We note that the finding nicely connects the top and bottom panels in Fig. 2, since the correlation length which one reads from the inset in the bottom panel in Fig. 2 can be obtained from the value of the density of maxima which one reads from the top panel in Fig. 2, via Eq. (1).

Applications. The investigation described above shows that the result in Eq. (1) is valid in a broader context, and can be used to investigate other systems that develop chaotic behavior. To illustrate this issue, in Fig. 5 one displays how x evolves in time for the deterministic system of first-order differential equations

$$\frac{dx}{dt} = -y - z, \quad \frac{dy}{dt} = x + 0.15y; \quad \frac{dz}{dt} = 0.2 - 10z + xz. \tag{4}$$

They are the Rössler equations[36], and can be used to model a diversity of natural and artificial chaotic systems. We see from the left panel in Fig. 5, where the behavior of x is shown, that the number of maxima is 17, so the correlation length gives $\tau = 0.097$. This is an excellent result, since using the fitting function for the correlation function displayed in the right panel in Fig. 5, one gets to $\tau = 0.098$.

We move on to examine another system of distinct nature that also evolves chaotically. We focus attention on the ocean water level, with data available from the National Oceanic and Atmospheric Administration. This brings about another illustration, which appears in Fig. 6, displaying in blue the observed water level for the station ID 1770000, Pago Pago, American Samoa. See http://tidesandcurrents.noaa.gov/waterlevels.html?id=1770000. In the right panel in Fig. 6 one shows the correlation function, visually indicating that the correlation

length is around 2 hours. In fact, if one uses the fitting curve it gives $\tau = 2.0748$, and if one counts the maxima that appear in the left panel in Fig. 6 and then uses the result in Eq. (1), one gets to the value $\tau = 2.0689$.

Discussion

In this work we studied the presence of chaos in a system with three distinct species, that evolve under the standard rules of mobility, predation and reproduction. We first used the Hamming distance density to heuristically characterize the chaotic behavior embedded in the stochastic evolution of the system. The typical result is shown in Fig. 3, and is obtained from the algorithm developed in Sec. Methods, which effectively separates the chaotic behavior from the randomness of the stochastic simulations. The qualitative behavior displayed in Fig. 3 suggests that we investigate how the amplitude and width of the Hamming distance density behave for three, four and five species, as one increases the mobility to higher and higher values, reaching the region that jeopardizes biodiversity. Being a quantity that unveil the chaotic behavior, the Hamming distance density may be used as an order parameter to investigate chaos in complex systems. We will report on this issue in the near future.

The finding motivated us to developed a stronger result, unveiling a quantitative approach to the correlation length from a single and simple experimental measurement of the average density of maxima that appear in the abundance of a typical species during the dynamical evolution of the system. The connection between the density of maxima and the correlation length was formulated under the principle of maxima entropy, using an ensemble of events that we developed numerically in Sec. Methods. Since the stochastic simulations here considered are universally used to describe biodiversity in nature, we are then left with the suggestion that chaos is imprinted in biodiversity.

The study unveiled a simple route to obtain the correlation length associated to a given chaotic time evolution, and the simplicity of the procedure makes the result especially relevant to investigate complex chaotic systems. Examples of applications of this result abound, and here we have illustrated its applicability with the deterministic system described by the set of first-order differential equations (4), which are known as the Rössler equations[36] and engender the behavior displayed in Fig. 5. Also, we have considered another well distinct complex system, dealing with the ocean water level data that is displayed in Fig. 6.

The main result of this work indicates that a single and simple experimental investigation of the time evolution of a given chaotic quantity allows estimating the correlation length of the corresponding quantity with a very high confidence level. As we have illustrated with some explicit examples, it can be widely used to study complex processes, as the ones that appear in Geology, Meteorology, Evolutionary Biology, and in many other areas of nonlinear science. We hope that the current study may help us to better understand biodiversity and its associated chaotic behavior, inspiring further research on similar issues. In particular, the simplicity of the result suggests that the ergodic hypothesis and the maximization of the entropy are valid for complex biological systems and may serve for other studies on the thermodynamics and statistical properties of such systems.

Methods

In this work we developed stochastic simulations considering a standard system which is widely used to investigate biodiversity in nature. We review the procedure recalling that the simulations are implemented considering the system with three distinct species a, b, and c, identified with the colors red, blue, and yellow, respectively. They evolve according to the three basic rules: mobility (m), reproduction (r), and predation (p). The evolution is carried out standardly, taking a square lattice of size $N \times N$, in which the three species and the empty sites (which is identified by e, with the color white) are equally but randomly distributed in the lattice, such that the quantity of individuals of each species (including the empty sites) is $L = N^2/4$, at the initial state. We deal with local dispersion and appropriate mobility. A given site is considered active if occupied by an individual of one of the three active species, and it may interact with one of its eight nearest neighbors, the Moore neighborhood.

As usual, the numerical simulations are performed with periodic boundary conditions. If i stands for a,b or c, and α for a,b,c, or e, mobility and reproduction are represented by $i\alpha \to \alpha i$ and $ie \to ii$, respectively. The other rule, predation, follow the rock-paper-scissors game, that is, $ab \to ae$, $bc \to be$, and $ca \to ce$. In this work we take $m = 0.5$, $r = 0.25$, and $p = 0.25$, for mobility, reproduction and predation, respectively, for all the three species. We have considered other possibilities, with $m = 0.25$, $r = 0.25$ and $p = 0.5$, for instance, and no qualitative modification in the results was found. The dynamical process starts with a random assess to the square lattice, followed by a random selection of one of the three rules and by a random choice of one of the eight neighbors. It is then checked if the assessed site is empty or not: if it is empty, one returns to the lattice to simulate another assess to it; if it contains an individual of one of the three species, one takes the selected rule and uses it with the selected neighbor. To measure the time evolution we use generation, which is the time spent to access the lattice N^2 times.

To prepare the initial state, one randomly chooses one among the three species a, b and c, and the empty site e with the same probability, and distributes it in the square lattice. The procedure is repeated N^2 times, evenly filling all the sites in the square lattice. A typical initial state is illustrated in the left panel in Fig. 7. One uses it to run the stochastic simulations and get to the final configuration which is displayed in the right panel of Fig. 7. There one sees that the system evolves forming a specific pattern, in which the species organize themselves in spatial portions of the lattice. This is known in the literature, and has been explored in a diversity of contexts, to study diversity and other related behaviors.

In order to unveil the chaotic behavior, we use the stochastic simulations to generate a new algorithm. The procedure goes as follows: one first builds a initial state as done in the left panel in Fig. 7, and makes a copy of it. One uses this initial state to run the simulation to get to the final state, which is then saved. The key point here is that during the time evolution a new file is created, in which one saves every single step used to run it. One then takes the copy of the initial state and randomly selects a lattice site and modifies its content. This new state has the tiniest difference, since among the many lattice sites it has a single site which is different from the initial state already used to evolve in time. With this new initial state, one runs the same simulation already considered,

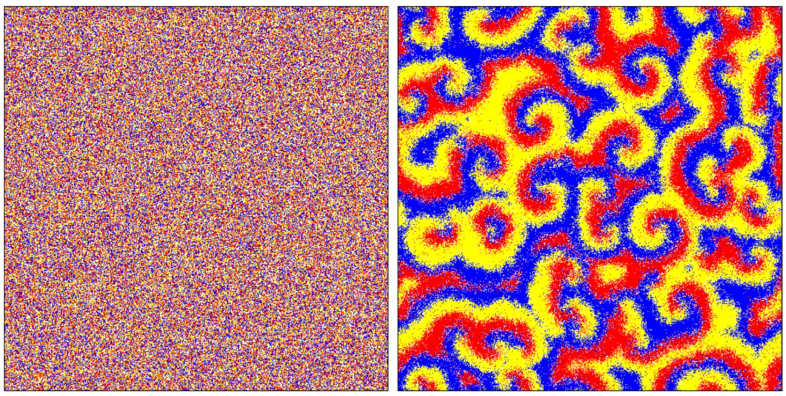


Figure 7. The 500 × 500 square lattice is shown at the initial time (left), and after 2000 generations (right), illustrating the formation of spatial patterns.

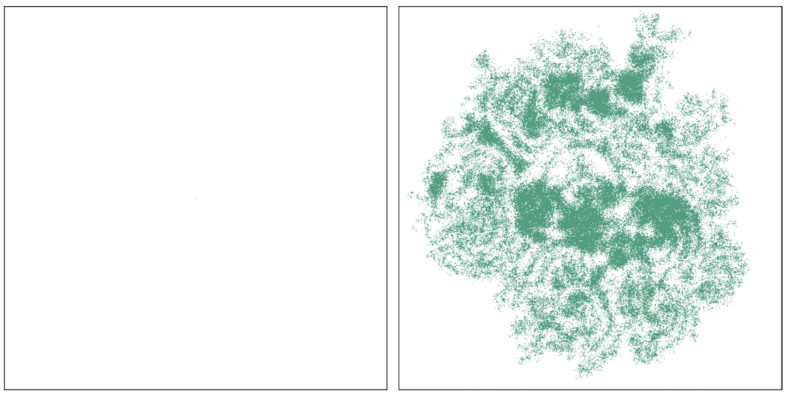


Figure 8. An illustration of the Hamming distance at the initial time (left), showing an almost invisible green dot at the center of the lattice, and after 1000 generations (right), indicating how the two states separate from each other.

evolving it according to the very same rules, in the same order and pace, as they appear in the saved file. The procedure leads to another final state, which is also saved.

The two final states are different, but the difference has nothing to do with the randomness of the stochastic simulations, being due to the tiniest modification introduced in the second initial state. To infer the presence of chaos, one has to measure the difference between the two final states, generated with the same stochastic rules. Toward this goal, we have developed an algorithm which displays in light green the lattice sites that differ in the two configurations, leaving the other sites empty. In Fig. 8 two snapshots are displayed, one at the initial time in the left panel, with a single almost invisible light green site (which is depicted at the grid center) marking the tiniest difference between the two initial states. The other snapshot is in the right panel, and it shows all the light green sites that mark the difference between the two final states, after implementing the simulations for a long time. The two snapshots show the impact that the subtle modification introduced in the initial state causes in the evolution of the system. The result suggests that the time evolution that appears in the stochastic simulation engenders chaotic behavior. The procedure allowed to introduce the Hamming distance density which we discussed in Sec. Results and displayed in Fig. 3.

To further explore the stochastic network simulations, one investigates how the quantities of individuals $L_i(i = a,b,c)$ vary as the system evolves in time. In fact, one uses the densities $l_i = L_i/N^2$ and the results are depicted in Fig. 4, showing that the abundance of each one of the three species fluctuates around the same average value, as shown in red, blue and yellow. They do not add to unit because of the number of empty sites, that fluctuates around a lower value. This happens because the species move, reproduce and predate evenly, while the empty sites enter the game passively. We have run other simulations, starting from an initial state with no empty site, and ended up with final states with the species having abundance similar to the ones displayed in Fig. 4. This shows that the addition or not of empty sites in the initial state does not modify the abundance behavior for long time evolutions. The abundance behavior that appear in Fig. 4 show a substructure which is not present in the

curve depicted in Fig. 1, due to the Bézier algorithmic tool used to smooth its behavior. This is a legitimate procedure, since the substructure that appears in the abundance is due to the intrinsic discreteness of the stochastic approach, having nothing to do with the chaotic behavior present in the process under investigation. The Bézier algorithm that we implement in this work uses as the control points the set of points available from the data, in the time interval used to count the number of maxima.

As can be seen from Fig. 4, the abundance l_i evolves in time and fluctuates to produce local maximum in the interval $[t, t+\delta t]$, for sufficiently small δt, so one has $l_i'(t) > 0$, and $l_i'(t+\delta t) < 0$, where prime stands for the time derivative, such that $-l_i''(t)\delta t > l_i'(t) > 0$. The joint probability $P(l_i', l_i'')$ can be used to calculate the average density of maxima $\langle \rho_i \rangle$ through the simple route: the probability to find a maximum in the interval $[t, t+\delta t]$ is proportional to the integral spanning the region defined above, such that

$$\langle \rho_i \rangle \equiv \frac{1}{\delta t}\int_{-\infty}^{0} dl_i'' \int_{0}^{-l_i''\delta t} dl_i' P(l_i', l_i'') = \int_{-\infty}^{0} dl_i'' l_i'' P(0, l_i''). \tag{5}$$

The fact that the statistical properties of the mean number of individuals of a given species are invariant under time translations indicates that both l_i' and l_i'' have vanishing average values. Moreover, the properties of $P(l_i', l_i'')$ can be obtained from the smallest momenta of l_i' and l_i'', and the variances of $P(l_i', l_i'')$ are directly related to the correlation function

$$C_i(\delta t) = \langle l_i(t+\delta t) l_i(t) \rangle. \tag{6}$$

we can then obtain the several momenta, in particular

$$\langle l_i'^2 \rangle = -\left.\frac{d^2 C_i(\delta t)}{d(\delta t)^2}\right|_{\delta t=0}; \quad \langle l_i''^2 \rangle = \left.\frac{d^4 C_i(\delta t)}{d(\delta t)^4}\right|_{\delta t=0}. \tag{7}$$

The principle of maximum entropy can be used to construct the joint probability distribution for l_i and its derivatives from the previous equations. After implementing the algebraic calculations, integration on l_i leads to $P(l_i', l_i'')$ which gives

$$P(0, l_i'') = \frac{1}{2\pi}\frac{1}{\sqrt{\langle l_i'^2 \rangle \langle l_i''^2 \rangle}} \exp\left(-\frac{1}{2}\frac{l_i''^2}{\langle l_i''^2 \rangle}\right). \tag{8}$$

The above expressions can be used to write the density of maxima in terms of the correlation function, as we showed before in Sec. Results. One then implement a numerical investigation to obtain an ensemble of events, taking an initial state and running the simulation for a very long time. This is a single event, and it is repeated many times, to get to the ensemble of events, each event being built as the first one, running the simulation from a random initial state within the same time interval. The ensemble is then used to count the number of peaks in $l_i (i = a, b, c)$ in the simulation. They are depicted in the top panel in Fig. 2, for each one of the three species, and there the values of the average density of maxima are also shown.

The procedure is also used to get the correlation function, which is depicted in the bottom panel in Fig. 2 for all the three species in a long time evolution, showing the expected general behavior, with the periodicity reflecting the periodic boundary conditions in the lattice. In the inset we depict the correlation function for a time evolution enough to display the correlation length. One then uses the short time evolution shown in the inset of the bottom panel in Fig. 2 to search for the best fit curve, getting $C(t) = \cos(\kappa t)$ where $\kappa = 0.0212$, with error lower then 5%, obtained within the least square approach. We emphasize that the natural decaying process present in the correlation function is not of practical significance to calculate the correlation length, since it can be obtained from the short time evolution displayed in the inset in the bottom panel in Fig. 2.

References

1. David Tilman, P. K. (ed.) *Spatial Ecology: The Role of Space in Population Dynamics and Interspecific Interactions* (Princeton University Press, 1997).
2. Ulf Dieckmann, J. A. J. M. & Richard, Law (ed.) *The Geometry of Ecological Interactions: Simplifying Spatial Complexity (Cambridge Studies in Adaptive Dynamics)* (Cambridge University Press, 2005).
3. Nowak, M. A. *Evolutionary Dynamics: Exploring the Equations of Life* (Belknap Press, 2006).
4. Pinsky, M. A. & Karlin, S. *An Introduction to Stochastic Modeling* fourth edition edn (Academic Press, 2010).
5. May, R. M. & Leonard, W. J. Nonlinear aspects of competition between three species. *SIAM Journal on Applied Mathematics* **29,** 243–253 (1975).
6. Sinervo, B. & Lively, C. M. The rock-paper-scissors game and the evolution of alternative male strategies. *Nature* **380,** 240–243 (1996).
7. Durrett, R. & Levin, S. Spatial aspects of interspecific competition. *Theoretical Population Biology* **53,** 30–43 (1998).
8. Kerr, B., Riley, M. A., Feldman, M. W. & Bohannan, B. J. M. Local dispersal promotes biodiversity in a real-life game of rock-paper-scissors. *Nature* **418,** 171–174 (2002).
9. Kirkup, B. C. & Riley, M. A. Antibiotic-mediated antagonism leads to a bacterial game of rock-paper-scissors *in vivo*. *Nature* **428,** 412–414 (2004).
10. Reichenbach, T., Mobilia, M. & Frey, E. Mobility promotes and jeopardizes biodiversity in rock-paper-scissors games. *Nature* **448,** 1046–1049 (2007).
11. Szabó, G. & Fáth, G. Evolutionary games on graphs. *Physics Reports* **446,** 97–216 (2007).
12. Claussen, J. C. & Traulsen, A. Cyclic dominance and biodiversity in well-mixed populations. *Phys. Rev. Lett*. **100,** 058104 (2008).
13. Nowak, M. A. & May, R. M. Evolutionary games and spatial chaos. *Nature* **359,** 826–829 (1992).

14. Mitchell, M., Hraber, P. T. & Crutchfield, J. P. Revisiting the edge of chaos: Evolving cellular automata to perform computations. *Complex Systems* **7,** 89–130 (1993).
15. Mitchell, M., Crutchfield, J. P. & Hraber, P. T. Evolving cellular automata to perform computations: mechanisms and impediments. *Physica D: Nonlinear Phenomena* **75,** 361–391 (1994).
16. Yang, C. B., Cai, X. & Zhou, Z. M. Spatial-temporal correlations in the process to self-organized criticality. *Phys. Rev. E* **61,** 7243 (2000).
17. Sato, Y., Akiyama, E. & Farmer, J. D. Chaos in learning a simple two-person game. *Proceedings of the National Academy of Sciences* **99,** 4748–4751 (2002).
18. Károlyi, G., Neufeld, Z. & Scheuring, I. Rock-scissors-paper game in a chaotic flow: The effect of dispersion on the cyclic competition of microorganisms. *Journal of Theoretical Biology* **236,** 12–20 (2005).
19. Gosak, M., Marhl, M. & Perc, M. Chaos between stochasticity and periodicity in the prisoner's dilemma game. *International Journal of Bifurcation and Chaos* **18,** 869–875 (2008).
20. Gosak, M., Marhl, M. & Perc, M. Chaos out of internal noise in the collective dynamics of diffusively coupled cells. *The European Physical Journal B* **62,** 171–177 (2008).
21. Nicolis, S. C. *et al.* Foraging at the edge of chaos: Internal clock versus external forcing. *Phys. Rev. Lett.* **110,** 268104 (2013).
22. Szabó, G., Szolnoki, A. & Izsák, R. Rock-scissors-paper game on regular small-world networks. *Journal of Physics A: Mathematical and General* **37,** 2599–2609 (2004).
23. Szolnoki, A. & Szabó, G. Phase transitions for rock-scissors-paper game on different networks. *Phys. Rev. E* **70,** 037102 (2004).
24. Peltomäki, M. & Alava, M. Three- and four-state rock-paper-scissors games with diffusion. *Phys. Rev. E* **78,** 031906 (2008).
25. Avelino, P. P. *et al.* Junctions and spiral patterns in generalized rock-paper-scissors models. *Phys. Rev. E* **86,** 036112 (2012).
26. Szolnoki, A. & Perc, M. Zealots tame oscillations in the spatial rock-paper-scissors game. *Phys. Rev. E* **93,** 062307 (2016).
27. Szolnoki, A. *et al.* Cyclic dominance in evolutionary games: a review. *Journal of The Royal Society Interface* **11,** 20140735 (2014).
28. Szolnoki, A. & Perc, M. Biodiversity in models of cyclic dominance is preserved by heterogeneity in site-specific invasion rates. *Scientific Reports* **6,** 38608 (2016).
29. Juul, J., Sneppen, K. & Mathiesen, J. Labyrinthine clustering in a spatial rock-paper-scissors ecosystem. *Phys. Rev. E* **87,** 042702 (2013).
30. Vukov, J., Szolnoki, A. & Szabó, G. Diverging fluctuations in a spatial five-species cyclic dominance game. *Phys. Rev. E* **88,** 022123 (2013).
31. Szolnoki, A., Vukov, J. & Perc, M. From pairwise to group interactions in games of cyclic dominance. *Phys. Rev. E* **89,** 062125 (2014).
32. Hamming, R. W. Error detecting and error correcting codes. *Bell System Technical Journal* **29,** 147–160 (1950).
33. Ramos, J. G. G. S., Bazeia, D., Hussein, M. S. & Lewenkopf, C. H. Conductance peaks in open quantum dots. *Phys. Rev. Lett.* **107,** 176807 (2011).
34. Jiang, L.-L., Zhou, T., Perc, M. & Wang, B.-H. Effects of competition on pattern formation in the rock-paper-scissors game. *Phys. Rev. E* **84,** 021912 (2011).
35. Cheng, H. *et al.* Mesoscopic Interactions and Species Coexistence in Evolutionary Game Dynamics of Cyclic Competitions. *Scientific Reports* **4,** 7486 (2014).
36. Rössler, O. An equation for continuous chaos. *Physics Letters A* **57,** 397–398 (1976).

Acknowledgements

This work was partially financed by the CNPq Grants 455931/2014-3, 306614/2014-6, 308241/2013-4 and 479960/2013-5.

Author Contributions

M.B.P.N.P., A.V.B. and J.G.G.S.R. organized the numerical procedure. M.B.P.N.P., A.V.B. and B.F.O. implemented the stochastic simulations. D.B., B.F.O. and J.G.G.S.R. analysed the results and organized the figures. D.B. and J.G.G.S.R. wrote the manuscript. All authors reviewed and approved the work.

Additional Information

Competing Interests: The authors declare no competing financial interests.

How to cite this article: Bazeia, D. *et al.* A novel procedure for the identification of chaos in complex biological systems. *Sci. Rep.* **7**, 44900; doi: 10.1038/srep44900 (2017).

Publisher's note: Springer Nature remains neutral with regard to jurisdictional claims in published maps and institutional affiliations.