Ministério da
Ciência, Tecnologia
e Inovação

GOVERNO FEDERAL
BRASIL
PAÍS RICO É PAÍS SEM POBREZA

sid.inpe.br/mtc-mxx/aaaa/00.00.00.00-XXX

ESPECIFICAÇÃO E SIMULAÇÃO DE AUTÔMATOS CELULARES MARKOVIANOS – APLICAÇÕES À MODELAGEM DE EPIDEMIAS

Silas dos Santos Vergilio

Relatório final de Iniciação Científica, orientada pelo Dr. Solon Venâncio de Carvalho e pelo Msc. Leonardo Bacelar Lima Santos.

URL do documento original:
<http://urlib.net/xx/yy>

INPE
São José dos Campos
2012

Ficha será revisada pelo SID.

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação

Vergilio, Silas dos Santos. Especificação e Simulação de Autômatos Celulares Markovianos – aplicações à modelagem de epidemias - São José dos Campos: INPE, 2012.

Iniciação Científica. Graduando em Engenharia Elétrica, na Faculdade de Engenharia de Guaratinguetá (FEG) da Universidade do Estado de São Paulo (UNESP).

Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, São José dos Campos, 2012.

Orientador: Nome completo do orientador(es).

1. Autômatos Celulares. 2. Cadeias de Markov. 3. Autômatos Celulares Markovianos. 4. Epidemiologia matemática

CDU

RESUMO

Autômatos Celulares (AC) são sistemas dinâmicos discretos no tempo, espaço e estados, com aplicações em diversos campos da física, com destaque para física do estado sólido, física estatística, caos e complexidade. Neste trabalho, foi desenvolvida uma especificação textual para um AC genérico representada por: AC = AC{G, V , S , I , R , C ,A}; onde G é a geometria do sistema, V a estrutura de vizinhança, S o conjunto de estados, I a condição inicial, R o conjunto de regras, B as condições de contorno e A o critério de atualização. A dinâmica do AC foi executada tanto de acordo com seu conjunto de regras quanto com base na Matriz de Transição de Estados (MTE) associada ao sistema – inspirada na MTE típica de processos estocásticos markovianos [3]. Os códigos foram implementados em linguagem C. Foi desenvolvido um código para gerar automaticamente todos os AC’s do catálogo dos determinísticos unidimensionais clássicos de Wolfram [1], bem como construir a MTE associada a cada um. Analisou-se a MTE também do modelo compartimental SI, modelo clássico da epidemologia matemática [2]. Em ambos os casos o determinante da MTE foi nula, ambas não eram nem ortogonais nem unitárias, todos os autovalores foram reais, não negativos e restritos ao círculo unitário. No caso dos AC’s de Wolfram foram testadas propriedades das MTE's (Markov) potencialmente capazes de classificar os AC’s nas 4 classes básicas (dos AC’s).

ABSTRACT

Cellular Automata (AC) are dynamic systems discrete in time, space and states, with application in several branches of physics, essentially for the solid state physics, statistics physics, chaos e complexity. In this paper, it was developed a textual specification for a generic AC represented by: AC = AC{G, V , S , I , R , C ,A}; where G is the geometry of the system, V is the neighborhood structure, S is the set of states, I is the initial condition, R are the group of rules, B are contour conditions and A the update criteria. A dynamic of the AC was executed as the rules and also based on the States Transitions Matrix associated to the system – inspired in the typical matrix associated to markovian stochastic process [3]. The codes were implemented in the C programming language. It was developed a code to automatically generate the AC's from the catalog of Wolfram's classic deterministic one-dimensional AC's. [1], as well as building a MTE associated to each one. The MTE was also analyzed as a SI compartmental mode, classic model of the epidemiology mathematics [2]. In both cases the determinant of the MTE was null, both were not orthogonal nor unitary, each one of the auto values were real, non negative and restrict to the unitary circle. In the case of the Wolfram's AC were tested properties of the MTE's (Markov) potentially capable of de classifying AC's in one of the 4 basic classes.

LISTA DE FIGURAS

Pág.

LISTA DE TABELAS

Pág.

SUMÁRIO

Pág.

1 INTRODUÇÃO

Em 1940 quando John Von Neuman se baseou em estudos sobre o crescimento de cristais, se deu início o estudo sobre sistemas discretos no tempo e no espaço, que poderiam a partir de um número relativamente pequeno de informações para tentar prever eventos futuros, desde que esses possam ser descritos como regras de interação entre seus vizinhos em um sistema hipotético.

Autômatos Celulares (AC) são sistemas dinâmicos discretos no tempo, espaço e estados [1], com aplicações em diversos campos da física, com destaque para física do estado sólido, física estatística, caos e complexidade [2]. O uso de autômatos celulares é visto hoje com um potencial quase que infinito, sendo muito usado na análise da propagação de uma doença contagiosa, crescimento populacional, surgimento de rios e bacias, entre outros. O trabalho foca no potencial inerte dos autômatos celulares e suas características matemáticas.

Neste trabalho, foi desenvolvida:

1. Uma especificação textual para um AC genérico representada por: AC = AC{G, V , S , I , R , C ,A}; onde G é a geometria do sistema, V a estrutura de vizinhança, S o conjunto de estados, I a condição inicial, R o conjunto de regras, B as condições de contorno e A o critério de atualização;
2. Uma associação entre AC's e processos Markovianos, extraindo do primeiro sua Matriz de Transição de Estados (MTE). A dinâmica do AC foi executada tanto de acordo com seu conjunto de regras quanto com base na Matriz de Transição de Estados (MTE) associada ao sistema. Os códigos foram implementados em linguagem C.
3. Um código para geração automática de os AC's do catálogo dos determinísticos unidimensionais clássicos de Wolfram [1], bem

como construir a MTE associada a cada um. Procedimento similar foi aplicado ao modelo compartimental SI, modelo clássico da epidemologia matemática.

4. Usou-se a MTE para analisar cada AC, fechando a ponte entre os processos estocásticos Markovianos e a Teoria de Autômatos Celulares.

No presente relatório, primeiramente é apresentada uma descrição dos trabalhos realizados no período da iniciação científica, depois uma descrição dos resultados obtidos e por fim um anexo com os códigos, resumos e painéis enviados para seminários.

2 DESCRIÇÃO DE ATIVIDADES REALIZADAS

Primeiramente foi feita uma precisa leitura da bibliografia principal afim de conhecer alguns dos usos já conhecidos e praticados desde os primórdios desse conceito, o que chamou mais atenção nessa fase foi o uso de autômato celulares para a análise da propagação da dengue.

Um procedimento comum que foi adotado a respeito do assunto foi a classificação de cada AC segundo oito critérios: geometria, vizinhança, regra, condição inicial,conjunto de estados, condição de contorno e critério de atualização. Tendo isso em mente se deu início a programação de um programa que deveria ter definido as oito características básicas previamente definidas de um AC. O objetivo final do programa era possibiitar uma análise de um fenômeno como uma doença por exemplo em que houvesse apenas os estados de susceptível e infectado (representados por 0 e 1 respectivamente).

Houve dificuldades quanto a programação, mesmo sendo uma versão simplificada de um programa mais complexo, ainda assim o problema de tratamento para a vizinhança de alguns elementos específicos, todavia com um estudo e consultas aos orientadores o problema pode ser superado.

Partindo daí vários testes e aprimoramentos foram sendo realizados no programa, como ele tinha duas dimensões era possível armazenar suas matrizes de transição de estados e fazer uma análise matemática precisa analisando os detemrinantes, suas matrizes de cofatores, entre outras propriedades podendo assim definir outras características do autômato além de suas oito características previamente propostas. As análises matemáticas foram realizadas no software Mapple.

Após verificada a validade do autômato celular chamado de SI(uma vez que possui apenas os estados S “susceptível” e I “infectado”) era hora de melhorar sua estrutura de programação, eliminar linhas de código desnecessárias, criar um código para a análise de algumas variáveis importantes em tempo de execução, organizar melhor a estrutura do programa, aumentar ou diminuir a interação com o usuário. Tudo isso demandou um tempo considerável, mas teve como resultado um programa muito mais sólido que seu antecessor e tão funcional quanto, porém agora mais genérico, uma vez que o objetivo principal da iniciação científica era criar um autômato celular o mais genérico possível uma vez que o maior propósito do trabalho seria acreditar no potencial desse conceito chamado “autômato celular”.

Depois do sucesso em criar o AC bi dimensional de dois estados, foi o momento de ler um pouco mais sobre a biografia relacionada ao assunto e afim de simplificar o trabalho de futuras análises se deu início a programação de um AC uni dimensional com dois estados, onde a regra analisaria os vizinhos de uma celula e caso houvesse mais vizinhos “1” do que zero, aquela célular se tornaria “1” e vice-versa. Demos a este AC o nome de “Jogo da Maioria”, achamos modelos semelhantes feitos em outras linguagens e decidimos definir o autômato com as oito características como havia sido feito antes, porém esse era relativamente mais simples devido ao fato de existir apenas uma dimensão e a probabilidade de mudança de estado é de “1” ou “0” o que é diferente do SI em que havia uma probabilidade de infecção que variava de acordo com o número de vizinhos infectados que determinada célula possuia, isso tornava tanto a criação da MTE quanto no cálculo e interpretação de suas características principais. Os problemas antes enfrentados para contornar o problema de vizinhos na borda da matriz com o SI não foram mais um problema difícil e houve mais tempo para tornar o código mais inteligente e rápido.

Com o trabalho em desenvolvimento e o conteúdo já agredado até então, o trabalho foi submetido ao VII EVIFITA, um curso de verão realizado anualmente no ITA em São José do Campos. O bolsista, pós ter seu trabalho aceito para apresentação, foi agraciado também com a ajuda de custo para hospedagem e alimentação por parte da organização do evento. A experiência de submeter um trabalho e apresentá-lo foi muito gratificante e possibilitou ao bolsista ter a noção da importância do seu trabalho, a maneira que o universo acadêmico por ora enxerga seu esforço além de ser uma maneira de sentir a recompensa do esforço em elogios.

Estudando mais a fundo sobre a capacidade que os autômatos celulares poderiam ter e analisando mais a fundo a bibliografia nos deparamos com os 256 autômatos celulares de um matemático chamado Wolfram, de acordo com ele o potencial desse conceito é quase que infinito e que qualquer fenômeno poderia ser traduzido em automatos, o que incentivou o projeto a tentar criar um autômato genérico de Wolfram onde baseado em uma entrada do usuário seria criado um AC unidimensional seguindo uma das 256 regras de Wolfram. O trabalhoso disso não foi a criação do autômato em si, mas sim a sua generalização para qualquer regra. Uma vez pronto o autômato genérico paras as regras de Wolfram era preciso dar uma utilidade real para o trabalho e não só uma opção visual dos AC’s, por isso o principal objetivo deste último programa foi a geração de MTE’s, isso se tornou uma forma bem simples e prática para gerar as matrizes que seriam analizadas em programas apropriados.

2.1. Alguns tópicos de teoria

Antes de apresentar os resultados, apresentemos, conforme a literatura, alguns conceitos:

2.1.1. Diagonalização de matrizes

Diagonalizar uma matriz ajuda na solução de equações diferenciais, equações estas que tem a capacidade de estarem associadas ao crescimento de uma população, por exemplo. O processo de diagonalização se refere ao processo de encontrar as matrizes referentes aos auto valores e auto vetores de um sistema de equações diferenciais para assim obter a solução de um sistema de equações diferenciais.

2.1.2. Período de uma Matriz de Transição de Estados (MTE):

A análise do periodo de uma MTE ajuda a analisar o estado de equilíbrio de um autômato celular de uma maneira simples, utilizando multiplicação de matrizes. Dada uma MTE qualquer, caso MTE^2 seja igual a MTE, então o equilíbrio já foi alcançado, porém caso isso não ocorra é necessário multiplicar mais vezes a matriz por ela mesma até se alcançar o resultado de MTE elevado a n(número de vezes que se multiplicou) seja igual à MTE original. O número n é conhecido como o período de uma matrz de transição de estados.

2.1.3. Classes de AC’s:

De acordo com Wolfram [2] os autômatos celulares podem ser divididos em 4 classes que se caracterizam da seguinte maneira: a classe I abrange autômatos cuja configuração estável tende a ser homogênea, ou seja, todas as células em um mesmo estado. A classe II é a de autômatos que com o a evolução no tempo ele se torna estável, períodico, porém não homogêneo. A classe III já possui uma tendência a atingir um estado desordenado sem um padrão reconhecível. Por fim a classe IV após a evolução temporal gera uma situação imprevisível e complexa, pode aniquilar ou propagar estruturas em intervalos de tempo que podem ser grandes.

3 RESULTADOS

A seguir serão apresentados alguns dos resultados mais relevantes da pesquisa efetuada. Antes de apresentar os resultados, porém, apresentemos, conforme a literatura, alguns conceitos:

3.1. Modelo SI da Epidemiologia Matemática

Com o intuito de ter acesso a um exemplo mais simples de autômato celular primeiramente foi criado um SI, ou seja, um autômato celular considerando que a partir do momento que um indivíduo(ou célula), se tornasse infectada ela jamais voltaria ao estado de susceptível e a probabilidade de infecção é a mesma para todos os indivíduos. O código foi desenvolvido em linguagem C e sua maior dificuldade envolvia lidar com problemas de contorno. Embora o programa tenha cumprido o que foi planejado ele ainda era muito simples comparado a um automato pode alcançar em termos de precisão ou de utlidade.

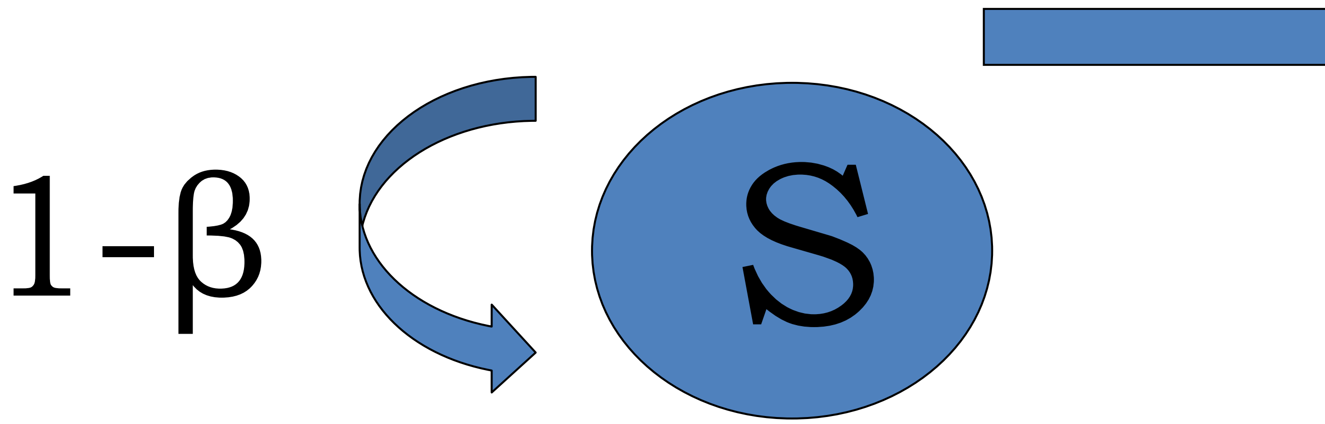

Figura 1. Representação gráfica de um Autômato SI.

$$
\begin{bmatrix}
1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
b & 1-b & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
b & 0 & 1-b & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\frac{1}{4}b^2 & \frac{1}{2}b-\frac{1}{4}b^2 & \frac{1}{2}b-\frac{1}{4}b^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
b & 0 & 0 & 0 & 1-b & 0 & 0 & 0 \\
\frac{1}{4}b^2 & \frac{1}{2}b-\frac{1}{4}b^2 & 0 & 0 & \frac{1}{2}b-\frac{1}{4}b^2 & \left(1-\frac{1}{2}b\right)^2 & 0 & 0 \\
\frac{1}{4}b^2 & 0 & \frac{1}{2}b-\frac{1}{4}b^2 & 0 & \frac{1}{2}b-\frac{1}{4}b^2 & 0 & \left(1-\frac{1}{2}b\right)^2 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1
\end{bmatrix}
$$

Figura 2. Exemplo de uma MTE de um Autômato Celular SI

3.2. Catálogo de Wolfran

Com o intuito de desenvolver um autômato que pudesse ser aproveitado em toda sua capacidade foi feito um autômato unicelular que a princípio era chamado de “jogo da maioria”, mas futuramente foi conhecido comoa regra 232 do catálogo de autômatos de Wolfram, a partir disso foi desenvolvido um autômato genérico para todas as 256 regras de Wolfram e que também gerasse a matriz de transição de estados para cada autômato, permitindo assim uma análise mais específica com softwares como Maple.

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

MTE correspondente à Regra 0 (Classe 1): tal matriz é diagonalizável, com período 1 e um único estado de equilíbrio.

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

MTE correspondente à Regra 32 (Classe 1): tal matriz é não diagonalizável, com período 2 e um único estado de equilíbrio.

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

MTE correspondente à Regra 160 (Classe 1): tal matriz é não diagonalizável, com período 2 e 2 estado de equilíbrio.

A conclusão é que o valor do período e a capacidade de uma MTE ser diagonalizável ou não não é capaz de caracterizar uma classe de AC's, segundo a classificação de Wolfran. Todavia, tais recursos podem ser interessantes para propor uma nova classificação, capaz de agrupar em uma mesma classe AC's com alguma propriedade dinâmica específica de relevância em alguma teoria ou aplicação.

O trabalho foi apresentado no VII EVIFITA realizado no ITA, em janeiro de 2012, na modalidade painel. Há também o planejamento de participar do congresso de iniciação científica da Unesp realizado em agosto na Faculdade de Engenharia de Guaratinguetá.

Nome do Programa	Descrição	Resultado	Linguagem em que foi desenvolvido
Autômato SI	Primeiro AC desenvolvido na IC, duas dimensões contendo apenas dois estado.	Análise simplificada de algum evento que possa ser descrito com dois estados "infecciosos"	Linguagem C
Jogo da Maioria 1D	Autômato com regra determinística, dois estados e uma dimensão	Anáise simples de um evento unidimensional que se comrporta de forma determinística	Linguagem C

Jogo da Maioria 2D	Autômato com regra determinística, dois estodos e duas dimensões	Semelhante ao SI, porém os estados se relacionam de forma determinística	Linguagem C
Autômato Genérico de Wolfram	Autômato capaz de gerar qualquer umas das 256 regras de Wolfram e gerar suas MTE's	Gera as Matrizes de Transção de Estados e as salva em arquivos separados	Linguagem C

Tabela 1. Descrição de cada código.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

[1] Neumann, V. (1966) Theory of self-reproducing automata. Illinois: A.W. Burks.

[2] Wolfram, S. (1994) Cellular Automata and Complexity. New York, Addison-Wesley Publishing Company, p. 316.

[3] Massad, E.; Menezes, R. X.; Silveira, P. S. P.; Ortega, N. R. S. (2004) Métodos Quantitativos em Medicina, São Paulo, Editora Manole.

[4] Santos, L. B. L.; Costa, M. C.; Pinho, S. T. R.; Andrade, R. F. S.; Barreto, F. R.; Teixeira, M. G.; Barreto, M. L. (2009). Periodic forcing in a three-level cellular automata model for a vector-transmitted disease. Physical Review. E, Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics (Print), v. 80, p. 016102.

[5] Ross, S. M. (2010) Introduction to Probability Models, 10th Ed. Academic Press is an imprint of Elsevier. ISBN: 978-0-12-375686-2