



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MEXICO

00382
4
2 EJ

FACULTAD DE CIENCIAS
DIVISION DE ESTUDIOS DE POSGRADO

COMPLEJIDAD Y AUTOMATAS CELULARES

FALLA DE ORIGEN

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO ACADÉMICO DE
DOCTOR EN CIENCIAS (FISICA)

P R E S E N T A

RAUL MAURICIO RECHTMAN SCHRENZEL

DIRECTOR DE TESIS : DR. GUSTAVO CARLOS MARTINEZ MEKLER

1995



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Resumen

Los autómatas celulares (ACs) son mapeos de un espacio discreto en sí mismo que han sido usados ampliamente como modelos de sistemas físicos, biológicos y químicos. Esto es debido a la sencillez en la definición del modelo complementada por la complejidad de su evolución. Por ello, el interés en los ACs tiene dos vertientes importantes, por un lado tratar de entender ó al menos clasificar su complejidad, y por el otro usarlos como modelos. En esta tesis discutimos ambas vertientes. Respecto a la primera presentamos los resultados de los trabajos:

- o F. Bagnoli, R. Rechtman, S. Ruffo, Some Facts of Life, *Physica A* **171** (1991) 249.
- o F. Bagnoli, R. Rechtman, S. Ruffo, General Algorithm for Totalistic Cellular Automata, *Journal of Computational Physics*, **101** (1992) 176-184.
- o F. Bagnoli, R. Rechtman, S. Ruffo, Damage Spreading and Lyapunov Exponents in Cellular Automata, *Physics Letters A* **172** (1992) 34-38.

El Juego de la Vida es un AC bidimensional totalístico que ha gozado de gran popularidad y que muestra un comportamiento complejo. En el primer trabajo discutimos sus propiedades asintóticas y presentamos una teoría sencilla que trata de explicar dichas propiedades. Los resultados que presentamos requirieron por una parte de simulaciones en computadoras dedicadas y por otra de un algoritmo rápido para computadoras de uso general. En el segundo trabajo describimos el algoritmo desarrollado. En el tercer trabajo presentamos una manera de extender el concepto de exponentes de Lyapunov de sistemas dinámicos continuos a ACs y mostramos que los ACs unidimensionales que muestran una evolución espacio temporal compleja poseen un exponente de Lyapunov positivo.

En cuanto a las aplicaciones, presentamos los resultados del trabajo:

- o R. Rechtman, A. Salcido, Lattice Gas Self-Diffusion in Random Porous Media, en A. Lawniczak, R. Kapral eds., *Pattern Formation and Lattice Gas Automata*, Fields Institute Communication Series, American Mathematical Society, en prensa.

En este trabajo usamos un AC bidimensional que puede modelar un gas bidimensional y simulamos su difusión en modelos de medios porosos.

Agradecimientos

Esta tesis contiene una parte del trabajo que he desarrollado en colaboración con Franco Bagnoli, Stefano Ruffo y Alejandro Salcido. A ellos les agradezco su amistad y el haber compartido sus ideas. Un agradecimiento lo merecen también los integrantes del jurado de este trabajo: Germinal Cocho, José Luis del Río, Claudio Estrada, José Franco, Gustavo Martínez, Eduardo Ramos y Jesús Urías.

Un agradecimiento aparte a la Facultad de Ciencias de la UNAM por su generosidad y por ser el mejor lugar para trabajar.

Finalmente, agradezco a Mila Bulajich y a Ana y Paula Rechtman por su apoyo cotidiano y todo lo demás.

Contenido

Resumen	iii
Agradecimientos	v
Cap. 1. Complejidad y Autómatas Celulares	1
1.1. Introducción	1
1.2. Plan de la tesis	2
1.3. Definiciones	5
1.4. Cosas de la Vida	11
1.5. Exponentes de Lyapunov para ACs	14
1.6. El modelo de 9 velocidades y su termodinámica	24
1.7. Auto difusión en el modelo de 9 velocidades	30
1.8. Conclusiones	33
Referencias	37
Apéndices	
A. Un algoritmo general para ACs	43
B. Cosas de la Vida	57
C. Exponentes de Lyapunov para ACs	69
D. Auto difusión en el modelo de 9 velocidades	77

Capítulo 1

Complejidad y Autómatas Celulares

1.1 Introducción

Los autómatas celulares (AC) son mapeos de un espacio discreto en sí mismo que se pueden definir de manera sencilla usando una regla local y que a veces muestran un comportamiento en el espacio y en el tiempo sumamente complejo.[1, 2, 3] El atractivo de los ACs radica por una parte, en tratar de entender, ó por lo menos tratar de clasificar, su complejidad, y por otra, en usarlos como modelos simples de sistemas complejos como pueden ser fluidos,[4, 5, 6, 7, 8] fenómenos de reacción-difusión,[9] dinámica de Ising y de Potts,[10, 11, 12, 74] agregación y solidificación,[14] gases de Lorentz en redes,[15, 16, 17, 18, 19] terremotos,[20] percolación,[21, 22] y también formación de galaxias.[23]

De acuerdo al Diccionario Ilustrado de la Lengua Española un autómata es una *máquina que imita la figura y los movimientos de un ser animado*. El análisis y la formalización del concepto de AC es debida a John von Neumann al inicio de los años cincuenta.[24] Para él, los ACs debían mostrar *resistencia al medio, reproducción y evolución de formas complejas* y construyó uno en una red cuadrada en la que el estado en cada sitio puede tomar 29 valores e interacciona con sus cuatro vecinos más cercanos que satisface los tres requisitos anteriores.[25]

En 1970 John Conway [26] propuso un AC conocido como el *Juego de la Vida*, que discutiremos más adelante, que satisface los requerimientos de von Neumann, pero es más sencillo. Gracias a Martin Gardner [27] y su

columna en *Scientific American* este juego alcanzó gran popularidad.[28, 29] Wolfram en 1983 atrajo el interés de una parte de la comunidad científica con la publicación de un artículo con el sugestivo título de "Mecánica Estadística de Automatas Celulares" [30] al grado tal que un año más tarde el interés de la comunidad había crecido enormemente y se presentaban las primeras aplicaciones.[1] La cantidad de temas y aplicaciones de ACs hacen difícil continuar con un esbozo histórico a partir de 1984.

Por otra parte, en 1973 Hardy, Pomeau y de Pazzis presentaron un modelo, conocido como HPP, de un gas en dos dimensiones usando un AC.[4] El modelo tiene fuertes limitaciones y no fue hasta 1986 con la presentación del modelo FHP que se extendió el uso de ACs en hidrodinámica.[5, 8] El atractivo de estos modelos, es que pretenden ser modelos mínimos en el mismo sentido que el modelo de Ising es el modelo mínimo del ferromagnetismo.

En este trabajo presentamos dos trabajos que tienen que ver con el análisis de la complejidad de los ACs y uno que utiliza un AC para modelar un fluido bidimensional en un modelo de medio poroso como describimos brevemente en la la sección 1.2.[31, 32, 33, 34] Presentamos también un algoritmo rápido para autómatas totalísticos que fue usado en varios de los experimentos computacionales que reportamos.[35]

1.2 Plan de la tesis

En la sección que sigue definimos los ACs.[36] Como mencionamos al principio, es interesante estudiar por una parte, la complejidad de los ACs y por otra, usarlos como modelos de sistemas complejos. Como ejemplo del primer aspecto, discutimos en esta tesis la estadística de la evolución temporal del Juego de la Vida en la sección 1.4 que es un resumen del trabajo reproducido en el apéndice B.[31]. El estudio de los ACs descansa en experimentos computacionales por lo que es necesario emplear técnicas y algoritmos rápidos. En el apéndice A aparece un artículo en el que discutimos un algoritmo rápido para ACs totalísticos y totalísticos externos.[35] Este algoritmo está basado en la técnica de multibit.

Una motivación constante en la literatura acerca de ACs es la búsqueda de una clasificación de los mismos con el objetivo de tratar de entender el origen de la complejidad en distintos sistemas.[37, 38, 39, 40, 41] La clasificación de Wolfram en cuatro clases basada en una analogía con el comportamiento de sistemas dinámicos es la más usada y criticada (ver secc. 1.3). Dada la importancia de los exponentes de Lyapunov en el estudio de siste-

mas dinámicos continuos,[42, 43] intentamos extender dicho concepto a los ACs. Esto lo logramos utilizando la derivada booleana [44, 45] y una extensión del concepto de crecimiento del daño. En la sección 1.5 presentamos una manera de definir exponentes de Lyapunov para ACs y en el apéndice C aparece un trabajo con los primeros resultados para ACs elementales. En los experimentos computacionales que reportamos, así como los de la sección 1.3 usamos la técnica de multibit pero el algoritmo empleado para codificar la regla fue la expansión de la misma en la fórmula de Maclaurin.[45]

Por otra parte, presentamos algunos resultados acerca de un AC usado en la simulación de fenómenos hidrodinámicos en dos dimensiones conocido como el modelo de nueve velocidades. Los modelos de hidrodinámica usando ACs conocidos como "gases en redes usando autómatas celulares" han sido estudiados ampliamente.[8, 46, 47] En estos modelos el comportamiento hidrodinámico es el resultado de las colisiones de un gran número de "partículas" que se mueven de manera sencilla.[6]

En el modelo de nueve velocidades en cada sitio de una red cuadrada puede haber no más de nueve partículas, una en reposo, cuatro moviéndose en la dirección de los ejes coordenados hacia los primeros vecinos más cercanos y cuatro más en la dirección de los segundos vecinos más cercanos. Este es el modelo más sencillo en el cual la conservación de la energía en las colisiones es independiente de la conservación de la masa. Los modelos de ACs para hidrodinámica satisfacen una estadística de Fermi-Dirac y en el modelo de nueve velocidades el espectro de energía está acotado por abajo y por arriba por lo que el comportamiento termodinámico no es normal en el sentido de que la entropía no es una función no decreciente de la energía. En la sección 1.6 presentamos el modelo mencionado y discutimos brevemente su termodinámica.

En la sección 1.7 y el apéndice D estudiamos la auto difusión del modelo de nueve velocidades en modelos de medios porosos. Los gases en redes usando ACs son una herramienta útil para estudiar flujos en medios porosos pues es fácil implementar las condiciones a la frontera. En la última sección de este capítulo se incluyen algunas conclusiones.

El estudio de los ACs descansa fuertemente en el uso de computadoras y aún cuando estos son en principio sencillos, es necesario usar técnicas de programación que hagan un uso eficiente de los recursos. Para poder obtener los resultados que reportamos para el Juego de la Vida fue necesario recurrir a computadoras dedicadas [48, 49] y también a las de uso general. Para éstas desarrollamos un algoritmo rápido basado en la técnica de multibit en la cual se usan todos los bits de una palabra y todos son igualmente significativos.

En un AC booleano el estado de cada sitio ocupa un bit. Como veremos en la sección 1.3 un AC queda totalmente definido por una tabla de verdad que es equivalente a una expresión lógica. En la técnica de multibit se usa una expresión lógica pues las computadoras implementan las operaciones lógicas bit a bit. Si queremos hacer un uso eficiente, dicha expresión lógica debe ser lo más compacta posible. En la búsqueda de una simplificación para el Juego de la Vida encontramos un algoritmo basado en el uso extensivo de la disyunción exclusiva (XOR) que permite una reducción significativa de las expresiones lógicas de los ACs totalísticos y totalísticos externos.

En el estudio de la evolución temporal del Juego de la Vida encontramos que partiendo de una condición inicial al azar con una densidad (la fracción de sitios vivos respecto al total de sitios) que no sea demasiado pequeña ó demasiado grande, el sistema alcanza un estado final con densidad cercana a 0.028. Con un modelo estocástico sencillo podemos predecir el valor de la densidad final. Además encontramos que la evolución temporal a partir de un estado inicial al azar puede separarse en tres regímenes de los cuales el más interesante es el que se establece a tiempos largos y que llamamos regimen de planeadores. Conjeturamos que en el límite termodinámico este regimen se mantiene por lo que decimos que el sistema posee criticalidad auto organizada.[50] Si cambiamos un poco la regla que define el Juego de la Vida, el cambio en la evolución es impredecible por lo que el análisis que presentamos no se puede generalizar a otro tipo de autómatas celulares.

Para sistemas dinámicos continuos la sensibilidad respecto a condiciones iniciales, ó lo que es lo mismo, la positividad del exponente de Lyapunov máximo, es una condición necesaria para que el sistema sea caótico.[51, 52] El exponente de Lyapunov máximo es la tasa de separación exponencial en el espacio tangente de dos trayectorias inicialmente muy cercanas, pero en el caso discreto, la separación en el espacio de configuración está dada por la distancia de Hamming, que puede crecer a lo más linealmente con el tiempo. Es más, algunos autores definieron la tasa de crecimiento lineal de dicha distancia como el exponente de Lyapunov.[53] Encontramos que una forma eficiente de medir la distancia de Hamming es usando la expansión en serie de Taylor del AC y que al trunca la expansión a orden lineal y cambiar las operaciones booleanas por operaciones algebraicas, se llega a una cantidad que expresa la capacidad de que un daño inicial crezca. Dicha cantidad puede crecer exponencialmente y definimos el exponente de Lyapunov de AC como la tasa de expansión exponencial de ella. También definimos un parámetro μ que mide de alguna manera la tasa de cambio promedio del AC y concluimos que si este parámetro es suficientemente grande, el exponente

de Lyapunov es positivo y el AC es de *clase 3*. Encontramos además una relación interesante con un problema de percolación dirigida que a su vez es equivalente al producto de una clase de matrices aleatorias.

El estudio de la termodinámica del modelo de nueve velocidades fue motivado por la incompatibilidad en la literatura entre la afirmación de que los gases en redes satisfacen por un lado la estadística de Fermi-Dirac y por el otro la ecuación de estado de un gas ideal clásico.[55, 56] Encontramos que la ecuación de estado es la de un gas ideal cuántico en el cual la temperatura como función de la energía puede ser infinita y también negativa de la misma manera que en sistemas de spines.[66] Para un número de ocupación fijo, hay una cota inferior y una cota superior a la energía por sitio y en estas dos cotas el sistema se encuentra ordenado.

Existe gran interés en usar los gases en redes para simular flujos a través de medios porosos motivado por las aplicaciones prácticas como la recuperación secundaria del petróleo y el secado de granos y porque los métodos de solución numérica de la ecuación de Navier Stokes no pueden usarse con condiciones a la frontera tan complejas como lo son las paredes del medio poroso.[58, 59, 60, 61] La auto difusión es un fenómeno dominado por las fluctuaciones alrededor del equilibrio termodinámico que conocemos bien para el modelo de nueve velocidades por lo que intentamos encontrar como depende el coeficiente de auto difusión D de la energía y de la densidad a distintas porosidades. Para esto fue necesario construir un modelo de medio poroso en el cual se pudiera mover el fluido con poros lo suficientemente grandes para que el movimiento y la colisión de las partículas entre sí diera lugar a un comportamiento hidrodinámico. Dicho medio es similar al modelo del queso suizo usado en teoría de la percolación.[62] Definimos la porosidad p como la fracción de sitios ocupada por el cúmulo infinito por lo que $p_c \leq p \leq 1$ donde p_c es la percolación crítica. Encontramos experimentalmente que a densidad constante D es una función creciente de la energía y a energía constante y porosidades altas D decrece con n , pero este comportamiento cambia a medida que el que p disminuye.

1.3 Definiciones

Un autómata celular es un mapeo de un espacio discreto discreto en sí mismo $F: \mathbf{B}_k^L \rightarrow \mathbf{B}_k^L$ con $\mathbf{B}_k = \{0, 1, \dots, k-1\}$ y L un entero. Se introduce un tiempo discreto t de manera que

$$\mathbf{x}(t+1) = \mathbf{F}(\mathbf{x}(t)), \quad (1.1)$$

con $\mathbf{x}(t) = (x_0(t), \dots, x_{L-1}(t))$, $x_i \in \mathbf{B}_k$, $i = 0, \dots, L-1$. El conjunto \mathbf{B}_k^L se conoce como el espacio de configuración y $\mathbf{x}(t)$ como el estado ó configuración al tiempo t . Si $k = 2$ hablamos de un AC booleano.

Usualmente asociamos al AC una red discreta de L sitios en un espacio de d dimensiones y decimos que x_i es el estado en el sitio i . En este caso, la función F puede definirse usando las funciones locales f_i ,

$$x_i(t+1) = f_i(x_j(t) \mid j \in V_i) \quad (1.2)$$

donde V_i es una vecindad del sitio i , $i = 0, \dots, L-1$. Los casos más estudiados son aquellos en que las funciones locales y las vecindades son las mismas en toda la red y son los que nos interesan en este trabajo. Además es usual usar vecindades centradas en el sitio, por lo cual es importante especificar las vecindades en los puntos extremos de la red. En todo lo que sigue usaremos condiciones periódicas en las fronteras a menos que especifiquemos otras.

En una dimensión se acostumbra definir la vecindad de un sitio como el conjunto de sitios que incluyen al sitio mismo y a sus r vecinos cercanos a la izquierda y la derecha y se habla de un AC unidimensional de alcance r . En 2 dimensiones en una red cuadrada las vecindades más usadas son la de von Neumann que contiene a los cuatro vecinos más cercanos y la de Moore que contiene además a los siguientes vecinos más cercanos.

Los ACs unidimensionales elementales (ACEs) tienen $r = 1$ y $k = 2$. La función local f puede definirse por una tabla de verdad como en la Tabla 1. La columna debajo de f es un número binario de 8 bits (el bit menos significativo está en el primer renglón), por lo que hay $2^8 = 256$ ACEs. Siguiendo la notación de Wolfram [30] el número de la última columna de la tabla de verdad leído en base 10 da nombre al ACE. La Tabla 1 muestra la tabla de verdad del ACE 22.

x_{i-1}	x_i	x_{i+1}	f
0	0	0	0
0	0	1	1
0	1	0	1
0	1	1	0
1	0	0	1
1	0	1	0
1	1	0	0
1	1	1	0

En las figs. 1.1 y 1.2 se muestra la evolución espacio temporal del ACE 22 partiendo de diferentes condiciones iniciales. En la primera la configuración inicial es 1 en el sitio central y 0 en los demás y se observa que el patrón generado es (en el límite en que $t \rightarrow \infty$) un triángulo de Sierpinski. En en la segunda se escogió una condición inicial al azar con densidad $\rho(0) = 0.5$. La densidad se define como la fracción de sitios donde el estado vale 1. Vemos como una regla sencilla puede generar patrones espacio temporales complejos.

La conjugación (cambio de 1's por 0's y viceversa) y la reflexión (intercambio de la primera columna con la tercera en la tabla de verdad) generan una partición con 88 elementos en el conjunto de ACs elementales. Si tomamos el ACE con el número más pequeño tenemos el conjunto de las 88 reglas mínimas que es más fácil de estudiar que todo el conjunto de los 256 ACEs (ver el apéndice de [1]).

En general, hay

$$k^{k(2r+1)}$$

ACs unidimensionales de alcance r y k estados. Para $r = 2$, $k = 2$ son aproximadamente 4.295×10^9 reglas. Ante la imposibilidad de estudiar todo este conjunto, es usual limitarse a los autómatas totalísticos (ACTs) definidos por

$$x_i(t+1) = f(h_i(t))$$

con

$$h_i(t) = \sum_{j \in V_i} x_j(t).$$

Es claro que $0 \leq h_i \leq (2r+1) \times (k-1)$. Igual que con los ACEs se puede definir un ACT por una tabla de verdad y el número en base k en la columna de la función f leído en base 10 da nombre al AC. Los ACTs legales son aquellos para los cuales $f(h_i = 0) = 0$. Hay 32 ACTs legales con $r = 2$ y $k = 2$ a los que corresponden los números pares del 0 al 62. En la tabla siguiente mostramos el ACT 28 como un ejemplo y en la fig. 1.3 su evolución espacio temporal.

Este tipo de evolución se produce cuando el sistema evoluciona a partir de una condición inicial que es un vector de estado que contiene un solo bit de información. En este caso, el sistema evoluciona a partir de una condición inicial que es un vector de estado que contiene un solo bit de información.

Este tipo de evolución se produce cuando el sistema evoluciona a partir de una condición inicial que es un vector de estado que contiene un solo bit de información. En este caso, el sistema evoluciona a partir de una condición inicial que es un vector de estado que contiene un solo bit de información.

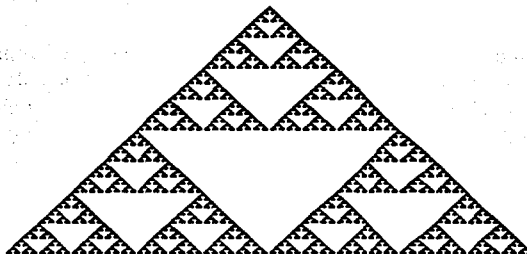


Figura 1.1: Evolución espacio temporal del ACE 22 a partir de la condición inicial $\mathbf{x}(0) = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)$ con $L = 256$, $T = 128$, (T es el tiempo máximo).

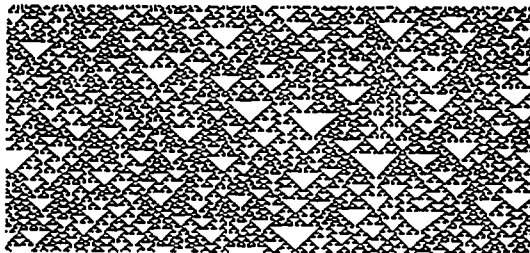


Figura 1.2: Evolución espacio temporal del ACE 22 a partir de una condición inicial al azar con $\rho(0) = 0.5$, $L = 256$, $T = 128$.

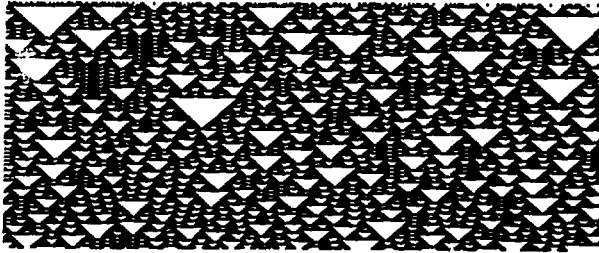


Figura 1.3: Evolución espacio temporal del ACT 28 a partir de una condición inicial aleatoria con $\rho_0 = 0.5$, $L = 256$ y $T = 128$.

Tabla 2

h_i	f
0	0
1	0
2	1
3	1
4	1
5	0

Partiendo de un análisis cualitativo de la evolución espacio temporal de los 32 ACTs legales con $r = 2$ y $k = 2$, empezando con una configuración aleatoria, Wolfram propuso una clasificación en analogía con los sistemas dinámicos continuos.[37] Dicha clasificación separa a esos ACTs en cuatro clases:

Clase 1. La evolución va a un estado homogéneo, ACTs 0, 4, 16, 32, 36, 48, 54, 60 y 62.

Clase 2 La evolución va a un conjunto de estructuras separadas simples y estables ó periódicas, ACTs: 8, 24, 40, 56 y 58.

Clase 3 La evolución va a un patrón caótico, ACTs 2, 6, 10, 12, 14, 18, 22, 26, 28, 30, 34, 38, 42, 44, 46 y 50.

Clase 4 La evolución va a estructuras localizadas complejas que pueden, algunas veces, vivir durante un tiempo largo, ACTs: 20 y 52.



Figura 1.4: Evolución espacio temporal del ACT 24 de *clase 2* a partir de una condición inicial al azar con $\rho(0) = 0.5$, $L = 256$, $T = 128$.

Las reglas de *clase 1* no son interesantes, el estado homogéneo en el que caen tiene solamente 0's ó solamente 1's. En las figs. 1.4, 1.3 y 1.5 mostramos ejemplos de ACTs de *clases 2, 3 y 4* respectivamente.

La clasificación de Wolfram es la más utilizada y también la más criticada por lo que es necesario hacer algunas aclaraciones. Para las primeras tres *clases* la analogía con sistemas dinámicos es más o menos clara: la trayectoria en el espacio fase tiende a un punto fijo, a un ciclo límite ó a un atractor extraño respectivamente. Los miembros de la *clase 4* no tienen una contraparte en los sistemas dinámicos continuos lo que hace aún más atractiva la clasificación. Se ha especulado (ref. [37] p.31) que los ACTs de *clase 4* son capaces de computación universal al igual que el Juego de la Vida. La universalidad computacional implica que una configuración inicial bien escogida puede especificar un procedimiento algorítmico arbitrario. En principio el sistema puede usarse como una computadora de uso general capaz de evaluar cualquier función (computable).

En la definición de la *clase 3* se habla de "un patrón caótico" pero aparte de ofrecer una evidencia visual totalmente cualitativa como la de la fig. 1.3 no hay una definición cuantitativa de caos para autómatas celulares. Hay evidencias numéricas de que los ACs de *clase 3* poseen ciertas cualidades que los separan de las otras clases, como el hecho de que la evolución temporal a partir de un estado inicial al azar alcanza estados con una densidad constante independiente de la densidad inicial si es que ésta no es demasiado pequeña ó demasiado grande. Todos los ACTs de *clase 3* poseen el comportamiento mencionado pero también algunos de *clase 2*. En la sección 1.5 presentamos



Figura 1.5: Evolución espacio temporal de la regla 52 de clase 4 a partir de una condición inicial al azar con $\rho(0) = 0.5$, $L = 256$, $T = 128$.

una manera de definir exponentes de Lyapunov para ACs con el objetivo de contar con una cantidad que permita discernir entre las clases.

1.4 Cosas de la Vida

En esta sección presentamos un resumen de los resultados del apéndice B. Los resultados computacionales requirieron del uso de computadoras dedicadas y del desarrollo de un algoritmo rápido que reproducimos en el apéndice A. El Juego de la Vida es sin lugar a dudas el AC más conocido y posee propiedades sorprendentes que lo hacen sumamente atractivo. En particular, fue uno de los primeros modelos de criticalidad auto organizada [50] y también se propuso como un modelo de mecánica estadística.[29] El Juego de la Vida es un AC totalístico de 2 estados en dos dimensiones definido en una vecindad de Moore (que incluye al sitio y sus primeros y segundos vecinos más cercanos). La regla de evolución puede expresarse como

$$x_{i,j}(t+1) = \delta(S_{i,j}(t), 3) + x_{i,j}(t)\delta(S_{i,j}(t), 2) \quad (1.3)$$

donde $x_{i,j} = 0, 1$ es el estado en el sitio (i, j) , $\delta(m, n)$ es la delta de Kronecker de m y n y $S_{i,j}$ es la suma de los estados en la vecindad del sitio (i, j) excluyendo al sitio mismo. En otras palabras

$$S_{i,j}(t) = \sum_{k=i-1}^{i+1} \sum_{l=j-1}^{j+1} x_{k,l}(t) - x_{i,j}(t) \quad (1.4)$$

con $0 \leq S_{i,j} \leq 8$.

La simplicidad de la regla esconde un comportamiento complejo. Comenzando con una configuración aleatoria de sitios vivos y muertos la evolución del sistema tiende a islas de vivos con estructuras simétricas que son perturbadas por las estructuras vecinas y por los planeadores que son emitidos por otras islas. Después de un tiempo largo la evolución es dominada por las colisiones de planeadores con islas de actividad para terminar en una configuración estable de sitios vivos que puede ser periódica. Mostramos en la fig.1.6 una posible configuración final que muestra el tipo de estructuras que persisten, y que llamamos *animales* en analogía con los cúmulos de la teoría de la percolación. En la fig. 1 del apéndice B mostramos la fracción de veces que se observan las estructuras más comunes. El estado final tiene una densidad (fracción de sitios vivos respecto al total de sitios) que siempre está cercana a 0.0285. Siendo un poco más precisos, si la red no es demasiado pequeña (más de 128×128 sitios) y la densidad del estado inicial aleatorio no es muy pequeña (mayor que 0.1) y tampoco muy grande (menor de 0.8) el estado final tiene una densidad cercana a 0.028 como mostramos en la fig. 3 apéndice B.

Otro aspecto interesante es la evolución temporal hacia el estado final. La primera parte de la evolución que incluye unos 10 ó 20 pasos depende de la condición inicial y es un relajamiento a un comportamiento que ya no depende de la misma y que dura unos 2000 pasos. En este intervalo, la densidad puede ajustarse por la ley de potencia

$$\rho(t) = \rho_0^{(e)} t^{-\beta} \quad (1.5)$$

con $\rho_0^{(e)} \sim 0.4$ y $\beta \sim 0.3$. Para $t > 2000$ hay un cambio al valor asintótico $\rho_\infty^{(e)}$ que comentamos anteriormente como mostramos en la fig. 5 del apéndice B. El valor de $\rho_0^{(e)}$ es similar al que predice una teoría de campo medio (que presentamos en el apéndice B) la cual es válida durante los primeros pasos temporales antes de que se impongan correlaciones. La evolución temporal tiene un cambio alrededor de $t_c \sim 2000 - 3000$. La inspección visual del AC muestra que para $t < t_c$ la evolución es causada por islas de actividad que cambian continuamente, mientras que para $t > t_c$ hay pocas islas relativamente estables que cambian al ser atacadas por un planeador emitido por alguna otra isla lejana. El comportamiento antes de t_c lo llamamos el regimen activo, y después de t_c regimen de planeadores. Eventualmente los planeadores desaparecen y se llega al estado final con una densidad $\rho_\infty^{(e)} \sim 0.028$. El comportamiento mencionado no parece depender del tamaño de la red

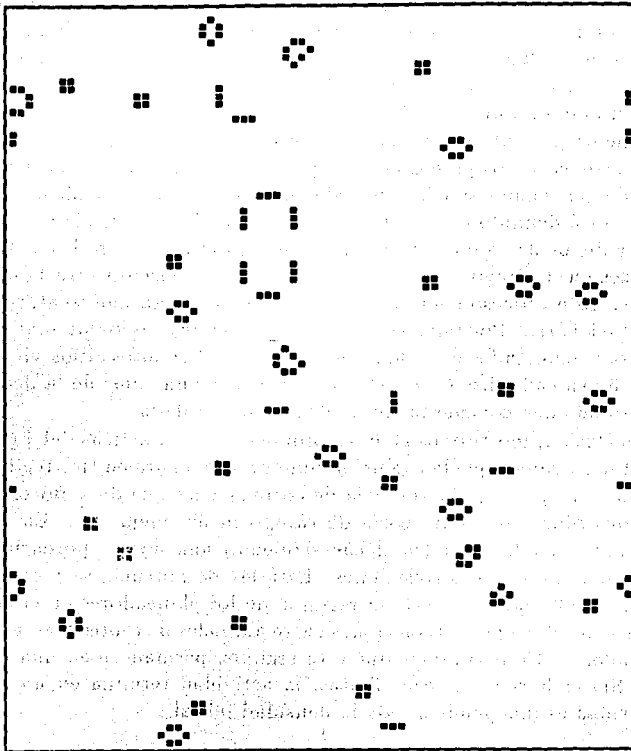


Figura 1.6: Una configuración final en una red pequeña de 75×96 sitios partiendo de una configuración inicial al azar con densidad 0.5.

por lo que el valor de t_c debe alcanzar un valor asintótico finito al aumentar el tamaño de la red. En una red de tamaño infinito la probabilidad de que haya planeadores debe ser distinta de cero por lo que se ha especulado que el regimen de planeadores se mantendría indefinidamente en un estado de criticidad auto organizada.[50]

Finalmente presentamos un modelo estocástico sencillo que trata de explicar el regimen de los planeadores y que confirma el valor de la densidad final si sabemos cuales son los animales que permanecen en dicho estado. El modelo está definido en el continuo. Empezando con un plano vacío se dejan caer discos de radio variable determinado al azar entre los radios de los animales que sobreviven en el estado final. Si dos discos se traslapan son removidos. Este proceso continúa indefinidamente hasta que se alcanza un estado estacionario. Podemos entonces saber cuantos discos permanecen y de los valores reportados en la fig. 1 del apéndice B cuantos sitios vivos hay en promedio en cada disco. De estos datos se sigue un valor de la densidad en dicho estado que concuerda con la densidad calculada.

En conclusión, mostramos algunas propiedades estadísticas del Juego de la Vida. Encontramos que la evolución temporal se separa en tres regímenes: el primero dominado por la ausencia de correlaciones que dura pocos pasos y puede describirse por una teoría de campo medio mejorada. En el regimen de actividad la densidad decae siguiendo una ley de potencias que indica el dominio de las correlaciones. Esta ley de potencia se pierde para $t_c \sim 2000 - 3000$ para dar paso al regimen de los planeadores en el cual la actividad se produce por interacciones entre animales distantes mediada por los planeadores. Conjeturamos que este regimen permanece en una red de infinita. Sin embargo, en redes finitas, la actividad termina en un estado cuya densidad es independiente de la densidad inicial.

1.5 Exponentes de Lyapunov para ACs

Presentamos una definición de exponentes de Lyapunov para ACs unidimensionales booleanos elementales que indica como crece el número de maneras en que un defecto inicial se puede propagar. También evaluamos el exponente de Lyapunov máximo (ELM) para ACs elementales y de alcance $r = 2, 3$ y mostramos una analogía entre el crecimiento de maneras en que un defecto se puede propagar en dichos ACs con una clase de problemas de percolación dirigida. La evaluación de los ELMs de ACs elementales se publicaron en [32] que aparece en el apéndice C, mientras que los resultados

para ACs unidimensionales totalísticos de alcance $r = 2, 3$ se presentaron en [63] y los relativos a los espectros de Lyapunov para ACs elementales se presentaron en [64]. Toda la discusión de esta sección puede extenderse de manera inmediata a ACs booleanos en más dimensiones.

1.5.1 Definiciones

En sistemas dinámicos continuos, el exponente de Lyapunov máximo (ELM) indica la tasa de separación exponencial entre dos trayectorias inicialmente muy cercanas donde la distancia se mide en el espacio tangente. En el caso en que el ELM sea positivo se dice que hay sensibilidad respecto a las condiciones iniciales y puede haber caos. En esta sección mostramos como se pueden definir los exponentes de Lyapunov para ACs.

Sean $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbf{B}_k^L$ dos configuraciones cualesquiera y sea \mathbf{z} su diferencia definida como $\mathbf{z} = \mathbf{x} \oplus \mathbf{y}$ donde la operación \oplus es la disyunción exclusiva sitio a sitio. En otras palabras, z_i toma el valor 1 si y solo si $x_i \neq y_i$. La distancia de Hamming H entre \mathbf{x} y \mathbf{y} se define como

$$H(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = |\mathbf{z}| = \sum_i z_i. \quad (1.6)$$

La distancia de Hamming es el punto de partida para estudiar la sensibilidad respecto a condiciones iniciales, considerando la evolución temporal a partir de dos configuraciones $\mathbf{x}(0)$ y $\mathbf{y}(0)$ cercanas, la primera una configuración aleatoria y la segunda cercana a la primera de manera que $y_i = x_i \forall i \neq 0, y_c = x_c \oplus 1, i = \dots, -1, 0, 1, \dots$ donde el sitio c es el sitio central. ¹ La distancia de Hamming a $t = 0$ es 1 y al tiempo t puede calcularse usando la ec. (1.6) Sin embargo, hacerlo así es dispendioso ya que hay que computar tanto $\mathbf{x}(t)$ como $\mathbf{y}(t)$. Usando la expansión de la función f en serie de Taylor [45] es posible conocer la distancia de Hamming siguiendo la evolución temporal de $\mathbf{x}(0)$ y además es posible definir exponentes de Lyapunov como veremos más adelante.

Para ACEs tenemos que

$$x_i(t+1) = f(x_{i-1}, f_i, x_{i+1}) \quad (1.7)$$

y expandiendo en serie de Taylor alrededor de (x_{i-1}, x_i, x_{i+1})

$$y_i(t+1) = f(x_{i-1}, x_i, x_{i+1}) \oplus [f'_i \wedge (x_{i-1} \oplus y_{i-1})] \oplus$$

¹El sitio central c puede ser cualquiera ya que estamos considerando condiciones periódicas a la frontera. Por otra parte, $x \oplus 1 = \neg x$ y $x \oplus 0 = x$ con $\neg x$ la negación de x .

$$\begin{aligned}
& [f'_0 \wedge (x_i \oplus y_i)] \oplus [f'_+ \wedge (x_{i+1} \oplus y_{i+1})] \oplus \\
& [f''_{-0} \wedge (x_{i-1} \oplus y_{i-1}) \wedge (x_i \oplus y_i)] \oplus \\
& [f''_{-+} \wedge (x_{i-1} \oplus y_{i-1}) \wedge (x_{i+1} \oplus y_{i+1})] \oplus \\
& [f''_{0+} \wedge (x_i \oplus y_i) \wedge (x_{i+1} \oplus y_{i+1})] \oplus \\
& [f'''_{-0+} \wedge (x_{i-1} \oplus y_{i-1}) \wedge (x_i \oplus y_i) \wedge (x_{i+1} \oplus y_{i+1})] \quad (1.8)
\end{aligned}$$

En la expresión anterior f'_- es la primera derivada booleana de f respecto a la variable de la izquierda valuada en (x_{i-1}, x_i, x_{i+1}) definida como

$$f'_-(x_{i-1}, x_i, x_{i+1}) = f(x_{i-1}, x_i, x_{i+1}) \oplus f(x_{i-1} \oplus 1, x_i, x_{i+1}). \quad (1.9)$$

Esta derivada es 1 si la función es sensible al cambio de x_{i-1} y 0 en caso contrario. Las primeras derivadas booleanas respecto a la variable del centro f'_0 y respecto a la variable de la derecha f'_+ se definen de manera análoga. También f''_{-0} es la segunda derivada booleana de f respecto a las variables de la izquierda y del centro valuada en (x_{i-1}, x_i, x_{i+1}) definida como la derivada respecto a x_{i-1} de la derivada de f respecto a x_i . Es decir,

$$\begin{aligned}
f''_{-0}(x_{i-1}, x_i, x_{i+1}) &= f(x_{i-1}, x_i, x_{i+1}) \oplus f(x_{i-1}, x_i \oplus 1, x_{i+1}) \oplus \\
& f(x_{i-1} \oplus 1, x_i, x_{i+1}) \oplus \\
& f(x_{i-1} \oplus 1, x_i \oplus 1, x_{i+1}) \quad (1.10)
\end{aligned}$$

Vemos que el orden de la derivación es irrelevante. Las otras dos segundas derivadas booleanas f''_{-+} y f''_{0+} se definen de la misma manera. Utilizando la ec. (1.10) puede verse fácilmente que la segunda derivada respecto a la misma variable es siempre 0. La tercera derivada booleana f'''_{-0+} que aparece en la ec. (1.8) es la derivada respecto a x_{i-1} de la derivada respecto a x_i de la derivada respecto a x_{i+1} de f valuada en (x_{i-1}, x_i, x_{i+1}) . Esta es la única tercera derivada parcial de f que puede ser distinta de 0 dado que el orden de la derivación es irrelevante y la segunda derivada de f respecto a la misma variable es 0. Por la misma razón todas las derivadas de f de orden superior son 0 y la expansión en serie de Taylor de la ec. (1.8) es exacta. La expansión en serie de Taylor de un AC booleano unidimensional de alcance r contiene las primeras $2r+1$ derivadas parciales y en general, si la vecindad contiene m sitios, la expansión en serie de Taylor termina en la m -ésima derivada parcial. Por otra parte, también es posible encontrar la fórmula de Maclaurin de un AC y es muy económico usarla en los experimentos.

Usando las expresiones anteriores tenemos que

$$z_i(t+1) = x_i(t+1) \oplus y_i(t+1)$$



Figura 1.7: Evolución de la configuración z a partir de la configuración $z(0)$ que se menciona en el texto para la regla 22 con $T = 150$.

$$\begin{aligned}
 = & [f'_- \wedge z_{i-1}] \oplus [f'_0 \wedge z_i] \oplus [f'_+ \wedge z_{i+1}] \oplus \\
 & [f''_{-0} \wedge (z_{i-1} \oplus z_i)] \oplus [f''_{+} \wedge (z_{i-1} \oplus z_{i+1})] \oplus \\
 & [f''_{+} \wedge (z_i \oplus z_{i+1})] \oplus \\
 & [f'''_{-0+} \wedge (z_{i-1} \oplus z_i \oplus z_{i+1})]
 \end{aligned} \tag{1.11}$$

Vemos de la última ecuación que basta con conocer $x(t)$ para conocer $z(t)$ y también la distancia de Hamming, ec. (1.6). En la fig. 1.7 mostramos un ejemplo de como crece un defecto inicial para la regla 22, es decir, la evolución de z . Es claro que para un AC de alcance r , $H(t) \leq (2r + 1)t$. Se ha propuesto llamar a la tasa de crecimiento de H como el exponente de Lyapunov.[54] Siendo un poco más específicos, se repite el cálculo de z un gran número de veces, se grafica el resultado promedio que será algo parecido a un triángulo con bordes un poco irregulares y se define el exponente de Lyapunov por la izquierda (derecha) como la pendiente del lado izquierdo (derecho) del triángulo. En el apéndice de la ref. [37] aparecen los valores de estas cantidades para los 88 ACEs mínimos. Sin embargo, esta definición no toma en cuenta la estructura diferencial de los ACs y expresa la tasa de crecimiento lineal de una cierta distancia y no la tasa de crecimiento exponencial.

En la búsqueda de los exponentes de Lyapunov, cortamos la serie de Taylor ec. (1.8) a primer orden por lo que podemos escribir

$$z(t+1) \simeq F'(t)z(t) \tag{1.12}$$

donde F' es la matriz jacobiana de F cuyos elementos son las primeras de-

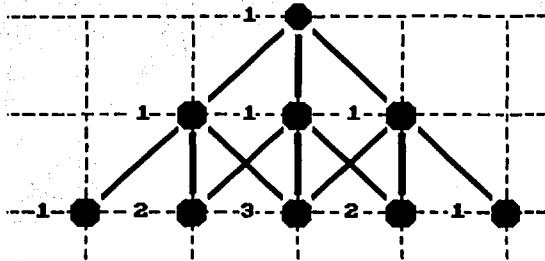


Figura 1.8: Evolución temporal del vector N para el ACE 150 hasta $t = 2$. Los números son los valores de $N_i(t)$.

rivadas booleanas parciales. Para ACEs la matriz jacobiana es una matriz de Jacobi con $F'_{i,j} = 0$ si $|i - j| > 1$ y $F'_{i,i-1} = f'_-(x_{i-1}, x_i, x_{i+1})$, $F'_{i,i} = f'_0(x_{i-1}, x_i, x_{i+1})$ y $F'_{i,i+1} = f'_+(x_{i-1}, x_i, x_{i+1})$ con $i = 0, \dots, L-1$. En la ec. (1.12) la multiplicación del vector $\mathbf{z}(0)$ por la matriz \mathbf{F}' es booleana (la suma y producto de la multiplicación usual entre un vector y una matriz son reemplazados por la conjunción y la disyunción exclusiva respectivamente). La norma de \mathbf{z} usando la ec. (1.12) también está acotada por $(2r + 1)t$.

Sea $\mathbf{N}(0) = (N_1(0), \dots, N_{L-1}(0))$, con $N_i = \delta_{i,c}$, δ la función delta de Kronecker y c el sitio central de la red (que puede ser un sitio cualquiera pues trabajamos con condiciones periódicas a la frontera). Definimos el mapeo

$$\mathbf{N}(t+1) = \mathbf{F}'(t)\mathbf{N}(t) \quad (1.13)$$

con una multiplicación algebraica usual de una matriz por un vector. La cantidad $N_i(t)$ indica de cuántas maneras puede haber un daño en el sitio i al tiempo t . Auxiliados de la fig. 1.8 que muestra la evolución del vector \mathbf{N} en el tiempo para el AC elemental 150, notamos que $N_i(t)$ es el número de caminos (indicados por las líneas oscuras) que van del sitio i al tiempo t con los sitios dañados inicialmente. Este ejemplo es particularmente simple ya que las tres primeras derivadas parciales son siempre 1 y las segundas y terceras derivadas parciales son siempre 0 (la regla 150 es aditiva). Lo que es interesante, es que la norma de \mathbf{N} puede crecer exponencialmente.

Definimos el exponente de Lyapunov máximo (ELM) λ para ACs como

$$\begin{aligned}\lambda &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \ln \left[\frac{|N(T)|}{|N(0)|} \right] \\ &= \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \sum_{t=1}^T \ln \left[\frac{|N(t)|}{|N(t-1)|} \right]\end{aligned}\quad (1.14)$$

donde

$$|N| = \sum_i N_i. \quad (1.15)$$

Vemos de la fig. 1.8 que para el AC elemental 150 $|N(t)| = 3^t$ por lo que $\lambda = \ln(3)$. Para el mapeo (1.13) hay otros $L - 1$ exponentes que forman el llamado espectro de Lyapunov. En orden decreciente la suma de los primeros dos representa la tasa de crecimiento exponencial de un elemento de área, la suma de los primeros tres, la tasa de crecimiento de un elemento de volumen, etc.[42]

Un defecto en un sitio i al tiempo t puede extenderse al tiempo $t + 1$ si al menos una de las primeras derivadas booleanas parciales es distinta de 0. Se ocurre entonces que puede haber alguna relación con un tipo de percolación dirigida de enlaces en donde un sitio i mojado al tiempo t puede mojar a cada uno de sus 3 vecinos cercanos al tiempo $t + 1$ con probabilidad p . Sea $\mathbf{x}(t) = (x_0, \dots, x_{L-1})$ con $x_j(t) = 1$ ($x_j(t) = 0$) si el sitio está mojado (seco) al tiempo t entonces

$$\mathbf{x}(t+1) = \mathbf{M}_p(t)\mathbf{x}(t) \quad (1.16)$$

donde \mathbf{M}_p es una matriz aleatoria con componentes m_{ij} de la forma

$$m_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } |i-j| \leq 1 \text{ con probabilidad } p \\ 0 & \text{si } |i-j| \leq 1 \text{ con probabilidad } 1-p \\ 0 & \text{si } |i-j| > 1 \end{cases} \quad (1.17)$$

En la ec. (1.16) las operaciones son booleanas como en la ec. (1.12) dado que un sitio que se moja dos ó más veces sólo está mojado.

Sea $N(t) = (N_0, \dots, N_{L-1})$ donde $N_j(t)$ el número de maneras en que el sitio j puede estar mojado al tiempo t , ó lo que es lo mismo, el número de caminos que van de los sitios inicialmente mojados al sitio j al tiempo t . Dicho vector evoluciona en el tiempo de acuerdo a

$$N(t+1) = \mathbf{M}_p(t)N(t) \quad (1.18)$$

con multiplicación algebraica de un vector por una matriz. Al igual que antes, se puede definir un ELM por (1.14) y todo el espectro de Lyapunov. Por otra parte, es fácil ver que lo anterior también es válido cuando un sitio mojado puede mojarse a sí mismo y a cualquiera de sus r vecinos más cercanos a la izquierda y a la derecha.

Para $p < p_c$ con p_c la percolación crítica, la fracción de sitios mojados a tiempos largos es 0, mientras que es positiva para $p_c < p$. Los valores que se encontraron numericamente para la percolación crítica se muestran en la tabla siguiente en la cual el número entre paréntesis indica el error en la última cifra significativa.[32, 63] Una aproximación de tipo campo medio consiste en reemplazar la matriz M_p con una matriz constante cuyos elementos en las $2r + 1$ diagonales principales sean p . Entonces el exponente de Lyapunov máximo es $\lambda = \ln((2r + 1)p)$ que es positivo si $p > 1/(2r + 1)$. Las simulaciones numéricas están de acuerdo con este resultado si p no está cerca de p_c . Por ejemplo, para $r = 1$ el error es menor a 1% para $p > 0.5$.

r	p_c
1	0.441(1)
2	0.257(1)
3	0.179(1)

Para poder hacer la analogía entre el crecimiento de los defectos en ACs y la percolación dirigida discutida brevemente, interpretamos a la probabilidad p como la media geométrica para tiempos largos μ de la fracción de 1's en F^t . Es decir,

$$\mu = \lim_{T \rightarrow \infty} \left[\prod_{i=1}^T \frac{1}{(2r+1)L} \sum_{i=1}^L \sum_{k=-r}^r F'_{i,i+k}(t) \right]^{1/T} \quad (1.19)$$

En la subsección 1.5.2 mostramos los ELMs para los 88 ACEs mínimos y los ACTs de alcance $r = 2, 3$ así como para la percolación dirigida, ó lo que es lo mismo, para el producto de matrices aleatorias. Presentamos también los espectros de Lyapunov para ACEs elementales y para la percolación dirigida.

1.5.2 Resultados

La clasificación de Wolfram válida para ACTs puede extenderse a los 88 ACEs mínimos con algunas modificaciones. Los ACEs mínimos no son necesariamente simétricos, por lo que la *clase 2* debe extenderse para comprender

a aquellos ACs que caen en una órbita periódica admitiendo corrimientos a la derecha o a la izquierda. Aceptando esta extensión, en la fig. 1 del apéndice C mostramos los ELMs y los correspondientes valores de μ para los ACs elementales de *clase 3* y para el producto de matrices aleatorias tridiagonales M_p . En la fig. 2 del apéndice C mostramos las mismas cantidades para los ACs elementales mínimos con ELM no-negativo en presencia de una pequeña cantidad de ruido. Para ACs con $0 < \mu < p_c$, el valor del ELM depende del estado inicial. Esto sugiere la inestabilidad del estado asintótico ($\lambda > 0$) ó su inestabilidad marginal ($\lambda = 0$). Dada la naturaleza discreta del espacio de configuración B^L puede no haber estados "ceranos" que permitan el paso a un estado más estable por lo que la introducción de una pequeña cantidad de ruido puede proveer el camino a dicho estado. El ruido se introdujo intercambiando un número pequeño de pares de sitios s elegidos al azar en cada paso temporal. Notamos que los ACs de *clase 3* no se ven afectados por el ruido y que los valores encontrados están cerca de los encontrados para el producto de matrices aleatorias. El mismo comportamiento cualitativo se observa para ACTs de alcance $r = 2, 3$ como se muestra en las figs. 1.9 y 1.10.[63]

Podemos notar en las figs. 1 y 2 del apéndice C que todos los ACEs de *clase 3* tienen un ELM positivo pero también algunos ACs de *clase 2* como por ejemplo la regla 57. Esto significa que $\lambda > 0$ es una condición necesaria pero no suficiente para que un AC pertenezca a la *clase 3*. Pero, la regla 57, y las otras que poseen un ELM positivo son reglas complejas que no caen simplemente en la *clase 2* pues pueden mostrar transientes largos, zonas de caos limitado por barreras, ó atractores periódicos (salvo por corrimientos) de período grande. Tal vez la clasificación de Wolfram no sea adecuada para los 88 ACEs mínimos.

Para autómatas celulares totalísticos booleanos de alcance $r = 2$ y $r = 3$ los resultados numéricos son similares como mostramos en las figs. 1.9 y 1.10.[63]

Otro aspecto interesante de los ACs es su espectro de Lyapunov que mostramos en las figs. que siguen. En la fig. 1.11 mostramos el espectro de Lyapunov del producto de matrices aleatorias tridiagonales para diferentes valores de p donde $\lambda(i), i = 0, \dots, L-1$ se muestran en orden decreciente. Las porciones verticales de las curvas indican el valor de $i/(L-1)$ donde el espectro de Lyapunov va a $-\infty$.

En las figs. 1.12 y 1.13 aparecen los espectros de Lyapunov de los ACs elementales de *clase 3* y en la fig. 1.14 aparecen los espectros de Lyapunov de algunos ACs elementales que no son de *clase 3* y tienen un ELM positivo y

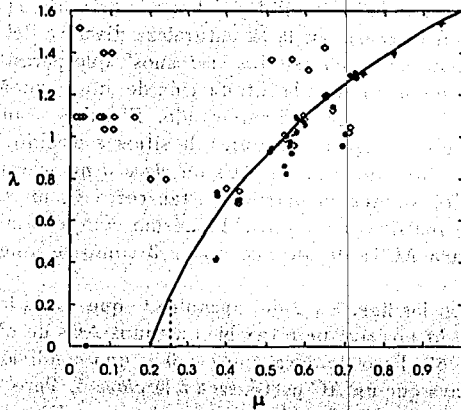


Figura 1.9: La curva muestra λ como función de μ para la percolación dirigida de alcance $\tau = 2$ en la aproximación de campo medio. El valor crítico $\mu_c = 0.257$ se reporta en la línea punteada. Los diamantes muestran los valores de λ y μ para los ACTs de alcance $\tau = 2$, en ausencia de ruido y los círculos con un pequeño ruido. Los resultados se obtuvieron con $L = 512$ y $T = 500$.

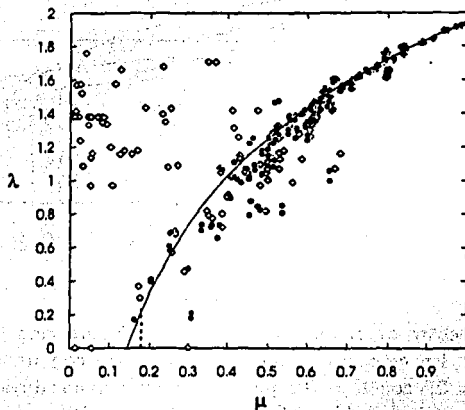


Figura 1.10: Presentamos resultados similares a los de la fig. anterior para ACTs con $r = 3$. En este caso $p_c = 0.179$.

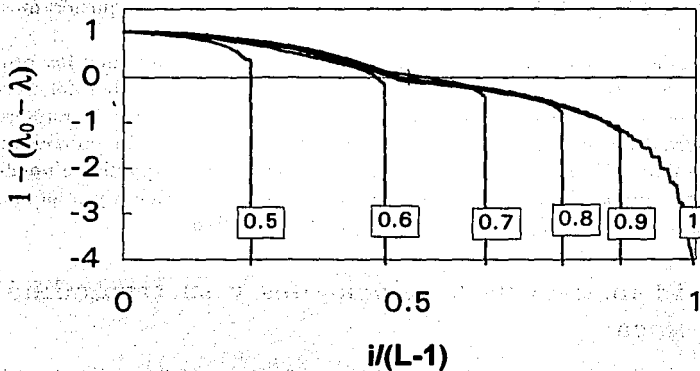


Figura 1.11: Espectros de Lyapunov para el producto de 1,000 matrices aleatorias tridiagonales con $L = 256$.

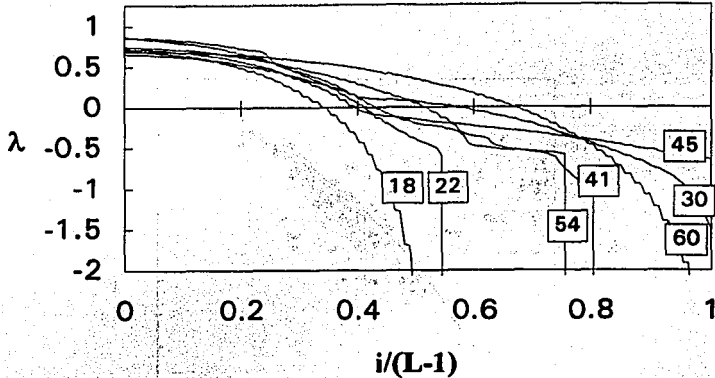


Figura 1.12: Espectro de Lyapunov para los ACEs de clase 3 18, 22, 30, 41, 45, 54 y 60. En estos experimentos se empezó con un estado inicial aleatorio con $\rho_0 = 0.5$ con $L = 512$ que se dejó evolucionar durante 500 pasos temporales. La matriz Jacobiana F' se evaluó en los 128 sitios centrales de la red.

$\mu > p_c$. Notamos que estos últimos espectros se ven más irregulares que los de las figuras precedentes que a su vez semejan los del producto de matrices aleatorias aún cuando la diferencia no es tan contundente como quisiéramos.

Por analogía con los sistemas dinámicos continuos estudiamos las propiedades de expansión del mapeo (1.13) que describe la posibilidad del crecimiento de los defectos dado que las componentes de N cuentan el número de maneras en que los defectos iniciales pueden afectar a un sitio dado en un instante dado. Vimos que en el caso en que dicho mapeo expande se puede hacer una comparación con un problema de percolación dirigida y podemos concluir que los ACs de clase 3 poseen un ELM positivo.

1.6 El modelo de 9 velocidades y su termodinámica

En la sección 1.7 estudiamos la auto difusión de un gas bidimensional modelado por el modelo de 9 velocidades en un modelo de medio poroso, por lo que en esta sección presentamos el modelo y discutimos brevemente su comportamiento termodinámico.

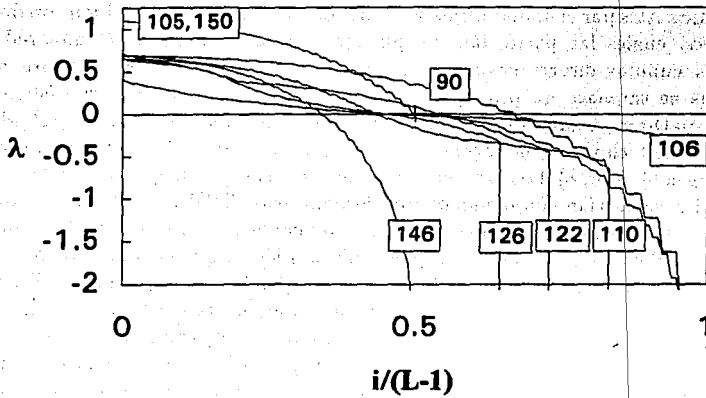


Figura 1.13: Espectro de Lyapunov para los ACEs de clase 3 90, 105, 106, 110, 122, 126, 146 y 150 bajo las mismas condiciones de la figura anterior.

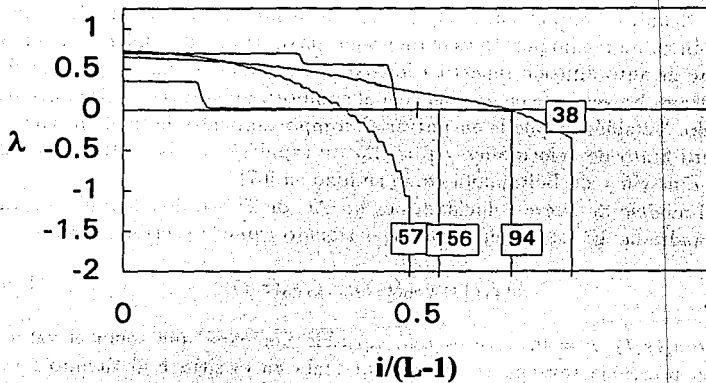


Figura 1.14: Espectro de Lyapunov para los ACEs de clase 2 38, 54, 57, 94 y 154 bajo las mismas condiciones de las figuras anteriores.

Los ACs para simular flujos son caricaturas del fluido a nivel microscópico en los cuales las partículas son puntuales y se mueven sobre una red en unas cuantas direcciones sincronicamente. Por construcción, en estos modelos se satisface un principio de exclusión que impone una estadística de Fermi-Dirac. Cuando dos ó más partículas coinciden en un sitio cualquiera de la red chocan conservando la masa, la cantidad de movimiento y la energía.[4, 5, 6, 8] Los primeros modelos consideraban que todas las partículas se movían con la misma rapidez (modelos HPP y FHP) por lo que la conservación de la energía es una consecuencia de la conservación de la masa. Los modelos con más de una rapidez [65, 55] hacen que la conservación de la energía sea independiente de la de la masa por lo que hay una distribución de velocidades y puede definirse de manera unívoca la temperatura. El principio de exclusión impone una cota superior al espectro de energía. Las consecuencias termodinámicas de esto son previsibles: el sistema no es normal en el sentido que la entropía no es una función no decreciente de la energía y por lo tanto la temperatura puede ser infinita y negativa. Esto ocurre también en los sistemas de spines.[66] Sin embargo, hay autores que no reconocen esto y suponen que el modelo se comporta como un gas ideal clásico.[55] Por ello, decidimos estudiar la termodinámica de equilibrio del modelo de nueve velocidades que es el modelo más sencillo en el cual se puede definir la temperatura.[33] El objetivo principal del estudio de la auto difusión en un medio poroso es el de poder encontrar la dependencia del coeficiente de auto difusión respecto a los parámetros termodinámicos y por ello discutimos brevemente en esta sección el comportamiento termodinámico del modelo. También se puede encontrar el comportamiento de modelos con un número finito de velocidades y por ello de rapidezces en las estadísticas de Bose-Einstein y de Boltzmann como se hizo en.[67]

El modelo de nueve velocidades es un AC de 2^9 estados definido en una red cuadrada. El estado en el sitio \mathbf{r} al tiempo t puede escribirse como

$$s(\mathbf{r}, t) = (s_0(\mathbf{r}, t), \dots, s_8(\mathbf{r}, t)) \quad (1.20)$$

donde $s_k(\mathbf{r}, t)$, $k = 0, \dots, 8$ es una variable booleana que toma el valor 1 (0) en presencia (ausencia) de una partícula en el sitio \mathbf{r} al tiempo t con velocidad \mathbf{v}_k . Los vectores \mathbf{v}_k aparecen en la fig. 1.15. La dirección 0 es el reposo; las partículas que se mueven en las direcciones de los ejes lo hacen con rapidez 1 y energía 1/2, las que se mueven en las direcciones diagonales lo hacen con rapidez $\sqrt{2}$ y energía 1 (la masa, la separación de la red y el paso temporal son 1).

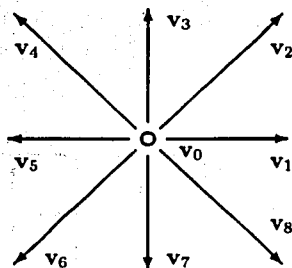


Figura 1.15: Las 9 velocidades del modelo de 9 velocidades.

La evolución temporal está dada por una regla local que actúa en paralelo en todos los sitios de la red y simula la traslación T y colisión C de acuerdo a

$$s(\mathbf{r}, t + 1) = TC(\{s(\mathbf{r}', t)\}_{\mathbf{r}' \in V_{\mathbf{r}}}). \quad (1.21)$$

donde $V_{\mathbf{r}}$ es una vecindad de Moore de \mathbf{r} que contiene al sitio mismo y a sus primeros y segundos vecinos más cercanos. En la fig. 1.16 mostramos una configuración de una red pequeña. En la colisión el estado en cada sitio cambia a otro con el mismo número de partículas, la misma cantidad de movimiento y la misma energía. En caso de que haya más de un estado que satisface estas tres constricciones, se escoge uno al azar. En la traslación, cada partícula se mueve al sitio al cual está apuntando. Se puede encontrar una ecuación de evolución microscópica explícita como una ecuación de balance en la que se enumeren todos aquellos estados en los cuales se gana una partícula en la dirección i y todos aquellos en los cuales se pierde, $i = 0, \dots, 8$. [55, 68] A partir de ésta, se puede obtener la ecuación de transporte de Boltzmann introduciendo promedios sobre un conjunto representativo y la hipótesis de caos molecular.

En equilibrio, sea $n = N/L$ el número de ocupación medio con N el número total de partículas y L el número de sitios de la red, $e = E/L$ la densidad de energía con E la energía total y $n_k = N_k/L$ el número de ocupación medio en la dirección k con N_k el número medio de partículas

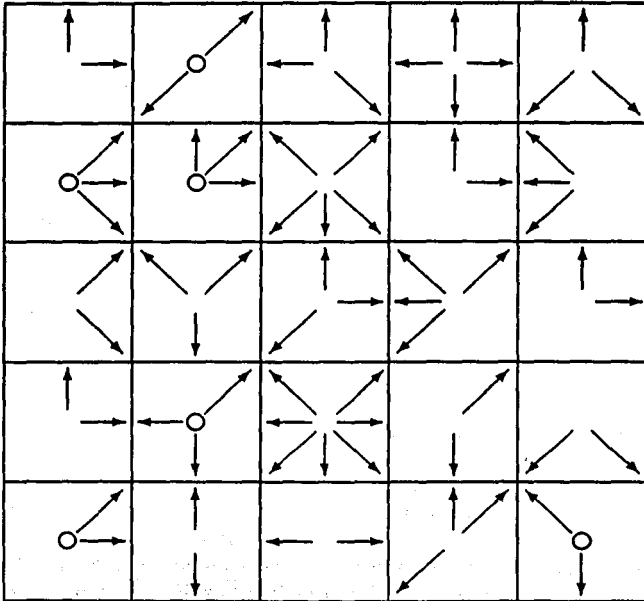


Figura 1.16: Ejemplo de una configuración del modelo de 9 velocidades.

en la dirección k , $k = 0, \dots, 8$. Se debe cumplir que $N_1 = N_3 = N_5 = N_7$ y $N_2 = N_4 = N_6 = N_8$ por lo que la conservación de la masa y la energía pueden escribirse como

$$n = \sum_{k=0}^8 n_k = n_0 + 4n_1 + 4n_2 \quad (1.22)$$

$$e = \sum_{k=0}^8 e_k n_k = 2n_1 + 4n_2 \quad (1.23)$$

con e_k la energía cinética de una partícula que se mueve en la dirección k con los valores $e_0 = 0$, $e_k = 1/2$ para $k = 1, 3, 5, 7$ y $e_k = 1$ para $k = 2, 4, 6, 8$.

Para un valor de n fijo existen cotas inferior y superior a e que llamamos la energía de Fermi e_F y la energía máxima e_M respectivamente dadas por

$$e_F = \begin{cases} 0 & 0 \leq n \leq 1 \\ \frac{n-1}{2} & 1 \leq n \leq 5, \\ n-3 & 5 \leq n \leq 9 \end{cases} \quad (1.24)$$

$$e_M = \begin{cases} n & 0 \leq n \leq 4 \\ \frac{n+4}{2} & 4 \leq n \leq 8. \\ 6 & 8 \leq n \leq 9 \end{cases} \quad (1.25)$$

Por ejemplo, si $n = 3$, $e_F = 1$ con una partícula en reposo y las otras dos en las direcciones de los ejes, mientras que $e_M = 3$ con las tres partículas en las direcciones diagonales.

La densidad de entropía s para un sistema de fermiones está dada por

$$s = - \sum_k [n_k \ln(n_k) + (1 - n_k) \ln(1 - n_k)] \quad (1.26)$$

Para n y e fijos, los números de ocupación medios \bar{n}_k pueden encontrarse maximizando a (1.26) sujeta a las constricciones (1.22) y (1.23). Esto puede hacerse numericamente y los valores encontrados concuerdan con los resultados experimentales.[33] Lo que es importante recalcar es que para una n fija, el sistema se encuentra en un estado ordenado tanto para $e = e_F$ como para $e = e_M$ por lo que la entropía no puede ser una función creciente de la densidad de energía.

Usando la ecuación de Euler encontramos las ecuaciones de estado para el inverso de la temperatura β , la presión P y el potencial químico μ :

$$\beta = 2 \ln \left[\left(\frac{\bar{n}_1}{1 - \bar{n}_1} \right) \left(\frac{\bar{n}_2}{1 - \bar{n}_2} \right) \right] \quad (1.27)$$

$$P\beta = - \sum_{k=0}^8 \ln(1 - \bar{n}_k) \quad (1.28)$$

$$\mu\beta = \ln \left[\left(\frac{\bar{n}_1}{1 - \bar{n}_1} \right)^2 \left(\frac{\bar{n}_2}{1 - \bar{n}_2} \right) \right] \quad (1.29)$$

Para n fijo, la densidad de entropía s es creciente para $e \in (e_F, e^*)$, con e_F dado por la ec. (1.24), tiene un máximo en e^* y es decreciente para $e \in (e^*, e_M)$ con e_M dado por (1.25). El valor $e^* = \frac{2n}{3}$ corresponde al caso en que las 9 velocidades son igualmente probables. La temperatura se define como el inverso de la derivada de s respecto a e , por lo que es positiva para $e \in (e_F, e^*)$, infinita en e^* y negativa para $e \in (e^*, e_M)$. Por otra parte, las cantidades termodinámicas mencionadas anteriormente están expresadas en términos de los números de ocupación medios que pueden calcularse y también medirse fácilmente en el experimento. Además, es posible calcular las demás cantidades termodinámicas y comprobar que

$$n_k = [1 + \exp(\beta(\epsilon_k - \mu))]^{-1}. \quad (1.30)$$

Concluimos que el modelo de 9 velocidades se comporta en equilibrio como un gas ideal de Fermi pero no es normal dado que el espectro de energías está acotado por arriba. Además, esto es válido para cualquier modelo con varias velocidades y debe tomarse en cuenta al considerar situaciones fuera de equilibrio.

1.7 Auto difusión en el modelo de 9 velocidades

Los modelos de gases en redes pueden emplearse con éxito para estudiar el flujo a través de medios porosos pues las condiciones a la frontera son imposibles de implementar con métodos numéricos de solución de las ecuaciones de Navier Stokes y además la solución no debe depender de los detalles de dichas fronteras, sino de algún parámetro medio que defina de algún modo las características del medio.[58, 59, 61, 60] Por otra parte, la difusión es un fenómeno gobernado por las fluctuaciones alrededor del equilibrio, por lo que resulta interesante tratar de calcular el coeficiente de difusión como función de cantidades termodinámicas. en el vacío y en un medio poroso. En esta sección presentamos un resumen del trabajo que aparece en el apéndice D en el cual presentamos los primeros resultados de un proyecto que pretende lo mencionado.

Estudiamos el flujo del gas en redes de 9 velocidades a través de un modelo de medio poroso y medimos experimentalmente la dependencia del coeficiente de auto difusión respecto a la densidad de energía y el número de ocupación n . Los medios porosos (MP) representan un reto debido a su complejidad y lo primero que viene a la mente es que dicho medio debe percolar, en el sentido de que el fluido debe ser capaz de pasar de un lado a otro del medio. Sin embargo, no está claro si la naturaleza fractal del cúmulo infinito en el umbral de percolación tiene que ver con medios porosos reales.[69] Por otra parte, nuestro modelo está definido en 2 dimensiones por lo que lo primero que tenemos que hacer es encontrar un modelo de medio poroso adecuado.

En un modelo de medio poroso bidimensional los obstáculos deben ser lo suficientemente grandes para ser considerados macroscópicos pero pequeños para que tener un número grande de ellos en una red de tamaño razonable y los espacios vacíos deben ser lo suficientemente grandes para que las partículas que se muevan en ellos muestren un comportamiento hidrodinámico. El primer modelo que consideramos fue el de percolación de sitios a primeros y segundos vecinos más cercanos. Encontramos que en el cúmulo percolante con $p_c < p < 0.8$ la gran mayoría de los sitios pertenecen a la frontera por lo que las partículas del gas se pasarían más tiempo chocando con las fronteras que entre ellas (ver fig. 2 del apéndice D). Un sitio del cúmulo percolante está en la frontera si al menos uno de sus primeros ó segundos vecinos más cercanos pertenece a un obstáculo. Por esta razón este no es un modelo adecuado de medio poroso.

El modelo de medio poroso que consideramos consiste de una fracción $1 - p$ de obstáculos circulares de radio aleatorio entre un radio mínimo de 2 y un máximo r_{max} . Este es similar al modelo del queso suizo.[70, 71] Encontramos experimentalmente que el umbral de percolación p_c se encuentra entre 0.31 y 0.42 para distintos valores de r_{max} . Vemos que los puntos de la frontera no contribuyen de manera significativa a la masa total del cúmulo percolante por lo que el modelo parece ser adecuado para estudiar la auto difusión (ver fig. 3 del apéndice D). Además, por lo mencionado anteriormente, nuestros experimentos se llevaron a cabo lejos del umbral de percolación con el objeto de simplificar el análisis.

El interés inicial fue el de realizar experimentos en los que se pudiera medir el coeficiente de auto difusión. Para ello usamos una red de 200×200 sitios en los cuales una fracción $1 - p$ de sitios está ocupada por obstáculos que son círculos de radio aleatorio mayor que 2 y menor que 10. Luego colocamos un gas de 9 velocidades con valores fijos de ϵ y n en una situación

de equilibrio. Esto se puede lograr dado que conocemos la distribución de equilibrio dadas por las \bar{n}_k como mencionamos en la sección 1.6 y para asegurar que estamos en el estado de equilibrio, lo dejamos relajar durante unos 200 pasos temporales. Luego tomamos un círculo de radio 10 en el centro del espacio libre (ó tan cercano al centro como lo permitan los obstáculos) y marcamos un número pequeño de partículas (~ 200) dentro de él y dejamos que el gas evolucione. En el caso en que una partícula marcada participe en una colisión se asigna el estado de salida como mencionamos en la sección 1.6 y se marca al azar una de las partículas del estado de salida. Cuando las partículas chocan contra los obstáculos invierten su velocidad. El coeficiente de auto difusión D se calcula a partir de la relación

$$\langle r^2(t) \rangle = 4Dt \quad (1.31)$$

donde t es el tiempo y $\langle \cdot \rangle$ es una media sobre el conjunto representativo que en nuestro caso correspondió a una media sobre 20 repeticiones del experimento y sobre todas las partículas marcadas. El valor de D se obtuvo de ajustar una recta a los valores experimentales de $\langle r^2(t) \rangle$ con $100 < t < t_{max}$ escogiendo t_{max} de manera que las partículas no llegaran a los extremos de la red. Dado que las partículas son indistinguibles, suponemos que todas las marcadas parten del centro del círculo en el cual se encuentran inicialmente. Por otra parte, si estamos lejos del umbral de percolación es correcto pensar que la difusión es normal y puede describirse por (1.31).

Los resultados experimentales se encuentran reportados en las figs. 4,5 y 6 del apéndice D. Para e fija encontramos que para valores grandes de p (pocos obstáculos) D disminuye con n , pero para valores de p pequeños (pero lejos de p_c) este comportamiento se invierte. Para n y p pequeños las partículas marcadas quedan atrapadas por los obstáculos y difunden lentamente, pero al aumentar n la probabilidad de colisión aumenta y por lo tanto las partículas marcadas difunden rápidamente. Es posible que exista un valor de p para el cual D no dependa de n .

Por otra parte, tomando n fijo encontramos D para e con $e_F \leq e \leq e_M$ y distintos valores de p . Conocidos n y e podemos conocer cualquier cantidad termodinámica dado que el sistema se encuentra en equilibrio de acuerdo a lo que encontramos en la sección 1.6. Es entonces posible conocer la dependencia de D respecto a cualquiera de estas cantidades como puede ser la temperatura.

En conclusión, mostramos como se puede modelar un medio poroso en dos dimensiones y medir el coeficiente de difusión D . Debe ser posible encontrar una expresión teórica para D al menos en el caso en que $p = 1$

y luego extrapolar dicha solución a valores más pequeños de p invocando algún argumento de campo medio. Para ello se podría extender la teoría de Green-Kubo para el cálculo de los coeficientes de transporte al modelo que hemos considerado.[72, 68]

1.8 Conclusiones

Como ya hemos mencionado anteriormente, los ACs son interesantes por ser sistemas sencillos que muestran un comportamiento complejo y por ello pueden ser utilizados para modelar sistemas físicos, biológicos ó químicos. Respecto al primer aspecto, estudiamos el Juego de la Vida como prototipo de AC que muestra un comportamiento sumamente complejo y también logramos definir exponentes de Lyapunov para ACs. Respecto al segundo aspecto logramos modelar el flujo de un gas en un medio poroso bidimensional.

Para estudiar el Juego de la Vida fue necesario desarrollar un algoritmo rápido para reducir la forma canónica disyuntiva de ACs totalísticos y totalísticos externos. Usando este algoritmo y la técnica de multibit se pudieron hacer experimentos que pusieron de manifiesto el comportamiento complejo del Juego. Más adelante encontramos que la expansión en serie de Maclaurin resulta ser una forma más eficiente de reducir el número de operaciones booleanas del AC que no está limitada a ACs totalísticos. Usamos estas expansiones, y también expansiones en series de Taylor en el estudio de los exponentes de Lyapunov para ACs. El usar la serie de Taylor tiene la ventaja extra de que al estudiar la propagación del daño no es necesario seguir la evolución de dos configuraciones inicialmente cercanas como es evidente de la ec. (1.11). El laboratorio para estudiar los ACs es la computadora, los dispositivos experimentales son los algoritmos y programas.

El estudio de los exponentes de Lyapunov para ACs fue motivado por nuestra insatisfacción con los usos en la literatura de tasas de expansión lineales. A diferencia del Juego de la Vida, nuestro interés fue el de poder estudiar todos los ACs. Mostramos en el camino, una relación interesante entre estos y la percolación dirigida ó lo que es lo mismo el producto de matrices aleatorias de un cierto tipo. Podemos concluir que si un AC pertenece a la *clase 3*, entonces posee un exponente de Lyapunov positivo y un espectro de Lyapunov con una parte positiva y otra negativa como mostramos en las figs. 1.12 y 1.13. Lo que no podemos mostrar es la proposición conversa que es mucho más interesante. Entonces, los exponentes de Lyapunov son una

cantidad más como lo son la densidad a tiempos largos ó la entropía de bloques. La positividad del exponente de Lyapunov es una condición necesaria pero no suficiente para que el sistema pertenezca a la *clase 3*. Una posible línea de investigación sería la de buscar las condiciones necesarias en ACs lo cual tal vez sea posible usando las derivadas booleanas.

Buscando una manera diferente de medir exponentes de Lyapunov empezamos a explorar la sincronización de ACs.[73] No logramos encontrar dichos exponentes, pero si una relación interesante entre autómatas celulares probabilísticos y criticalidad auto organizada. Sabemos que si dos sistemas dinámicos caóticos continuos se mezclan de la forma

$$\begin{aligned}z(t+1) &= f(z) \\x(t+1) &= (1-\epsilon)f(x) + \epsilon f(z)\end{aligned}$$

con $0 \leq \epsilon \leq 1$ existe un valor ϵ_c abajo del cual $h_{xx} = |x-z|$ es distinta de cero y arriba es cero. También se sabe que se puede conocer el exponente de Lyapunov de f a partir de ϵ_c . Lo que observamos cuando f es el mapeo logístico es una aparente transición de fase de segundo orden para h_{xx} . Como una alternativa a medir el exponente de Lyapunov como lo hicimos en este trabajo, intentamos hacerlo a partir de la medición de ϵ_c cuando mezclamos dos ACs en analogía con la ec. (1.32). Hay que hacer la mezcla con cuidado para que el resultado siga siendo un AC y la manera de hacerlo no es única. Nosotros encontramos que la mezcla es un AC probabilístico; con probabilidad $1-\epsilon$ el valor en un sitio dado i está dado por $f(x_{i-1}, x_i, x_{i+1})$ y con probabilidad ϵ por $f(z_{i-1}, z_i, z_{i+1})$. Encontramos también que podemos mapear dicho AC probabilístico en un modelo abstracto de criticalidad auto organizada con lo cual mostramos que la sincronización es en efecto una transición de fase. Lo que resulta sumamente interesante es que el mapeo que nos lleva de un AC probabilístico a un modelo de criticalidad auto organizada es completamente general y puede aplicarse por ejemplo al modelo Domany-Kinzel de percolación dirigida o al modelo de Ising con cualquier dinámica.[74]

En el estudio de la difusión en medios porosos, mostramos la dependencia experimental del coeficiente de difusión respecto de la energía interna y de la temperatura. El paso siguiente es el de tratar de dar una explicación teórica de los resultados obtenidos. Hasta ahora, los intentos han fracasado pues la ecuación de transporte para la mezcla de partículas coloreadas en el modelo de 9 velocidades es muy complicada. Por ello, empezamos con un gas HPP en el cual las partículas se mueven en una red en las direcciones de los ejes y la única colisión interesante es cuando dos partículas chocan

de frente. Entonces la ecuación de transporte de la mezcla contiene unos 8 términos. Como la difusión es un fenómeno que depende de las fluctuaciones alrededor del equilibrio, expandemos en las fluctuaciones de las partículas que difunden y se obtiene una ecuación de transporte linealizada. Podemos demostrar que, en la aproximación de Boltzmann, el coeficiente de difusión está dado por una expresión de Green-Kubo y depende de los eigenvalores y eigenvectores de la matriz de la ecuación de transporte linealizada. El resultado obtenido está de acuerdo con los experimentos que hemos llevado a cabo con el modelo HPP. El paso siguiente consiste en repetir el cálculo para el modelo de 9 velocidades que tiene una ecuación de transporte con muchos más términos.

The first part of the report is a general introduction to the subject of the study. It is followed by a description of the methods used in the study. The results of the study are then presented in a series of tables and figures. The final part of the report is a discussion of the results and a conclusion.

Referencias

- [1] S. Wolfram ed. *Theory and Applications of Cellular Automata*, World Scientific, 1986.
- [2] H. Gutowitz ed., *Cellular Automata: Theory and Experiment*, North Holland, 1990.
- [3] P. Manneville, N. Bocčara, G.Y. Vichniac, R. Bidaux eds., *Cellular Automata Modelling of Complex Physical Systems*, Springer, 1989.
- [4] H.Hardy, Y. Pomeau, O. de Pazzis, *J. Math. Phys.* **14** (1973) 1736, H.Hardy, Y. Pomeau, O. de Pazzis, *Phys. Rev. A* **13** (1976) 1949.
- [5] U. Frisch, B. Hasslacher, Y. Pomeau, Lattice Gas Automata for the Navier Stokes Equation, *Phys. Rev. Lett.* **56** (1986) 1505.
- [6] U. Frisch, D. d'Humières, B. Hasslacher, P. Lallemand, Y. Pomeau, J. P. Rivet, *Complex Systems*, **1** (1987) 649.
- [7] S. Wolfram, Cellular Automata Fluids 1: Basic Theory, *J. Stat. Phys.* **45** (1986) 471.
- [8] G. D. Doolen editor, *Lattice Gas Methods, Theory, Applications and Hardware*, MIT Press, 1989.
- [9] R.Kapral, Discrete Models for Chemically Reacting Species, *J. Math. Chem.* **6** (1991) 113; R. Kapral, A. Lawniczak, P. Maziar, Complex Dynamics in Reactive Lattice-gas Models, in M. López de Haro, C. Varea editors, *Lectures on Thermodynamics and Statistical Mechanics*, World Scientific, 1991.
- [10] Y. Pomeau, Invariant in cellular automata., *J. Phys.* **A17** (1984) L415.
- [11] H. J. Herrmann, *J. Stat. Phys.* **32** (1984) 271.
- [12] J. G. Zabolitzky, H. J. Herrmann, *J. Comp. Phys.* **76** (1988) 426.
- [13] E. Domany, Exact results for Two- and Three-dimensional Ising and Potts models, *Phys. Rev. Lett.* **52** (1984) 871.
- [14] N. Packard, Lattice Models for Solidification and Aggregation, in *Proceedings of the First International Symposium for Science on Form*, edited by Y. Katoh *et al.*, KTK Scientific Publisher, 1986.

- [15] X. P. Kong, E. G. D. Cohen, Diffusion and Propagation in a Triangular Lorentz lattice gas, *J. Stat. Phys.* **62** (1991) 737.
- [16] X. P. Kong, E. G. D. Cohen, A Kinetic Theorist's Look at Lattice Gas Cellular Automata, *Physica D* **47** (1991) 9.
- [17] E. G. D. Cohen, New Types of Diffusion in Lattice Gas Cellular Automata, in *Microscopic Simulations of Complex Hydrodynamic Phenomena*, M. Mareschal, B. L. Holian eds., Plenum Press, 1992.
- [18] R. M. Ziff, X. P. Kong, E. G. D. Cohen, A Lorentz Lattice Gas and Kinetic Walk Model, *Phys. Rev. A* **44** (1991) 2410.
- [19] R. Rechtman, A. Salcido, A. Calles, The Ehrenfest's Wind-Tree Model and the Hypothesis of Molecular Chaos, *Eur. J. Phys.* **12** (1991) 27.
- [20] J. Lomnitz-Adler, L. Knopoff, G. Martínez-Mekler, Avalanches and Epidemic Models of Fracturing in Earthquakes, *Phys. Rev. A* **45** (1992) 2211.
- [21] W. Kinzel, in *Percolation Structures and Processes*, G. Deutsch, R. Zallen and J. Adler editors, Hilger, Bristol, 1983.
- [22] W. Kinzel, Phase Transitions of Cellular Automata, *Z. Phys. B.* **58** (1985) 229.
- [23] P. E. Seiden, L. S. Schulman, Percolation Model of Galactic Structure, *Adv. Phys.* **39** (1990) 1.
- [24] J. von Neumann, *Theory of Self-Reproducing Automata*, University of Illinois Press, 1996 (editado y completado por A. W. Burks).
- [25] J. Signorini, Complex Computing with Cellular Automata, en P. Manneville, N. Boccara, G.Y. Vichniac, R. Bidaux (eds.), *Cellular Automata Modelling of Complex Physical Systems*, Springer, 1989.
- [26] E. Berlekamp, J. Conway, R. Guy, eds. *Winning Ways*, vol. 2, cap. 25, What is Life?, Academic Press N. York, 1982.
- [27] M. Gardner, *Wheels, Life and other Mathematical Amusements*, caps. 20-22, Freeman, San Francisco, 1983.

- [28] D. J. Buckingham, Some Facts of Life, Byte, Dic 1978 p. 54; W. Englander, Life, Byte, Dic. 1978, p. 76; J. K. Millen, One-Dimensional Life, Byte, Dic. 1978, p. 68; M. D. Niemec Life Algorithms, Byte, Ene. 1979, p. 90.
- [29] L S Schulman, P. E. Seiden, Statistical Mechanics of a Dynamical System based on Conway's Game of Life, J. Stat. Phys. **19** (1978) 293.
- [30] S. Wolfram, Statistical Mechanics of Cellular Automata, Rev. Mod. Phys. **55** (1983) 601.
- [31] F. Bagnoli, R. Rechtman, S. Ruffo, Some Facts of Life, Physica A **171** (1991) 249.
- [32] F. Bagnoli, R. Rechtman, S. Ruffo, Damage Spreading and Lyapunov Exponents in Cellular Automata, Phys. Lett. A **172** (1992) 34-38.
- [33] R. Rechtman, A. Salcido, Thermodynamic Entropy and Temperature of a Nine Velocities Lattice Gas, *Proceedings of the Euromech Colloquium 267, Discrete Models of Fluid Dynamics*, Figueira da Foz, Portugal, A. A. Alves editor, World Scientific Publications, 1991.
- [34] R. Rechtman, A. Salcido, Lattice Gas Self Diffusion in Random Porous Media, en A. Lawniczak, R. Kapral eds., *Pattern Formation and Lattice Gas Automata*, Fields Institute Communication Series, American Mathematical Society, en prensa.
- [35] F. Bagnoli, R. Rechtman, S. Ruffo, General Algorithm for Totalistic Cellular Automata, J. Comp. Phys. **101** (1992) 176-184.
- [36] R. Rechtman, Autómatas Celulares: Una Introducción, Ciencias, Revista de Difusión, No. 24, octubre de 1991, pp. 23-29.
- [37] S. Wolfram, Universality and Complexity in Cellular Automata, Physica **10D** (1984) 1.
- [38] W. Li, N. H. Packard, Complex Systems, **4** (1990) 281; K. Sutner, Physica D **45** (1990) 386; H. A. Gutowitz, *ibid.* **45** (1990) 136.
- [39] P.-M. Binder, J. Phys. A **24** (1991) L21.
- [40] C. G. Langton, Physica D **22** (1986) 120; *ibid.* **42** (1990) 12; W. Li, N. H. Packard, C. G. Langton, *ibid.* **45** (1990) 45; W. K. Wothers, C. G. Langton, *ibid.* **45** (1990) 95.

- [41] P.-M. Binder, Parametric Ordering of Complex Systems, preimpreso, 1994.
- [42] G. Benettin, L. Galgani, A. Giorgilli, J.-M. Strelcyn, Lyapunov Characteristic Exponents for Smooth Dynamical Systems and for Hamiltonian Systems, a Method for Computing all of Them, parte 1: Meccanica marzo 1980 9, parte 2: Meccanica marzo 1980 21.
- [43] A. J. Lichtenberg, M. A. Lieberman, *Regular and Stochastic Motion*, Springer, 1982.
- [44] G. Y. Vichniac, Boolean Derivatives on Cellular Automata, *Physica D* **45** (1990) 63.
- [45] F. Bagnoli, Boolean Derivatives and Computation of Cellular Automata, *Int. J. Mod. Phys. C* **3** (1992) 307.
- [46] A. S. Alves ed., *Discrete Models of Fluid Dynamics*, World Scientific, 1991.
- [47] A. Lawniczak, R. Kapral, *Lattice Gas Cellular Automata and pattern Formation*, NATO Advanced Series, en prensa.
- [48] F. Bagnoli, A. Francescato, A. Cellular Automata Machine, en P. Manneville, N. Boccara, G.Y. Vichniac, R. Bidaux eds., *Cellular Automata Modelling of Complex Physical Systems*, Springer, 1989.
- [49] T. Toffoli, N. Margolus, *Cellular Automata Machines*, MIT Press, Cambridge MA, 1989.
- [50] P. Bak, K. Chen, M. Creutz; *Nature* **342** (1989) 293; P. Bak, C. Tang, K. Wiesenfeld, *Phys. Rev. Lett.* **59** (1987) 381; *Phys. Rev.* **38** (1988) 364.
- [51] S. Wiggins, *Introduction to Applied Nonlinear Dynamical Systems and Chaos*, Springer, 1990.
- [52] R. L. Devaney, *An Introduction to Chaotic Dynamical Systems*, Benjamin, 1986.
- [53] P. Grassberger, Tabla 4 de la ref. [1].
- [54] P. Grassberger, *J. Stat. Phys.*, **45** (1986) 27.

- [55] S. Chen, M. Lee, K. Zhao, G. D. Doolen, *Physica* **37D** (1989) 42.
- [56] Chopard, M. Droz, *Phys. Lett. A* **126** (1988) 1476.
- [57] N. F. Ramsey, *Phys. Rev.* **103** (1956) 20.
- [58] D. H. Rothman, *Geophysics* **53** (1988) 509.
- [59] U. Brosa, D. Stauffer, *J. Stat. Phys.* **63** (1991) 405.
- [60] G. A. Kohring, *J. Stat. Phys.* **63** (1991) 411.
- [61] S. Chen, K. Diemer, G. D. Doolen, K. Eggert, C. Fu, S. Gutman, B. J. Travis, *Physica D* **47** (1991) 72.
- [62] D. Stauffer, A. Aharony, *Introduction to Percolation Theory*, Taylor and Francis, Londres, 1990. A. Bunde, S. Havlin, *Percolation I*, en A. Bunde, S. Havlin, eds. *Fractals and Disordered Systems*, Springer-Verlag, Berlin, 1991.
- [63] F. Bagnoli, R. Rechtman, S. Ruffo, Maximal Lyapunov Exponent for 1D Cellular Automata, en N. Boccara, E. Goles, S. Martínez, P. Picco (eds.), *Cellular Automata and Cooperative Systems*, Proceedings of the NATO Advanced Study Institute on Cellular Automata and Cooperative Systems, Les Houches, Francia, 22 de junio a 2 de julio de 1992, Kluwer Academic Publishers, 1993.
- [64] F. Bagnoli, R. Rechtman, S. Ruffo, Lyapunov Exponents for Cellular Automata, en M. López de Haro, C. Varea (eds.), *Lectures on Thermodynamics and Statistical Mechanics*, Proc. XXII Winter Meeting on Statistical Physics, 10 al 13 de enero de 1993, Cuernavaca Mor., World Scientific, 1994.
- [65] D. d'Humières, P. Lallemand, U. Frisch, *Europhys. Lett.* **2** (1986) 291; D. d'Humières, P. Lallemand, *Physica Acta* **59** (1986), 1231.
- [66] N. F. Ramsey, *Phys. Rev.* **103** (1956) 20.
- [67] F. Bagnoli, R. Rechtman, D. Zanette, Termodinámica de Modelos de Gases en Redes con velocidades Discretas, *Rev. Mex. Fís.* **39** (1993) 763.
- [68] S. P. das, M. H. Ernst, *Physica A*, **187** 191.

- [69] E. Guyon, C. D. Mitescu, J-P. Hulin, S. Roux, *Physica D* **38**, (1989) 172.
- [70] D. Stauffer *Introduction to Percolation Theory*, Taylor & Francis, London, 1985.
- [71] A. Bunde, S. Havlin, *Percolation I*, in A. Bunde, S. Havlin (eds.), *Fractals and Disordered Systems*, Springer-Verlag, Berlin, 1991.
- [72] M. H. Ernst, S. P. Das, Thermal Cellular Automata Fluids, *J. Stat. Phys.* **66** (1992) 465.
- [73] F. Bagnoli, R. Rechtman, Chaos and Synchronization in Cellular Automata, en A. Bellacicco, G. Koch, A. Vulpiani eds., *Forecasting and Modelling for Chaotic and Stochastic Systems*, Collana Scientifica, FrancoAngeli, Milán, Italia, 1995.
- [74] E. Domany, W. Kinzel, *Phys. Rev. Lett.* **53** (1984) 311. W. Kinzel, *Z. Phys.*, **B 58** (1985) 229.

Apéndice A

Un Algoritmo General para ACs

A.1 Técnica de multibit

Como mencionamos en la sección 1.3 un AC Booleano queda definido por su tabla de verdad. A partir de ésta se puede construir una expresión lógica que lo represente ya sea con la forma canónica disyuntiva ó con la forma canónica conjuntiva. Estas están construidas con la negación (\neg), la conjunción (\wedge) y la disyunción (\vee). Cualquiera de las dos formas canónicas es el punto de partida de la reducción que discutimos en el trabajo que presentamos en este apéndice y que logramos con el uso extensivo de la disyunción exclusiva (\oplus).

La técnica de multibit (también conocida como de multispin ó de multitisio) se basa en que las operaciones lógicas son operaciones de bajo nivel en los lenguajes de computación y en que se llevan a cabo bit a bit. En el programa de un AC unidimensional la configuración x es un arreglo en el lenguaje C de la forma

```
unsigned x[L];
```

donde L es el número de sitios de la red y `unsigned` son enteros positivos, es decir palabras de NB bits con $NB=16, 32$ ó 64 dependiendo de la computadora. Como consideramos ACs Booleanos, $x[i]$ es 0 ó 1 y si por ejemplo efectuamos la disyunción exclusiva \wedge entre las variables de estado de tres sitios consecutivos (AC elemental 150 ó regla de suma módulo 2)

```
x[i-1] ^ x[i] ^ x[i+1];
```

la computadora implementa la operación bit a bit entre los NB bits de los tres argumentos. Esto significa que con el mismo esfuerzo computacional, se pueden hacer operaciones lógicas si los NB de x están llenos. Esta es la esencia de la técnica de multibit.

Tomamos a L como un múltiplo entero de NB y ahora una configuración del AC se guarda en el arreglo

```
unsigned x[NW];
```

donde $L=NW*NB$. Una manera de acomodar la configuración del AC se muestra en la fig. A.1 donde por simplicidad pusimos $NB=4$ y $NW=5$. Para $0 < k < NW-1$, $x[k-1]$ contiene a los vecinos cercanos del lado izquierdo de $x[k]$ y $x[k+1]$ a los vecinos cercanos del lado derecho. Ahora la operación

```
x[k-1] ^ x[k] ^ x[k+1];
```

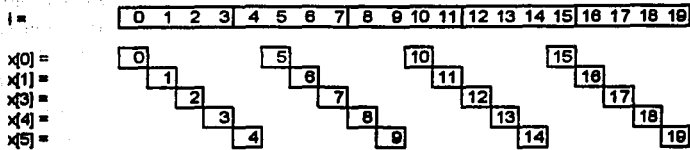


Figura A.1: El primer renglón muestra los sitios de la red, los cinco siguientes muestran como se construyen las palabras.

actualiza NB sitios. Es fácil ver que la palabra que contiene los sitios a la izquierda de $x[0]$ es un *shift* circular de un bit a la derecha de $x[NB-1]$ y que la palabra que contiene a los sitios a la derecha de $x[NB-1]$ es un *shift* circular a la izquierda de un bit de $x[0]$. Las operaciones de *shift* circular se pueden definir fácilmente, por lo que con la técnica de multispin logramos reducir el uso de memoria en un factor de NB y aumentar la velocidad de cómputo en un factor cercano a NB .

General Algorithm for Two-Dimensional Totalistic Cellular Automata

FRANCO BAGNOLI

*Dipartimento di Matematica Applicata, Università di Firenze, Firenze, Italy, and
INFN and INFM, Sezione di Firenze, Firenze, Italy*

RAÚL RECHTMAN

Departamento de Física, Facultad de Ciencias, UNAM, Apdo. Postal 70-542, 04510 México D.F., México

AND

STEFANO RUFFO

*Dipartimento di Energetica, Università di Firenze, Firenze, Italy, and
INFN and INFM, Sezione di Firenze, Firenze, Italy*

Received February 16, 1990; revised March 28, 1991

Multi-site coding techniques allow fast simulations of cellular automata that are economical in the use of memory. In these techniques the transition rule must be expressed using only bitwise operations. We present an algorithm for the simulation of generic totalistic and outer totalistic cellular automata which uses a multi-site coding technique. The algorithm is based on the careful use of (a) improvements over the canonical forms by using the exclusive-or operation, (b) optimal storage of the configuration in the computer memory, and (c) appropriate construction of stochastic rules. Items (b) and (c) of the method can be also applied to non-totalistic automata in any dimension. © 1992 Academic Press, Inc.

1. INTRODUCTION

The study of cellular automata behavior, both of deterministic and probabilistic ones, is a subject of great interest nowadays [1]. Cellular automata are dynamical systems in which time, space, and dynamical variables are discrete. The space is a (regular) lattice, and each site (cell) takes a value in a discrete set. In this paper we restrict this set to $\{0, 1\}$, i.e., we consider only Boolean cellular automata. All the cells in the system evolve synchronously according to an uniform short-ranged law. The law gives the future state of a cell according to the present state of the cells belonging to a certain neighborhood. In a square lattice a widely used neighborhood is formed by the cell itself, the four nearest-neighbor ones, and the four next-to-nearest ones. This is often called the Moore neighborhood. It can also be divided into an outer neighborhood, formed by the eight cells surrounding the central one, and the cell itself.

Among the various automata, totalistic ones seem to represent a subset of limited extension (in two dimensions and with a Moore neighborhood there are 512 different totalistic rules with respect to 2^{212} general rules) that retains the complexity of the whole set [2]. The transition rule for totalistic cellular automata depends only on the sum of the cell values in the neighborhood. The class of totalistic rules is equivalent to that of the rules symmetric in all the arguments [3]. The transition rule for outer totalistic cellular automata depends separately on the value of the cell itself and on the sum of those in the neighborhood. Examples of such rules are Conway's Game of Life [4], biased majority rules that simulate interface motions [5], solidifications and aggregations models [6], and Ising dynamics [7, 8, 10].

In studying the statistical properties of these automata, long simulations of large arrays are often needed, requiring both powerful computers and big memory storage. The Multi-Site Coding technique (MSC) allows a gain in memory requirements and in execution speed [9, 10]. The main idea of MSC is to pack several variables into a single memory word of the computer (a word can hold from 16 to 64 bits, depending on the machine) and to elaborate their future value as a whole. In such a way a certain degree of parallelism can be achieved even on a serial computer. The drawback of this technique is how to implement a generic transition rule.

Storing a cell value into a single word allows its easy manipulation and the description of the rule with high-level language, such as: *if the sum of the neighbors is three, then...*

Alternatively the cells values can be combined and used as an address in a precompiled look-up table. On the other hand MSC is fully exploited if the transition rule is expressed by means of operations acting over the packed variables as a whole. This can be achieved using the bitwise operations *NOT*, *AND*, *OR*, and eXclusive *OR* (*XOR*). The starting point is the canonical disjunctive form built directly from the truth table [11]. The canonical form for totalistic cellular automata contains a great number of operations. The reduction of this form to a minimal one (in the sense of the number of operations required) is not an easy task. In fact the problem of finding the minimal form is believed to be a NP one [12].

In this paper we discuss several aspects related to the simulation of cellular automata using the MSC technique. In Section 2 we present an algorithm that allows us to construct a generic two-dimensional totalistic and outer totalistic Boolean cellular automaton rule. The Boolean expressions obtained in this way improve significantly the canonical form. In Section 3 we discuss the problem of optimal storage of the configuration in the computer memory. The technique there exposed can be also applied to non-totalistic and non-Boolean cellular automata in any dimension. Section 4 briefly discusses the extension of the method to probabilistic rules; once more the results can be applied to the simulation of a generic stochastic cellular automaton. The subsequent section presents benchmarks among various implementations of the code and one application to the Game of Life. Section 6 presents some applications of these methods to physics, and the final section contains some conclusions.

2. THE ALGORITHM

In the following $x_{j,i}$ indicates the spin (cell value) at the site located at row j and column i in a square 2D lattice. Spins can take the values 0 and 1, so each site variable can be stored in a bit. Memory words are indicated with uppercase letters, as W , and arrays of words by $W_{j,k}$. All the array indices start from 0. The bits in a word are indicated with lowercase letters, thus

$$W = |w_{Nb-1}, \dots, w_1, w_0|,$$

where Nb is the number of bits in a word (16, 32, or 64). Note that the order of the bits in a word is that required to read them as a number in base 2 in the standard left to right way.

The number of required words to store a row of the configuration is denoted by Nw and the number of sites in a row by Ns . Then

$$Ns = Nb \cdot Nw;$$

the number of rows required is indicated by Nr .

Given a site and its Moore neighborhood, the spin of the center is usually denoted by c and the spins of the neighbors by $nw, n, ne, w, e, sw, s, se$. The notation recalls north, west, east, and south directions. In the previous notation c is $x_{j,i}$, nw is $x_{j-1, i-1}$, etc. Following Vichniac's notation [7], we write

$$\begin{aligned} h &= nw + n + ne + w + e + sw + s + se \\ m &= h + c. \end{aligned} \quad (1)$$

Any totalistic evolution rule can be written as

$$c'(m) = \sum_{k=0}^m r_k \cdot m_k \quad (2)$$

and any outer totalistic rule as

$$c'(h, c) = \sum_{k=0}^h h_k \cdot [c \cdot r_{k,1} + (1-c) \cdot r_{k,0}]. \quad (3)$$

In these expressions c' is the updated value of the central site, m_k is 1 if $m=k$ and 0 otherwise and similarly for h_k , with m and h given by (1). Thus only one term contributes in the sums of Eqs. (2) and (3). The quantities r_k and $r_{k,a}$ ($c=0, 1$) take the value 0 or 1 and define the automaton rule.

As mentioned earlier it is advantageous to use MSC. In order to perform operations on all the bits in a word at once we need to use only bitwise operations. In the following we use the upper bar for the bit by bit negation, and the \oplus , \wedge , and \vee symbols, respectively, for the bitwise *XOR*, *AND*, and *OR* operations. Let C denote a word that contains Nb spin variables. For the moment it is not important what the correspondence among the spins in C and the sites in the lattice is, as long as it is one-to-one. With the neighbors $nw, n, ne, w, e, sw, s, se$ of each site stored in C , the neighbors words $NW, N, NE, W, E, SW, S, SE$ can be constructed. Then, any totalistic rule may be written using MSC as

$$C' = \bigvee_{k=0}^m R_k \wedge M_k, \quad (4)$$

and any outer totalistic rule as

$$C' = \bigvee_{k=0}^h H_k \wedge [C \wedge R_{1,k} \vee \bar{C} \wedge R_{0,k}], \quad (5)$$

where R_k and $R_{k,a}$ are words whose bits are all equal to r_k and $r_{k,a}$, respectively. The words M_k and H_k contain in the i th bit ($i=0, \dots, Nb-1$) the values of m_k and h_k for the neighborhood of the i th site packed in the word C .

The problem is now reduced to that of constructing the quantities m_k and h_k using only Boolean operations out of the spins c of the central site and of the spins n_w, \dots, s_e of the neighbors. Then, as mentioned above, the same Boolean expression may be applied in a bitwise fashion to C, NW, \dots, SE . In what follows these expressions are constructed explicitly for totalistic rules and they are reported in table I; the case of outer totalistic rules is similar, and the corresponding expressions are summarized in Table II.

To simplify the notations let y_0, y_1, \dots, y_8 denote the spins c, nw, \dots, se . If in a certain configuration (y_0, y_1, \dots, y_8) the sum of the spins is m , the sum of the negations of the spins will be $9 - m$. This means that if expressions are found for $m_k, k = 5, \dots, 9$, then the same formulas applied to the

negations of all the spins will yield expressions for the other m_k with $k = 4, \dots, 0$. As an example, m_9 takes the value 1 only if all the spins are 1, while m_0 is 1 only if all the spins are 0. Then

$$m_9 = \prod_{i=0}^8 y_i \tag{6}$$

$$m_0 = \prod_{i=0}^8 \bar{y}_i \tag{7}$$

For $k = 8$ we have

$$m_8 = \bigvee_{\text{cyclic}} \bar{y}_0 \wedge y_1 \wedge y_2 \wedge y_3 \wedge y_4 \wedge y_5 \wedge y_6 \wedge y_7 \wedge y_8 \tag{8}$$

TABLE I
Equivalent Configurations and Characteristic Functions for Totalistic Neighborhood

m	Independent conf.	Code	Characteristic function
9	111111111	311	$y_0 \wedge y_1 \wedge y_2 \wedge y_3 \wedge y_4 \wedge y_5 \wedge y_6 \wedge y_7 \wedge y_8$
	011111111	255	$(y_0 \oplus y_1) \wedge y_2 \wedge y_3 \wedge y_4 \wedge y_5 \wedge y_6 \wedge y_7 \wedge y_8$
	001111111	127	
	010111111	191	
	011011111	223	$(y_0 \oplus y_1) \wedge (y_2 \oplus y_3) \wedge y_4 \wedge y_5 \wedge y_6 \wedge y_7 \wedge y_8$
	011101111	239	$(y_0 \oplus y_1) \wedge y_2 \wedge (y_3 \oplus y_4) \wedge y_5 \wedge y_6 \wedge y_7 \wedge y_8$
Total (107/395): $(y_0 \oplus y_1) \wedge [(y_2 \oplus y_3) \wedge y_4 \vee y_5 \wedge (y_7 \oplus y_8)] \wedge y_6 \wedge y_7 \wedge y_8$			
6	001011111	95	
	001101111	111	
	001111011	125	
	001111011	123	
	010101111	175	
	010101011	183	
	010111011	187	$(y_0 \oplus y_1) \wedge (y_2 \oplus y_3) \wedge (y_4 \oplus y_5) \wedge y_6 \wedge y_7 \wedge y_8$
	001111011	119	
	000111111	63	$(y_0 \oplus y_1) \wedge (y_2 \oplus y_3) \wedge (y_4 \oplus y_5) \wedge y_6 \wedge y_7 \wedge y_8$
	011011011	219	$(y_0 \oplus y_1) \wedge y_2 \wedge (y_3 \oplus y_4) \wedge (y_5 \oplus y_6) \wedge y_7 \wedge y_8$
Total (161/1007): $(y_0 \oplus y_1) \wedge [(y_2 \oplus y_3) \wedge (y_4 \oplus y_5) \vee (y_2 \oplus y_3) \wedge (y_5 \oplus y_6)] \wedge y_6 \vee y_7 \wedge (y_1 \oplus y_8) \wedge (y_3 \oplus y_6) \wedge y_7 \wedge y_8$			
5	001010111	87	
	001011011	91	
	001011101	93	
	001100111	103	
	001101011	107	
	001101101	109	
	001110101	117	
	010101011	171	
	001001111	79	$(y_0 \oplus y_1) \wedge (y_2 \oplus y_3) \wedge (y_4 \oplus y_5) \wedge y_6 \wedge y_7 \wedge y_8$
	000011111	31	$(y_0 \oplus y_1) \wedge (y_2 \oplus y_3) \wedge (y_4 \oplus y_5) \wedge (y_7 \oplus y_8) \wedge y_8$
	000101111	47	
	000110111	55	
	000111011	59	
	000111011	61	$(y_0 \oplus y_1) \wedge (y_2 \oplus y_3) \wedge (y_5 \oplus y_6) \wedge (y_7 \oplus y_8) \wedge y_8$
Total (170/1637): $(y_0 \oplus y_1) \wedge [(y_2 \oplus y_3) \wedge [(y_4 \oplus y_5) \vee (y_4 \oplus y_6) \vee (y_5 \oplus y_6) \vee (y_5 \oplus y_7) \vee (y_7 \oplus y_8) \vee (y_2 \oplus y_4) \wedge (y_4 \oplus y_7) \wedge y_8]$			

Note. The (*) at the end of the characteristic function for $m = 9$ means that the sum (OR) over all the cyclic translations is unnecessary. Total expressions are not reported for $m = 9$ and $m = 8$, where only one characteristic function is present. The numbers in brackets beside the total expressions are the required operations with respect to the canonical form.

where the *OR* operation is taken over the possible nine cyclic translations of the indices of the spins y_0, y_1, \dots, y_6 . Each term in the sum contains only one negated spin. Expression (8) may be rewritten as

$$m_6 = \bigvee_{\text{cyclic}} (y_0 \oplus y_1) \wedge y_2 \wedge y_3 \wedge y_4 \wedge y_5 \wedge y_6 \wedge y_7 \wedge y_8. \quad (9)$$

where \oplus denotes the exclusive *OR* (*XOR*) operation. There is some redundancy in the last expression, as $a \oplus b = \bar{a} \wedge b \vee a \wedge \bar{b}$, so that each term in the sum already contains part of the subsequent term, but this saves one computer operation per term.

The configurations with seven spin variables equal to 1 fall into four classes. The elements of each class are equivalent under cyclic translations. Each class may be identified by the configuration that has the minimum code when read as a binary number. The equivalence classes and their code are shown in Table I. In this case the expression

$$(y_0 \oplus y_1) \wedge (y_2 \oplus y_3) \wedge y_4 \wedge y_5 \wedge y_6 \wedge y_7 \wedge y_8$$

is equal to 1 for the classes denoted by 127, 191, and 223 (eventually after a cyclic translation). The class 239 can be represented by

$$(y_0 \oplus y_1) \wedge y_2 \wedge (y_3 \oplus y_4) \wedge y_5 \wedge y_6 \wedge y_7 \wedge y_8.$$

Then

$$m_7 = \bigvee_{\text{cyclic}} (y_0 \oplus y_1) \wedge [(y_2 \oplus y_3) \wedge y_4 \vee y_2 \wedge (y_3 \oplus y_4)] \wedge y_5 \wedge y_6 \wedge y_7 \wedge y_8. \quad (10)$$

This expression contains a total of 107 Boolean operations, compared to the canonical form that contains 395. These numbers are also reported in Table I.

The expressions for m_6 and m_7 are obtained in a similar way and are shown in Table I. The efficiency of the algorithm increases with the number of configurations involved. The expressions for m_6 contain 161 operations in comparison to the canonical form that contains 1007. For m_7 , the numbers are 170 and 1637, respectively. In order to

TABLE II
Equivalent Configurations and Characteristic Functions for Outer Totalistic Neighborhood

h	Independent conf.	Code	Characteristic function
8	11111111	235	$y_0 \wedge y_1 \wedge y_2 \wedge y_3 \wedge y_4 \wedge y_5 \wedge y_6 \wedge y_7^*$
	01111111	127	$(y_0 \oplus y_1) \wedge y_2 \wedge y_3 \wedge y_4 \wedge y_5 \wedge y_6 \wedge y_7$
	00111111	63	
	01011111	95	
	01101111	111	$(y_0 \oplus y_1) \wedge (y_2 \oplus y_3) \wedge y_4 \wedge y_5 \wedge y_6 \wedge y_7$
	01110111	119	$(y_0 \oplus y_1) \wedge y_2 \wedge (y_3 \oplus y_4) \wedge y_5 \wedge y_6 \wedge y_7$
	Total (87/279): $(y_0 \oplus y_1) \wedge [(y_2 \oplus y_3) \wedge y_4 \vee y_2 \wedge (y_3 \oplus y_4)] \wedge y_5 \wedge y_6 \wedge y_7$		
5	00101111	47	
	00110111	55	
	00111011	59	
	00111101	61	
	01010111	87	
	01011011	91	$(y_0 \oplus y_1) \wedge (y_2 \oplus y_3) \wedge (y_4 \oplus y_5) \wedge y_6 \wedge y_7$
	01011101	31	$(y_0 \oplus y_1) \wedge (y_2 \oplus y_3) \wedge (y_4 \oplus y_5) \wedge y_6 \wedge y_7$
	00011111	31	$(y_0 \oplus y_1) \wedge (y_2 \oplus y_3) \wedge (y_4 \oplus y_5) \wedge y_6 \wedge y_7$
	Total (96/615): $(y_0 \oplus y_1) \wedge [(y_2 \oplus y_3) \wedge (y_4 \oplus y_5) \vee (y_2 \oplus y_3) \wedge (y_3 \oplus y_4)] \wedge y_6 \wedge y_7$		
4	00101011	43	
	00101101	45	
	00110011	51	
	00110101	53	
	01010101	85	$(y_0 \oplus y_1) \wedge (y_2 \oplus y_3) \wedge (y_4 \oplus y_5) \wedge (y_6 \oplus y_7)$
	01001111	39	$(y_0 \oplus y_1) \wedge (y_2 \oplus y_3) \wedge (y_4 \oplus y_5) \wedge (y_6 \oplus y_7)$
	00001111	15	
	00010111	23	
	00011011	27	
	00011101	29	$(y_0 \oplus y_1) \wedge (y_2 \oplus y_3) \wedge (y_4 \oplus y_5) \wedge (y_6 \oplus y_7)$
	Total (135/839): $(y_0 \oplus y_1) \wedge [(y_2 \oplus y_3) \wedge (y_4 \oplus y_5) \vee (y_2 \oplus y_3) \wedge (y_3 \oplus y_4)] \vee (y_2 \oplus y_3) \wedge (y_3 \oplus y_4) \wedge (y_6 \oplus y_7)$		

Note. The (*) at the end of the characteristic function for $h=8$ means that the sum (*OR*) over all the cyclic translations is unnecessary. As in Table I total expressions for $h=8$ and $h=7$ are not reported. The numbers in brackets beside the total expressions are the required operations with respect to the canonical form.

achieve the maximum execution speed, the sum over the cyclic translations in the expressions reported in Table I should be explicitly developed.

In a general algorithm all the quantities M_k have to be generated, as the selection of the rule is performed by the R_k . It is possible to save the task of generating m_i and m_j , using the parity p of the sum m , given by

$$p = y_0 \oplus y_1 \oplus y_2 \oplus y_3 \oplus y_4 \oplus y_5 \oplus y_6 \oplus y_7 \oplus y_8; \quad (11)$$

$p = 0(1)$ if m is even (odd). Obviously

$$p = m_1 \vee m_3 \vee m_5 \vee m_7 \vee m_9,$$

and since

$$m_i \wedge m_j = 0 \quad \text{if } i \neq j,$$

we get

$$m_j = p \wedge \overline{m_1} \vee \overline{m_3} \vee \overline{m_5} \vee \overline{m_7} \vee \overline{m_9}. \quad (12)$$

The expression for m_k may be obtained from the condition

$$\bigvee_{k=0}^9 m_k = p \vee \bar{p} = 1;$$

then

$$m_k = \bar{p} \wedge \overline{m_0} \vee \overline{m_2} \vee \overline{m_6} \vee \overline{m_8}. \quad (13)$$

The expressions (11), (12), and (13) imply only 19 operations, with respect to the 3274 of the canonical form and of the 340 of the reduced form of Table I. In the actual writing of the algorithm in a computer code one can further reduce the number of operations by taking into account the presence of common patterns in the expressions in Tables I and II and observing that $a \oplus b = \bar{a} \oplus \bar{b}$. In total the number of operations required to implement a generic totalistic automaton is about 600 bitwise operations per word.

Reasoning in a similar fashion, one may find compact expressions for outer totalistic cellular automata. These are presented in Table II.

3. IMPLEMENTING THE ALGORITHM

The full power of the algorithm is developed when applied to full words. There are several ways in which one may assign the spins of the sites $x_{j,i}$ ($j = 0, \dots, Nr - 1$; $i = 0, \dots, Ns - 1$) in the lattice to the words $X_{j,k}$ ($k = 0, \dots, Nw - 1$); however, the task of building the neighborhood of the sites stored in the word $C = X_{j,k}$ must be as economical as possible. The final goal is to have the values of the cells belonging to the

neighborhood of a cell stored in a certain position of the word C in the corresponding bits of the words NW, \dots, SE . This can be obtained without any shift operations by assigning the first spin in a row to the first bit of the first word, the second spin to the first bit of the second word, and so on for the first NW spins. The previous operation is repeated Nb times in order to store the first Nw spins in the first bits of the words containing the row, the following Nw spins in the second bits of the words, and so on. For a generic row j we have

$$\begin{aligned} X_{j,0} &= |X_{j,1}(Nb-1), \dots, X_{j,2}(Nb), \dots, X_{j,Nw}, X_{j,0}| \\ X_{j,1} &= |X_{j,1}(Nb-1), \dots, X_{j,2}(Nb+1), \dots, X_{j,Nw+1}, X_{j,1}| \\ &\dots \end{aligned} \quad (14)$$

$$X_{j,Nw-1} = |X_{j,Nb-Nw-1}, \dots, X_{j,3}(Nw-1), X_{j,2}(Nw-1), X_{j,Nw}|.$$

For $Nw \geq 3$ and apart from boundary conditions, the spins of the neighbors of the sites in $X_{j,k}$ are stored in the corresponding bits of the words

$$\begin{pmatrix} NW_{j,k} & N_{j,k} & NE_{j,k} \\ W_{j,k} & C_{j,k} & E_{j,k} \\ SW_{j,k} & S_{j,k} & SE_{j,k} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X_{j-1,k-1} & X_{j-1,k} & X_{j-1,k+1} \\ X_{j,k-1} & X_{j,k} & X_{j,k+1} \\ X_{j+1,k-1} & X_{j+1,k} & X_{j+1,k+1} \end{pmatrix}. \quad (15)$$

In order to implement periodic boundary conditions on the horizontal border, all the operations on the index j are to be considered modulus the number of the rows Nr . Vertical periodic boundary conditions are imposed by observing that the west neighbors of the sites in the first word $X_{j,0}$ are contained in the last word $X_{j,Nw-1}$, circularly shifted one bit to the left, and the east neighbors of the spins in $X_{j,Nw-1}$ are in $X_{j,0}$ circularly shifted one bit to the right. This storage scheme can be used in any dimension and even for non-Boolean automata such as lattice gases (see Section 6); with a few modifications it can also be adapted to larger neighborhoods.

4. PROBABILISTIC TOTALISTIC CELLULAR AUTOMATA

Probabilistic cellular automata may be implemented by allowing real values between 0 and 1 for the coefficients r_k of Eq. (2) and interpreting c' as the probability that the spin of the central site assumes the value 1 at the next time step. Then r_k is the probability that this spin is 1 if m is equal to k .

These probabilistic concepts may be introduced in the bitwise evolution rule (4) filling the bit masks R_k with bits having the value 1 with probability r_k . A large number N/m of samples of the words $R_{k,s}$ is constructed with

$x = 0, \dots, Nm - 1$. Then, given a random number x between 0 and $Nm - 1$, the evolution rule for the sites in a word C is given by

$$C' = \bigvee_{k=0}^v R_{k,x} \wedge M_k. \quad (16)$$

In practice it is possible to reduce the number Nm of the independent random masks by performing a random circular shift over $R_{k,x}$ before introducing it in Eq. (16). The same arguments apply to outer totalistic cellular automata. Once again, the use of random masks can easily be adapted to other evolution rules. An advantage in using predefined random masks is that the probability can be fixed with a great precision, and correlations are further depressed by shuffling the random masks.

5. PERFORMANCES

In order to obtain an accurate estimate of the time required per site update, we propose an approximate expression for the running time T of a program,

$$T = t_1 + t_i \cdot L + t_u \cdot L \cdot N_u. \quad (17)$$

where L is the number of lattice sites, N_u is the number of global updates of the lattice, and t_1 , t_i , t_u are constants: t_1 represents the loading time, which could also involve the compilation time; t_i is the time requested to initialize the lattice and t_u is the update time per site. The time needed to implement the periodic boundary conditions is not considered, but the linearity of the law with respect to L with fixed N_u has been tested for lattice sizes ranging from 64×64 to 512×512 sites, over a variety of machines. The quantity used to compare the performances of the various implementations is the number v of sites updated in a second, and it is obtained by

$$v = \left\langle \frac{L \cdot \Delta N_u}{\Delta t} \right\rangle. \quad (18)$$

where ΔN_u and Δt represent the differences in lattice updates and in running time of two samples of the same program on the same machine for different N_u 's. The angular brackets represent the average over different samples.

The computers used for the benchmarks were an IBM PS/2 80 with a clock speed of 16 MHz (using DOS operating system the words are 16 bits long); a SUN 386i workstation at 25 MHz, a VAX 3580 (32 bits per word), an HP 9000/840 (32 bits per word), and a CRAY I XMP (64 bits per word). All the programs were written in a high-level language and in a clear style with many calls to subroutines

and no dirty tricks. Vectorialization on the CRAY was explicitly avoided, since we were interested in testing the gain obtained with the reduced rule on different machines. The central loop containing the sum (OR) over the eight cyclic translations of the indices was not explicitly developed, and the variables x_0, x_1, \dots, x_8 were translated by explicit assignment ($temp = x_0, x_0 = x_1, \dots, x_8 = temp$).

In order to show the advantage represented by using the algorithm described above with respect to the canonical form, eight different programs were written using the C language and run on the HP computer (Table III). The table shows the differences in the number of spins updated in a second, between the canonical expressions and our algorithm in constructing all the quantities m_k and h_k . The performances are reported for inline code and for a structured call to a subroutine. Our algorithm is about three times faster than the canonical form, depending on the complexity of the calculation.

The algorithm may be applied to many interesting models. The efficiency is discussed briefly in two cases: Conway's Game of Life [2], which is a classical testing ground, and a general probabilistic outer totalistic rule. For outer totalistic rules, and in particular for the Game of Life, we should expect smaller improvements with respect to the canonical form due to the simplicity of the rule (see Table II). When not explicitly indicated, the following programs were written in FORTRAN 77.

The Game of Life is a two-dimensional outer totalistic cellular automaton whose evolution rule is given by

$$c' = \begin{cases} 1 & \text{if } c = 0 \text{ and } h = 3, \\ 1 & \text{if } c = 1 \text{ and } h = 2 \text{ or } 3, \\ 0 & \text{otherwise,} \end{cases} \quad (18)$$

where h is the sum of the neighbors of the central cell x_i , as defined in (1). It should be noted from expression (18) that only m_2 and m_3 are required in order to calculate c' .

We wrote three different programs:

1. *High-level*, a traditional code with one spin per word and the rule implemented with *if... then... statements*;

TABLE III

Number v of sites updated in a second in kHz (formula (18)) for the construction of m_k (totalistic) and h_k (outer totalistic) using C language on a HP 9000/840 computer

Program	Totalistic		Outer totalistic	
	Subroutine	Inline	Subroutine	Inline
Canonical	83.0	172.0	177.8	338.6
Reduced	301.6	441.8	447.1	659.5

TABLE IV

Number ν of sites updated in a second in kHz (formula (18)) for the Game of Life

Computer	High-level	Canonical	Reduced
PS 2/80	18.9	3.5	22.5
SUN 386i	32.8	50.4	174.5
VAX 8350	54.9	117.8	217.2
HP 9000/840	101.9	175.1	585.1
CRAY T3MP	391.3	3034.1	4551.1

2. *Canonical*, using MSC and the rule implemented via the canonical disjunctive form;

3. *Reduced*, using MSC and the compact expressions reported in Table II.

The values of ν obtained running the three different programs are reported in Table IV. The reduced program always runs faster than the other two. We observe that when the number of bits per word is small, as in the case of the PS/2, the use of MSC does not necessarily imply better performances. For computers with more bits per word the gain of MSC increases, but still one gets significant improvements using our algorithm.

Finally, we implemented a code for the simulation of a general outer totalistic probabilistic rule. The results for ν are reported in Table V. The gain with respect to the high-level program is less than above (apart the results for the HP computer), even if with MSC only one random number has to be extracted for every Nb spins. This is due to the larger number of operations needed to generate all the M_s in (5) with respect to the Game of Life.

In order to evaluate the influence of the language used, a program that implements a general outer totalistic probabilistic rule was written in C language for the HP computer. The update rate obtained was 257.2 kHz, which is nearly 1.5 times the speed of the corresponding FORTRAN program. This result cannot be generalized, but it shows that several factors should contribute in order to achieve the best performances.

A preliminary study of probabilistic mixtures of totalistic automata has been undertaken. An example is the mixture

TABLE V

Number ν of sites updated in a second in kHz (formula (18)) for a general probabilistic outer totalistic rule

Computer	High-level	Reduced
PS 2/80	9.1	9.5
SUN 386i	16.6	73.1
VAX 8350	41.4	93.1
HP 9000/840	15.2	176.17
CRAY T3MP	261.2	2239.3

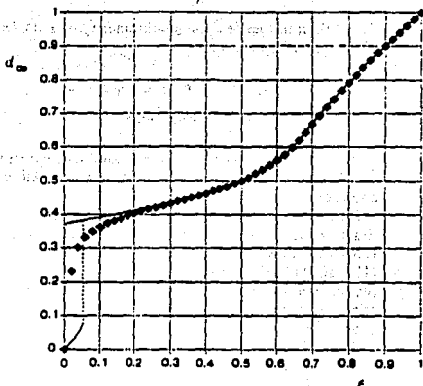


FIG. 1. Asymptotic density d_∞ of live cells for a random mixture of the Game of Life and its conjugate with probability ϵ varying from 0 to 1 step 0.02. We plot the result of computer simulations (diamonds) and of mean field approximation [14] (continuous line). At $\epsilon = 0$, which corresponds to the Game of Life, the asymptotic density is $d_\infty = 0.028$.

of the Game of Life with its conjugate that assumes the value 0(1), whereas the Game of Life takes the value 1(0). At any site the Life rule is applied with probability ϵ and its conjugate with probability $1 - \epsilon$ ($0 \leq \epsilon \leq 1$), as described in Section 4. In Fig. 1 the asymptotic density of live sites (ratio of sites having spin equal to 1 to the total number of sites) is shown as a function of ϵ , together with a mean field approximation [14]. These simulations were carried out on a 256×256 lattice. The graph shows 50 points, each being the average over 10 simulations performed on the SUN 386i with a program written in C. The total CPU time was roughly 36 h. The update speed was 161.6 kHz, which is smaller than the value reported in Table IV due to the loading time, the initialization time, and the (relatively small) slowing down due to the calculation of the density every 100 updates performed to monitor the relaxation of the lattice. The algorithm here described was also used to study the relaxation and the critical properties of the Game of Life in Ref. [15].

6. SOME PHYSICAL APPLICATIONS

As a first physical example let us consider the simple model of interface motion developed in Ref. [5], based on a marginal majority deterministic rule. The central site c assumes the value that is most prevalent in its Moore neighborhood only if the majority is strong ($m \geq 6$, see

Eq. (1)), or in case of a marginal minority ($m = 4$). In terms of Eq. (2) the rule is defined as

$$r_k = 1 \quad \text{if } k = 4, 6, 7, 8, 9 \\ r_k = 0 \quad \text{otherwise.} \quad (19)$$

The twist in the majority provides a kind of frustration that simulates a mobile interface according to the Allen-Cahn equation.

Rule (19) can be coded with the general algorithm described in Section 2, building the R_k of Eq. (4) and then using the expression for the m_k of Table I and of Eqs. (11), (12), and (13). Of course, for this given rule, one can further reduce the number of required operations using ad hoc tricks; in the case of rule (19) we were able to derive an expression containing 42 operations.

The full power of the algorithm is developed when applied to probabilistic cellular automata.

Let us first discuss as a simple example the application of the method to a parallel Monte-Carlo simulation of an Ising model with nearest and next-to-nearest neighbors equal interactions and zero magnetic field. The Hamiltonian \mathcal{H} is

$$\mathcal{H} = \sum_{j,i} -J\sigma_{j,i} \left[\left(\sum_{k=j-1, j, j+1} \sigma_{i,k} \right) - \sigma_{j,i} \right],$$

where $\sigma_{j,i} = \pm 1$ and $J \geq 0$ is a ferromagnetic coupling. Passing to Boolean variables ($\sigma_{j,i} = 2x_{j,i} - 1$), the local energy H is given by

$$H(c, h) = -2J(2c - 1)(h - 4),$$

where $c = x_{j,i}$ is the state of a generic site and h is defined as in Eq. (1).

The variation of the local energy with the flip of c is

$$\Delta H(c, h) = H(\bar{c}, h) - H(c, h) = \mp 4J(h - 4),$$

where the minus (plus) sign holds for the transition of c from 0 (1) to 1(0).

We can now define the coefficient $r_{c,A}$ of Eq. (3) so that the transition probabilities satisfy detailed balance,

$$r_{c,A} = \begin{cases} 1 & \text{if } \Delta H \leq 0, \\ \exp\left(-\frac{\Delta H}{kT}\right) & \text{if } \Delta H > 0. \end{cases}$$

The random masks are built as described in Section 4. The number of required random masks can be reduced in this

case observing that ΔH is always an integer multiple of $4J$, so that the $r_{c,A}$ are integer powers of $p = \exp(-4J/kT)$. A word A whose bits are one with probability p^2 can be obtained from two independent random words B and C whose bits are one with probability p just performing a bitwise AND among them: $A = B \wedge C$.

The implementation of a parallel version of the Metropolis Monte-Carlo sampling technique must be very cautious, as the full parallelism can lead the system towards a maximum of the energy, as discussed in Ref. [7]. A detailed discussion of the simulations of the Ising model with cellular automata can be found in Ref. [16]. The same scheme can be used to simulate Ising models in spaces of higher dimensions, for instance in three dimensions with nearest neighbors interactions (six neighbors).

The storage scheme described in Section 3 and the introduction of probabilistic evolution rules of Section 4 can be also applied to non-totalistic cellular automata such as lattice gas models [17]. For example, to model diffusion as suggested in [18], one needs a 4-bit per site cellular automaton. To this aim let us consider four Boolean cellular automata lattices stacked one over the other. We refer to the four lattices (planes) as UP (subscript \uparrow), $LEFT$ (\rightarrow), $DOWN$ (\downarrow), and $RIGHT$ (\leftarrow). If, for instance, at site (j, i) the bit x_j is set to one, it means that there is a particle travelling from site (j, i) to $(j-1, i)$. Diffusion is controlled by two parameters p and q , which give the probability of a common counter-clockwise rotation of all the particles in a generic site according to the scheme of Table VI. The random masks P_x and Q_x are built according to the parameters p and q .

The evolution rule for a word C_i that contains Nb sites of the UP plane is

$$C_i = \overline{Q}_x \wedge \overline{P}_x \wedge S_i \vee \overline{Q}_x \wedge P_x \wedge W_{\rightarrow} \vee Q_x \\ \wedge \overline{P}_x \wedge E_{\rightarrow} \vee Q_x \wedge P_x \wedge N_{\leftarrow},$$

where N, W, S, E denote the words that contain the nearest neighbors of the spins in C . The expressions for the other

TABLE VI

Counter-clockwise rotations of the velocities of the particles in a generic site for a probabilistic lattice gas, according to the parameters p, q

p	q	Rotation
0	0	0
0	1	$-\frac{\pi}{2}$
1	0	$\frac{\pi}{2}$
1	1	π

planes are obtained by performing a cyclic permutation of the \uparrow , \leftarrow , \downarrow , \rightarrow and S , E , N , W symbols.

7. CONCLUSIONS

A general algorithm for totalistic and outer totalistic cellular automata using MSC has been developed that allows significant reduction in execution times with respect to the canonical form. We have concentrated our efforts mainly in simplifying the rule, disregarding the problem of vectorization and of special implementations on parallel machines. A complementary approach dealing with these problems may be found in Ref. [13]. In general, the main drawback of MSC is the serialization needed to perform calculations; on the other hand, a great advantage is the efficient use of the memory. Our algorithm is applicable to any totalistic rule and may still be improved in specific applications. We have also discussed the problem of optimal storage of the configuration in the computer memory and the extension of the results to stochastic models. These last topics can be also applied to non-totalistic automata in any dimension. Finally, examples of physical applications are given. We have shown how to apply the algorithm to a deterministic totalistic rule that simulates interface motion between two fluids, to a Metropolis Monte-Carlo Ising model (a probabilistic outer totalistic rule), and to a stochastic lattice gas.

Note added in proof. One of the authors (F.B.) has further developed the algorithm presented here in "Boolean derivatives and computation of cellular automata," *Int. J. Mod. Phys. C*, in press.

ACKNOWLEDGMENTS

The ideas we have presented have profited from useful discussions with R. Livi and A. Salcido. We also thank G. Vichniac for reading the manuscript and for suggesting to us the equivalence totalistic, symmetric of Ref. [3]. This work was partially done during reciprocal visits to Florence and Mexico City partially sponsored by the CNR of Italy and the CONACYT of Mexico.

REFERENCES

1. S. Wolfram (Ed.), *Theory and Applications of Cellular Automata*, (World Scientific, Singapore, 1986); and *Physica* 10D (1984).
2. N. Packard and S. Wolfram, *J. Stat. Phys.* **38**, 901 (1983); also reprinted in [1].
3. This theorem is due to Shannon, see e.g., R. E. Miller, *Switching Theory*, Vol. I (Wiley, New York, 1966), p. 103.
4. M. Gardner, *Sci. Am.* **223**, 120 (1970); *Sci. Am.* **223**, 116 (1970); *Sci. Am.* **224**, 104 (1971); *Sci. Am.* **224**, 112 (1971); *Sci. Am.* **224**, 114 (1971); *Sci. Am.* **226**, 104 (1972); and in *Life, Wheels and Other Mathematical Amusements*, edited by M. Gardner (W. H. Freeman, New York, 1983).
5. G. Vichniac, in *Chaos and Complexity*, edited by R. Livi, S. Ruffo, S. Ciliberto, and M. Buiatti (World Scientific, Singapore, 1988).
6. N. Packard, in *Proceedings of the First International Symposium for Science on Form*, edited by Y. Katoh *et al.* (KTK Scientific Publisher, 1986); also reprinted in [1].
7. G. Vichniac, *Physica* 10D, 96 (1984).
8. Y. Pomeau, *J. Phys. A* **17**, L415 (1984).
9. R. Zorn, H. J. Herrmann, and C. Rebbi, *Comput. Phys. Commun.* **23**, 337 (1987); C. Kalle and V. Winkelmann, *J. Stat. Phys.* **28**, 639 (1982); S. Wansleben, J. G. Zabolitzky, and C. Kalle, *J. Stat. Phys.* **37**, 271 (1984).
10. H. J. Herrmann, *J. Stat. Phys.* **37**, 271 (1984); J. G. Zabolitzky and H. J. Herrmann, *J. Comp. Phys.* **76**, 426 (1988).
11. S. Yablonski, *Introduction aux Mathématiques Discrètes* (MIR, Moscow, 1983).
12. F. Wegener, *The Complexity of Boolean Functions* (Wiley, New York, 1987).
13. J. Myczkowski and G. Vichniac, "Parallel Programming for Cellular Automata," AICA Workshop on Parallel Programming, CINECA, Bologna, Oct. 1989 (unpublished).
14. L. S. Schulman and P. E. Seiden, *J. Stat. Phys.* **19**, 293 (1978).
15. F. Bagnoli, R. Rechman and S. Ruffo, *Physica A* **171**, 249 (1991).
16. O. Parodi and H. Ottavi, in *Cellular Automata and Modeling of Complex Physical Systems, Proceedings of the Winter School, Les Houches, France, 1989*, edited by P. Manneville, N. Boccara, G. Y. Vichniac, and R. Bideaux (Springer-Verlag, Berlin 1989), p. 82.
17. Gary D. Doolen (Ed.), *Lattice Gas Methods for PDE's*, *Physica* 47D, 1991.
18. B. Chopard and M. Droz, in *Cellular Automata and Modeling of Complex Physical Systems, Proceedings of the Winter School, Les Houches, France, 1989*, edited by P. Manneville, N. Boccara, G. Y. Vichniac and R. Bideaux (Springer-Verlag, Berlin, 1989), p. 130.

Apéndice B

Cosas de la Vida

10. 11. 2014

11. 11. 2014

SOME FACTS OF LIFE

Franco BAGNOLI^{1,*}, Raúl RECHTMAN² and Stefano RUFFO^{1,3}

¹Università di Firenze, Dipartimento di Fisica, Largo E. Fermi 2, 50125 Firenze, Italy

²INFN, Sezione di Firenze, Italy

³Depo. de Física, Facultad de Ciencias, UNAM, Apdo. Postal 70-542, 04510 México D.F., Mexico

*Università della Basilicata, Dipartimento di Chimica, Potenza, Italy

Received 8 September 1990

We study the statistics of the time evolution of the Game of Life. We recognize three different time regimes of which the most interesting one is the long time *glider* regime, which has properties typical of a critical state. We introduce mean field approximations able to give some insights on the time evolution of the density of living cells. Extended simulations are reported which deal with the evolution of the density, damage spreading and the measurements of a finite size exponent. A simple dynamical model explains some aspects of the asymptotic *glider* regime. We study also the dependence of the asymptotic density on the initial density both analytically and numerically.

1. Introduction

The Game of Life, due to Conway and popularized by Gardner, is probably the most famous cellular automaton [1, 2]. It is a solitary game that can be played with chips on a very large board divided in small squares of the size of the chips. In order to play the Game of Life one starts by putting some chips on the board. If a square is occupied by a chip there is life on the square, otherwise the square is dead. Life evolves in time according to a simple rule. First, all the live squares that have 2 or 3 live squares in their neighborhood (which includes 8 squares) and all the dead squares that have 3 live neighbors are marked. Then all the unmarked live squares die and the marked dead squares become alive. The evolution of Life is given by the repeated application of this simple rule.

In more technical terms, Life is a 2-state outer totalistic cellular automaton defined on a square two-dimensional lattice and a Moore neighborhood (nearest and next-to-nearest neighbors). In each cell there is a state variable that can take the value 1 (live) or 0 (dead). The evolution rule depends on the

sum of the state variables on the neighborhood (and not on their precise location) and on the state variables in the central cell. Indicating with $s'_{i,j}$ the state of the cell at time t in the location (i, j) , the rule can be expressed as

$$s'_{i,j} = \delta(H'_{i,j}, 3) + s'_{i,j} \delta(H'_{i,j}, 2), \quad (1.1a)$$

where

$$H'_{i,j} = \sum_{k=j-1}^{j+1} \sum_{l=i-1}^{i+1} s_{i,l} - s'_{i,j}, \quad (1.1b)$$

with $0 \leq H'_{i,j} \leq 8$ a temporary variable representing the outer totalistic neighborhood of the cell $s'_{i,j}$ and δ the Kronecker symbol, $\delta(m, n) = 1$ if $m = n$, 0 otherwise.

While Life can be played manually (as it was played in the beginning) its overall behavior is better appreciated using a general purpose or a dedicated computer such as CAM or CAG [3, 4]. The simplicity of the rule hides a very complex behavior that justifies its name. Starting from an initial random condition of dead and live cells the Game of Life shows births (transitions $0 \rightarrow 1$) and deaths (transitions $1 \rightarrow 0$), and the global impression of the time evolution recalls the auto-organization typical of living organisms. What is left after a very long time, at least for finite lattices, is a configuration with stable or periodic islands of living cells. Some typical examples of these are shown in fig. 1. Very large stable configurations may be built by careful investigation (see for example ref. [2]), but are not significant from a statistical point of view if one starts the lattice from random initial conditions. Life also allows for moving objects; the simplest and most common one is called a glider and is also shown in fig. 1. It advances diagonally one cell reproducing itself every 4 time steps. Since the maximum speed at which an object may travel in the automaton is one cell per time step, this is called the *speed of light* and gliders move with $\frac{1}{4}$ of the speed of light. Gliders may be produced at a stable rate by glider guns (see ref. [2], ch. 21).

Why is the Game of Life so interesting? A cell survives (a transition $1 \rightarrow 1$) if it has 2 or 3 live neighbors. This is an essential feature for forming chains and small aggregates. Big clusters are generally not stable, as a straight line of 3 or more live cells will originate others live cells due to the rule that promotes births at cells with 3 live neighbors. The rule frustrates indefinite growth by requiring a cell to die from overcrowding (more than 3 live neighbors). The subtle balance achieved allows the formation of the stable, periodic and moving objects mentioned above which will be referred to as *animals* in analogy with the clusters of percolation theory [5]. Objects like the *traffic lights*

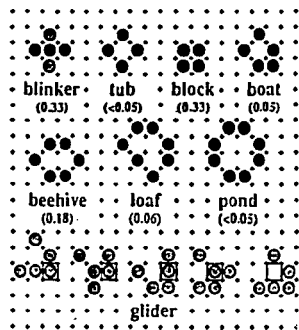


Fig. 1. The most common animals found in Life. How often they appear in the asymptotic regime is indicated in parentheses. Gliders are exceptional animals in the asymptotic state at finite size.

or the *honey farms* [2] will be considered to be formed by several individual animals. More precisely the term animal will denote a stable or oscillating interacting group of live cells (modulo a translation).

Starting from an initial random configuration the Game of Life evolves after a long time to a stable configuration with a scarce population of live cells organized in animals. The first stage of this evolution (some tenths of time-steps) is characterized by clouds of living cells that grow and shrink chaotically. After some 1000 time-steps the clouds (activity zones) are well separated from one another, smaller in size and some animals are easily distinguished. Later on, activity zones fade away eventually creating some gliders, until a final configuration is reached, which is made of animals. If one perturbs this state, e.g. adding a glider, then new activity can appear, and one has to wait another hundred or thousand time-steps before Life reaches another very similar final state. Surprisingly enough, this kind of behavior is peculiar of Life: if we generically change slightly the rule, e.g. allowing more births or more deaths, the relaxation time is drastically reduced, and the final state is simpler and more predictable on the basis of mean field theory (see section 2). However, there are exceptions: if the rule allows more births or survivals for less probable local configurations (for instance those with 7 or 8 live cells in the neighborhood), then the overall evolution of the lattice is similar to that of the Game of Life [6].

Although a lot of effort has been devoted to the understanding of the details of stable finite configurations, much less is known on the statistical properties of the Game of Life.

Some numerical simulations and mean field (MF) methods are discussed in [7], mainly concerning the existence of an asymptotic average number of live cells (the density). A further refinement of the MF prediction of the asymptotic density was obtained in [8]. More recently a power-law decay of several statistical quantities was interpreted as an evidence that Life is an example of self-organized criticality [9, 10].

In this paper we discuss some properties of the Game of Life, which are relevant from the statistical point of view. In particular we study some features of the asymptotic state and of the relaxation to it. In relation to the question of the criticality of this model, we investigate finite size effects.

In section 2, we discuss a mean field approach to the problem and its limitations and in section 3, some simulations and their results. Section 4 discusses criticality and some unsolved questions. Section 5 is devoted to a dynamical model that reproduces the asymptotic state.

2. Improved mean field

The first and simpler approximation for the evolution of Life is to disregard correlations. This leads to the following evolution equation [7] for the density ρ of live cells, which is defined as the ratio of living cells to the total number of cells in the lattice:

$$\rho' = 28\rho^2(1-\rho)^3(3-\rho), \quad (2.1)$$

where the prime denotes the updated density. The map (2.1) is shown in fig. 2. Let us observe that this equation gives the exact value of the density at time 1 if the initial configuration at time 0 is random with no correlations.

We would like to find a MF technique which allows a better forecasting of the time evolution.

As the speed of light is 1, the state of a cell at time t depends at most on the state at $t=0$ of the cells belonging to a neighborhood of size $r = (2t+1)^2$. There are 2^r different configurations within this neighborhood, and they can be labeled with an integer i which goes from 0 to $2^r - 1$. An exact formula for the density $\rho(t)$ at time t is then obtained averaging the value $c(i)$ of the central cell at time t over all these initial configurations. For an initial density ρ_0 , the probability $\rho(i)$ of having the configuration i depends only on the number $n(i)$

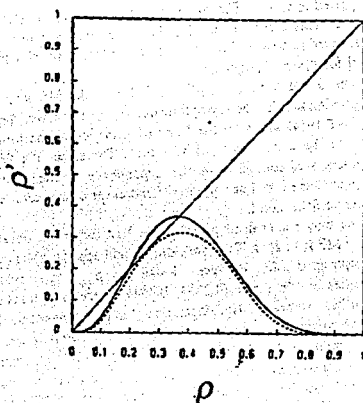


Fig. 2. The MF map eq. (2.1) (full line) and the improved MF $\rho(2)$ (see eq. (2.4)) (dashed line) versus ρ_0 .

of live cells,

$$\rho(i) = \rho_0^{n(i)}(1-\rho_0)^{2^r-n(i)}. \quad (2.2)$$

This gives for the density at time t

$$\rho(t) = \sum_{i=0}^{2^r-1} c(i) \rho_0^{n(i)}(1-\rho_0)^{2^r-n(i)}. \quad (2.3)$$

For $t=1$, r is equal to 9 and formula (2.3) reduces to the map (2.1).

It is convenient to rewrite formula (2.3) grouping terms with the same $n(i)$. Let us define a_k as the number of distinct configurations with $n(i) = k$, then

$$\rho(t) = \sum_{k=0}^{2^r} a_k \rho_0^k (1-\rho_0)^{2^r-k}. \quad (2.4)$$

An efficient way to perform this sum for large neighborhoods is to code each initial configuration in an integer word and then compute with a multi-spin coding algorithm (see, e.g. ref. [11]) the state of the central cell at time t .

We have computed the coefficients a_k for $i = 2$ ($i = 0, \dots, 2^3 - 1$); they are reported in table I. The corresponding function $\rho(2)$ versus ρ_0 is also shown in fig. 2. This second approximation takes into account correlations one step backward in time and is similar to the n -tree approximation introduced in ref. [12] for directed polymers.

The stable fixed point $\rho^{(1)} = 0.37017$ of the MF map (2.1) gives the first approximation for the asymptotic density ρ_* . Moreover the unstable fixed point $\rho^{(2)} = 0.19247$ separates the basin of attraction of the former fixed point from that of the stable fixed point in zero. Therefore, the first order MF theory predicts a discontinuity in the dependence of the asymptotic density with respect to the initial density at $\rho^{(1)}$ and at the other pre-image $\rho = 0.5642$ of the unstable fixed point.

The only stable fixed point of the transformation obtained in the second-order MF is in zero. Therefore this second approximation predicts a vanishing asymptotic density. However, looking at fig. 2 it is evident that for initial densities in the range (0.2634, 0.4945) there is a transient near the point $\rho = 0.2634$ where the transformation is almost tangent to the bisectrix.

Approximations of higher order are hard to compute analytically as the next step would involve the summation over $2^i - 10^{19}$ configurations. A possible way is to explore Monte-Carlo simulations. However, it is easy to derive that in any higher-order approximation the first three coefficients a_k , $k = 0, 1, 2$, of formula (2.4) are zero for the effect of isolation of live cells, this entails that the transformation has always a stable fixed point in zero. One can also prove that at least the last five coefficients a_{k-4} , $k = 0, \dots, 4$, which determine the behavior near $\rho = 1$ are zero due to the effect of overcrowding.

Table I
Coefficients a_k of the polynomial $\rho(2)$ of formula (2.4) for the second-order MF approximation.

k	a_k	k	a_k
0	0	13	1 467 120
1	0	14	813 480
2	0	15	273 548
3	22	16	49 756
4	1092	17	3962
5	10 902	18	72
6	52 808	19	0
7	159 532	20	0
8	351 305	21	0
9	662 834	22	0
10	1 136 852	23	0
11	1 653 846	24	0
12	1 844 296	25	0

If the curve maintains its bell shape, and this is consistent with the above quoted properties of the coefficients, it can happen that at intermediate values of the density there is no other fixed point, a couple of stable and unstable fixed points or a marginally stable (tangent) fixed point. Simulations suggest that these bifurcations should happen close to zero density.

As we shall see in the following section, these MF approximations are very useful for studying the short time evolution.

3. Simulations

The computer study of the Game of Life requires heavy simulations. In order to reduce computing time and memory storage on general purpose computers, optimized algorithms using multi-site coding were explicitly developed [11]. They are based on a reduction of the boolean expression of the rule (1.1) using the bitwise XOR function and on the optimal memory coding of the lattice. Also, some simulations were carried out on the special purpose computers CAG and CAM [3, 4]. We have chosen periodic boundary conditions on square and rectangular lattices of size up to 512×512 cells.

We have investigated the dependence of the asymptotic density ρ_* on the density ρ_0 of a random uncorrelated initial configuration of size 256×256 . The results of the simulations are shown in fig. 3; each experimental point results

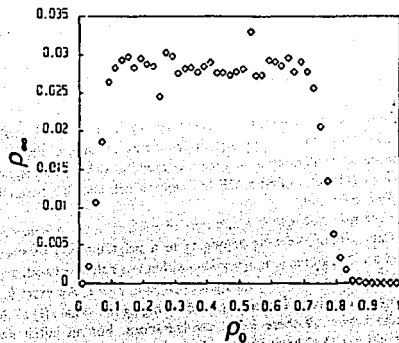


Fig. 3. Asymptotic density of live cells (ρ_*) versus the initial density (ρ_0).

from an average over three independent initial configurations of the same density. One can observe that ρ_n is roughly constant in the ρ_0 range (0.1, 0.7), and that it goes smoothly to zero as ρ_0 approaches zero or one.

The shape of ρ_n versus ρ_0 can be justified using MF arguments. In fact, both MF approximations discussed in section 2 give a bell-shaped form for the updated density. This means that any density smaller than the maximum of the function (2.4) has two pre-images, on opposite sides of the abscissa of the maximum. So, neglecting the short range correlations that establish in the first few time steps, one can argue that configurations having densities on the right side of the abscissa of the maximum have their equivalent on the left side, giving the same updated density. This explains the symmetric behavior of ρ_n near zero and one observed in fig. 2. It is also surprising that both MF approximations predict an asymmetry between the small and the large initial density behavior, due to the fact that in zero only the first two derivatives of the transformations are zero, while in one also higher-order derivatives vanish. This behavior is well reproduced in the numerical experiments.

This fact allows saving computer time in the investigations of the dependence of the final density on the initial density because one can limit the numerical experiments to an interval slightly larger than the abscissa of the maximum of the best MF, say, in our case, (0, 0.5).

This dependence is shown in fig. 4 for different lattice sizes; each point results from averaging 100 samples. One can observe that the asymptotic density reaches the common value $\rho_n^{(1)} = 0.0285(5)$ if the initial density is large enough, while near $\rho_0 = 0$ the asymptotic density goes to zero smoothly. This is the exact value of ρ_n at zero, but the question remains open whether the asymptotic density reaches this value smoothly in the thermodynamic limit, or if there is a discontinuous transition at finite value of the density, as predicted by the first order MF (see section 2), or, finally, if this discontinuous transition happens at zero density, although also the improved MF results seem to exclude this last possibility.

Another important aspect of Life is its temporal behavior. The time evolution of $\rho(t)$ was studied on a 320×200 lattice, starting with random initial configurations of density between 0.12 and 0.5 (see fig. 5) and averaging over 200 samples. For times smaller than 20, the behavior depends on the initial density and it is not reported in fig. 5. For times greater than 20 and smaller than roughly 2000 density is well fitted by the power law:

$$\rho(t) = \rho_n^{(1)} t^{-\beta} \quad (3.1)$$

with $\rho_n^{(1)} \sim 0.4$ and $\beta \sim 0.3$. For $t > 2000$ there is a change in the curve that allows the convergence towards the asymptotic value $\rho_n^{(1)}$. The value of the

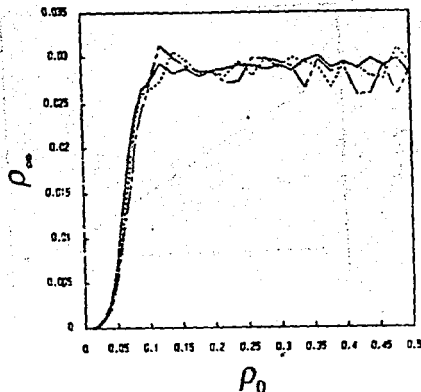


Fig. 4. Asymptotic density of live cells (ρ_n) versus the initial density (ρ_0) for three different lattice sizes: 96×50 (broken line); 160×100 (dashed line) and 320×200 (full line). Statistical errors are not indicated, but have been computed to be less than 10%.

constant $\rho_n^{(1)}$ in eq. (3.1) is close to the non-zero stable fixed point of the MF map (2.1). This map should model the early time evolution: the differences in initial configurations are lost in a short time and all the subsequent time evolution appears as it started from an initial density $\rho_0^{(1)} \sim \rho_n^{(1)}$.

The time evolution changes drastically around $t_c \sim 2000-3000$. A visual inspection of the automaton shows that for $t < t_c$ the time evolution is dominated by activity zones that change continuously, while for $t > t_c$ large parts of the lattice are sparsely populated by animals and the activity zones are few and isolated. In this regime the propagation of activity is carried out by occasional gliders created in the active zones that eventually collide with quiescent animals. The behavior before t_c may be called *active regime* and after t_c *glider regime*.

The independence of the time evolution of the density on the size of the lattice in the active regime is shown in fig. 6 for two different lattice sizes with an average over five samples. This seems to indicate also that the value of t_c reaches a finite asymptotic value with the lattice size.

The propagation of information in the two regimes is completely different.

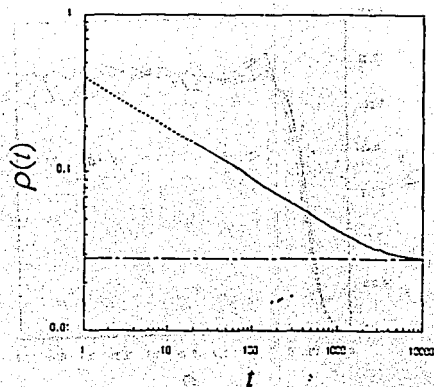


Fig. 5. Temporal behavior of the density $p(t)$. The statistical errors are not reported, but are typically of the order of the fluctuations of the curve. The dashed line is the extrapolation to short times of the power law behavior. The broken line indicates the asymptotic value of the density.

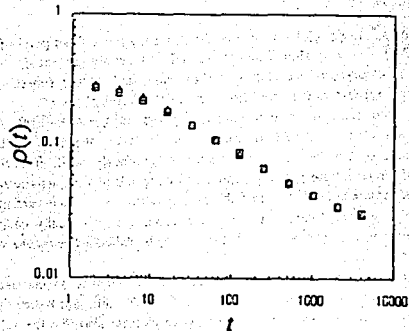


Fig. 6. Independence of the $p(t)$ curve on the size of the lattice: 256×256 (triangles), 512×512 (squares).

In an activity zone a damage [13] spreads at a finite fraction of the speed of light. Preliminary results on a lattice 256×256 (CAM machine) show that starting with two identical random configurations, a small perturbation (a glider) added at $t = 0$ spreads with a propagation speed of ~ 0.4 . The same perturbation added at time $t = 100$ spreads on the whole lattice with a velocity of ~ 0.25 , and the spreading still continues at time $t = 500$, even if the added glider collides with an animal and they convert in another animal for some time. This means that in this regime all the cells are affected, earlier or later, by the activity, so that even a quiescent animal can change the state of the whole universe. At time $t \sim 1000 - 2000$ the damage can spread only if it is produced into an activity zone. For times larger than 3000 steps a damage, even if produced in an active zone, does not spread over the whole lattice and its speed is very small. Probably in an infinite lattice, a damage spread with a very small velocity.

Finally, we report in fig. 1 also the probability of finding a given animal in the final configuration normalized to the number of samples and to the number of animals in a chosen collection. As may be noticed, the asymptotic state contains almost exclusively small animals such as beehives, blocks and blinkers.

4. The asymptotic state

We have seen that the temporal behavior of Life undergoes a quite sudden change at a certain time t_c . For times t less than t_c the density of live cells follows a power-law decay, while for times bigger than t_c the density $p(t)$ cannot be identified with a well-defined law, and finally the configuration dies out in a limit cycle. In ref. [9] it has been illustrated numerically that if one perturbs the quiescent asymptotic state with a localized perturbation, as for instance a glider, the duration of the perturbation and other quantities show a power-law decay. This behavior recalls that of a system at a critical point. At variance with a standard critical point, Life does not have a critical parameter to adjust, and this seems to suggest that Life is an example of a system in a stationary critical state, a feature illustrated with the name of *self-organized criticality* [10]. If this scenario holds, we expect that in the thermodynamic limit, the glider regime is the stationary one.

To investigate these aspects we performed simulations on square lattices of 32, 64, 128 and 256 cells per side L . We have measured the time taken by each initial configuration to relax into a limit cycle, that we call *decay time* t_d . The distribution of decay times $P(t_d)$ has been obtained averaging over 8000 samples at most and is reported in fig. 7. $P(t_d)$ shows a maximum at t_{max} and an exponential tail. The exponential decay indicates that the relaxation process is

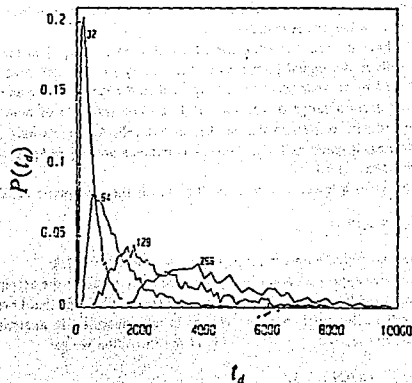


Fig. 7. Probability distribution $P(t_d)$ of decay times for square lattices of different sides.

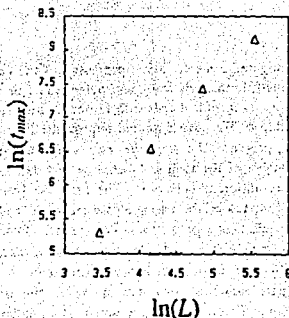


Fig. 8. Power-law dependence of the most probable relaxation time t_{max} on the size of the lattice L .

a probabilistic one, with a characteristic time τ that depends on the size of the lattice. The maximum of $P(t_d)$ indicates the time at which the probabilistic process takes over, thus changing the law ruling the relaxation process. Both the characteristic time τ and t_{max} increase with the size of the lattice. One can fit a power-law increase of t_{max} , with an exponent $\alpha = 0.76$ (see fig. 8), although investigation over larger lattices would be needed to improve this result. However we observe that this simulation took almost one month of use of the CAM machine.

The divergence of both τ and t_{max} indicates that the glider regime lasts longer and longer as the lattice size increases. Its mean density is the reported value $\rho^{(3)}$.

5. A simple model for the asymptotic state

In this section we describe a simple stochastic model that mimics the glider regime. In the glider regime the lattice is populated with some isolated and quiescent animals, some activity zone and gliders or other travelling perturbations. When a glider collides with an animal they can simply disappear, but sometimes an activity zone is formed, which can eventually emit other gliders and produce other animals.

We first assume that the distribution of the animals does not hide some ordering, but simply obeys some stochastic rule. We remember that Life is intrinsically deterministic, therefore the only source of randomness is the initial random configuration.

The model is defined in the continuum. Starting with an empty space, animals, randomly chosen within the collection of the most probable ones are randomly tossed onto the surface of area A one at a time. If they overlap (a collision) they are both removed. This process continues indefinitely until an equilibrium situation is reached.

Two simplifications are immediately introduced, first the various animals are replaced by disks of common radius R (the final result is independent of R in the approximation we shall adopt). Triple and higher order collisions are neglected.

In analogy with problems of random sequential adsorption [14] we define the exclusion circle having radius $2R$. If only one disk is present on the lattice, the collision probability of an incoming disk, is proportional to the area of the exclusion circle. In general, if N disks are present, the collision probability $P_c(N)$ is defined by the ratio of the area covered by the exclusion circles to the total area A . Neglecting the overlap among the exclusion circles, this probabili-

ty is given by

$$P_c(N) = 4N\pi R^2 A. \quad (5.1)$$

This approximation is correct in the low density limit, it corresponds to the first term in a cumulant expansion [14].

Let $P(N, t)$ denote the probability of finding N disks at time t . The master equation for P is

$$P(N, t+1) = P_c(N+1)P(N+1, t) + [1 - P_c(N-1)]P(N-1, t), \quad (5.2a)$$

$$P(0, t+1) = P_c(1)P(1, t). \quad (5.2b)$$

The stationary solution for the probability $\bar{P}(N)$ in the approximation (5.1) is

$$\bar{P}(0) = \alpha \bar{P}(1), \quad (5.3a)$$

$$\bar{P}(N) = \frac{(N+1)\alpha}{1 - N\alpha} \bar{P}(N+1), \quad (5.3b)$$

with $\alpha = 4\pi R^2 A$.

If $N \gg 1$ (with N much less than the maximum number of allowed disks on the given area), we can neglect 1 with respect to N and obtain

$$\bar{P}(N) = \frac{N\alpha}{(1 - N\alpha)} \bar{P}(N+1), \quad (5.4)$$

where $N\alpha$ is four times the ratio of covered area to A , and it is small in our approximation. Thus $\bar{P}(N)$ depends only on the ratio $R^2 A$. This indicates that the results of the model are not too sensitive to the inclusion of disks of different radius.

We can solve eq. (5.4) by approximating N with a continuous variable, a condition satisfied in the limit $A \rightarrow \infty$. Defining $d = Na/4$ we obtain

$$\bar{P}(d) = Cd^{11/4} \exp(-2d), \quad (5.5)$$

with C a normalization constant.

This is all what we need of the model to continue on the speculations on its consequences on the study of the glider regime of the Game of Life. Since the considered approximation of the model is valid only if the coverage of the surface is small, we cannot trust the probability distribution (4.5) at large d .

Therefore we prefer to obtain an estimate of the coverage considering the most probable value of the distribution (5.5), $d_{max} = \frac{1}{2}$.

We have now to relate the size of a disk (and thus d_{max}) to the number of live cells in an animal (and thus to the density ρ). The radius of the surface occupied by an animal is one cell bigger than the radius of the animal, due to the interaction range of the rule of Life. The fractions of number of cells occupied with respect to the number of live cells for the various animals can also be easily computed. For the most common animals (see fig. 1) this fraction is between $\frac{1}{2}$ and $\frac{1}{3}$.

This gives a lower and an upper bound for the asymptotic density of Life,

$$\frac{1}{3} < \rho_c < \frac{1}{2}. \quad (5.6)$$

to be confronted with the result of simulations $\rho_c^{(s)} = 0.0285$.

A better approximation can be achieved if we measure the asymptotic ratio between the live cells and the *connected* ones, that is those that have at least a live cell in the neighborhood. This ratio was measured in numerical experiments, the result being 0.23 ± 0.01 . Using this value we get

$$\rho_c^{(m)} = 0.029 = 0.001. \quad (5.7)$$

We consider this result as a confirmation of the hypotheses behind the model rather than a prediction of the density.

6. Conclusions

We have investigated some statistical properties of the Game of Life. Some results are obtained, both analytically and numerically, on the dependence of the asymptotic density ρ_c of live cells with respect to the density ρ_0 of an initial random configuration. We have obtained improved numerical estimates of ρ_c and revealed the presence of a transition as ρ_0 goes to zero or to one.

A detailed analysis of the temporal behavior of Life shows that it may be divided into three different behaviors. The first one (valid during the first time-steps) is dominated by the absence of correlations and therefore follows closely the mean field theory predictions. The absence of correlations is exactly true during the first time step, and is less so as time advances. A better result than that given by pure mean field theory was presented.

The second part shows a power-law decay of the density (considered equivalent to the magnetization of a spin model) that implies the dominance of correlations. Unlike a critical phenomenon in magnetic systems, this power-law does not converge towards the asymptotic value, and hence breaks down at

$t = t_c \sim 2000-3000$, where another evolution mechanism takes over. This part of the evolution is termed activity regime since it is dominated by activity zones where it is suggested that information is exchanged at a fast rate.

The third part of the time evolution begins after t_c and it is conjectured that it goes on forever in the thermodynamic limit. This behavior is termed glider regime since the activity and information transport is due to the relatively slow motion of the gliders. This glider regime seems to respond to perturbations with the power-law properties of a system at the critical point. We have characterized this critical regime measuring a finite-size exponent.

The simulations for various lattices show that the time behavior is independent on the initial density, as long as it is not too small or too large.

A simple model allows the derivation of the value of the asymptotic density, when the measured percentage of remaining animals is taken into account.

Acknowledgements

We thank R. Livi and G. Parisi for useful discussions. We acknowledge the CNR-CONACYT contract for financial support, which allowed the exchange of researchers between Italy and Mexico.

References

- [1] Elwyn Berlekamp, John Conway and Richard Guy, eds., *Winning Ways*, vol. 2, *What is Life?* (Academic Press, New York, 1982) ch. 25.
- [2] M. Gardner, *Wheels, Life and Other Stories* (Freeman, New York, 1983) chs. 20-22.
- [3] T. Toffoli and N. Margolus, *Cellular Automata Machines* (MIT Press, Cambridge, MA, 1989).
- [4] F. Bagnoli and A. Francescato, A cellular automata machine, in: *Cellular Automata and Modeling of Complex Physical Systems*, P. Manneville, R. Bideaux, G. Vichniac and N. Boccara, eds. (Springer, Berlin 1990).
- [5] D. Stauffer, *Phys. Rep.* 54 (1979) 1.
J.W. Essam, *Rep. Progr. Phys.* 43 (1980) 833.
- [6] F. Bagnoli, Thesis, Università di Firenze (1989).
- [7] L.S. Schulman and P.E. Seiden, *J. Stat. Phys.* 19 (1978) 293.
- [8] H. Gutowitz, *Complex Systems I* (1987) 57.
- [9] P. Bak, K. Chen and M. Creutz, *Nature* 342 (1989) 760.
- [10] P. Bak, C. Tang and K. Wiesenfeld, *Phys. Rev. Lett.* 59 (1987) 381; *Phys. Rev.* 38 (1988) 364.
- [11] F. Bagnoli, R. Rechiman and S. Ruffo, *General Algorithm for Totalistic Cellular Automata*, *J. Comput. Phys.*, submitted.
- [12] B. Derrida, in: *Complexity and Evolution*, R. Livi, J.P. Nadal and N. Packard, eds. (Nova Science), in press.
- [13] D. Stauffer, in: *Chaos and Complexity*, R. Livi, S. Ruffo, S. Ciliberto and M. Buatti, eds. (World Scientific, Singapore, 1988).
- [14] P. Schaaf and J. Talbot, *Phys. Rev. Lett.* 62 (1989) 175, and references therein.

Apéndice C

Exponentes de Lyapunov para ACs

1. The first part of the document
 2. The second part of the document
 3. The third part of the document
 4. The fourth part of the document
 5. The fifth part of the document

Damage spreading and Lyapunov exponents in cellular automata

F. Bagnoli ^{a,c}, R. Rechtman ^{b,c} and S. Ruffo ^{b,c}

^a Dipartimento di Matematica Applicata, Università di Firenze, Via S. Maria 3, I-50139 Florence, Italy

^b Dipartimento di Energetica, Università di Firenze, Via S. Maria 3, I-50139 Florence, Italy

^c Sezione I.N.F.N. and Unità I.N.F.N. di Firenze, Florence, Italy

Received 10 August 1992; accepted for publication 27 October 1992

Communicated by A.R. Bishop

Using the concept of the Boolean derivative we study local damage spreading for one-dimensional elementary cellular automata and define their maximal Lyapunov exponent. A random matrix approximation describes quite well the behavior of "chaotic" cellular automata and predicts a directed percolation-type phase transition. After the introduction of a small amount of noise elementary cellular automata reveal the same type of transition.

1. Introduction

The behavior of the distance between two configurations submitted to the same dynamics (damage spreading) is considered to be a good tool to investigate the ergodic properties of the dynamics of discrete statistical models [1]. Although the relation between these properties and "chaotic" behavior is still unclear, there is an intuitive connection between "chaos" and damage spreading on one side, and between a periodic attractor and damage collapsing on the other. For continuous dynamical systems a positive maximal Lyapunov exponent (MLE) implies chaotic motion. The MLE is roughly defined as the rate of the exponential divergence of the distance between two initially close configurations in the limit of long times and vanishing initial distances. In what follows we show how Boolean derivatives may be used to define the MLE of a cellular automaton.

A Boolean one-dimensional cellular automaton (CA) is a discrete dynamical system defined on a lattice. The state of the system is represented by a configuration $x = (x_1, x_2, \dots, x_L)$ of Boolean variables where L is the size of the lattice. We always use

periodic boundary conditions ($x_{L+1} = x_1$). The time evolution of the system is given by a Boolean function F ,

$$x(t+1) = F(x(t)), \quad (1)$$

which is in turn defined locally by a uniform rule f ,

$$x_i(t+1) = f(x_{i-r}(t), \dots, x_i(t), \dots, x_{i+r}(t)), \quad (2)$$

where r is the range of the function f . There are 2^{2r+1} different CA of range r . In what follows we restrict our study to elementary CA for which $r=1$ and use Wolfram's labeling convention [2].

In the context of CA where time, space and dynamical variables are discrete, we cannot extend directly the definition of Lyapunov exponents [3,4]. Due to the finite interaction range r and to the finite number of states of the variables x_i , the distance between two initially close configurations can increase at most linearly for long times.

Instead of looking at the long time behavior of the distance between two configurations, we can use some hints from the theory of continuous dynamical systems and study the local stability of a single trajectory with respect to a small perturbation or damage or defect in the configuration. This defect can be locally corrected, or a bit trace being annihilated without change in length, or can propagate increasing the distance between the configurations.

0167-8716/93/0000-0000\$04.00/0
© 1993 North-Holland. All rights reserved.

Damage spreading and Lyapunov exponents in cellular automata

F. Bagnoli ^{a,c}, R. Rechtman ^{b,1} and S. Ruffo ^{b,c}

^a Dipartimento di Matematica Applicata, Università di Firenze, Via S. Maria 3, I-50139 Florence, Italy

^b Dipartimento di Energetica, Università di Firenze, Via S. Maria 3, I-50139 Florence, Italy

^c Sezione I.N.F.N. and Unità I.N.F.M. di Firenze, Florence, Italy

Received 10 August 1992; accepted for publication 27 October 1992

Communicated by A.R. Bishop

Using the concept of the Boolean derivative we study local damage spreading for one-dimensional elementary cellular automata and define their maximal Lyapunov exponent. A random matrix approximation describes quite well the behavior of "chaotic" cellular automata and predicts a directed percolation-type phase transition. After the introduction of a small amount of noise elementary cellular automata reveal the same type of transition.

1. Introduction

The behavior of the distance between two configurations submitted to the same dynamics (damage spreading) is considered to be a good tool to investigate the ergodic properties of the dynamics of discrete statistical models [1]. Although the relation between these properties and "chaotic" behavior is still unclear, there is an intuitive connection between "chaos" and damage spreading on one side, and between a periodic attractor and damage collapsing on the other. For continuous dynamical systems a positive maximal Lyapunov exponent (MLE) implies chaotic motion. The MLE is roughly defined as the rate of the exponential divergence of the distance between two initially close trajectories in the limit of long times and vanishing initial distances. In what follows we show how Boolean derivatives may be used to define the MLE of a cellular automaton.

A Boolean one-dimensional cellular automaton (CA) is a discrete dynamical system defined on a lattice. The state of the system is represented by a configuration $x = (x_1, \dots, x_r, \dots, x_L)$ of Boolean variables, where L is the size of the lattice. We always use

periodic boundary conditions ($x_{i+L} = x_i$). The time evolution of the system is given by a Boolean function F ,

$$x(t+1) = F(x(t)), \quad (1)$$

which is in turn defined locally by a uniform rule f ,

$$x_i(t+1) = f(x_{i-r}(t), \dots, x_i(t), \dots, x_{i+r}(t)), \quad (2)$$

where r is the range of the function f . There are $2^{2^{2r+1}}$ different CA of range r . In what follows we restrict our study to elementary CA for which $r=1$ and use Wolfram's labeling convention [2].

In the context of CA where time, space and dynamical variables are discrete, we cannot extend directly the definition of Lyapunov exponents [3,4]. Due to the finite interaction range r and to the finite number of states of the variables x_i , the distance between two initially close configurations can increase at most linearly for long times.

Instead of looking at the long time behavior of the distance between two configurations, we can use some hints from the theory of continuous dynamical systems and study the local stability of a single trajectory with respect to a small perturbation (a damage or defect in the configuration). This defect can be readily recovered, or it can freeze being replicated without change, or finally it can propagate increasing the distance between the configurations.

¹ On sabbatical leave from: Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México, Apdo. Postal 70-542, 04510 Mexico D.F., Mexico.

In section 2, we show that the distance between two configurations after the introduction of a defect is given by the Boolean Jacobian matrix of the evolution function F [5,6]. While in the actual evolution of the automaton the defects can interact and annihilate themselves, we are interested in the stability of a single trajectory, and we restrict to the case of non-interacting defects which is equivalent to considering a product of Boolean Jacobian matrices on a trajectory. For the elementary CA it is a Jacobi matrix with elements equal to zero or one on the three main diagonals. This in turn suggests a relation with the product of random matrices of the same type. The MLE of the product of these random matrices shows a transition related to that of directed percolation [7,8].

As reported in section 3, the results of simulations of "chaotic" CA (whose space-time patterns, starting from a random configuration, are disordered and aperiodic) agree quite well with the predictions of the random matrix approximation. Adding a small amount of noise to the evolution of the automaton, our approach reveals the existence of a transition in the space of CA from a "frozen phase" where damage does not spread, to a phase where damage spreads locally with a positive MLE close to the one given by the product of random matrices.

2. Boolean derivatives, defects and random matrices

We are interested in the local stability with respect to a small perturbation, of the time evolution (1) of the configuration x . Let us denote by $z^{(i)}$ a defect at site i as the configuration with elements $z_j^i = \delta_{i,j}$, $j=1, \dots, L$, and $\delta_{i,j}$ the usual Kronecker symbol. The configuration $y(t) = x(t) \oplus z^{(i)}$ differs from $x(t)$ only at site i (the XOR operation \oplus is performed site by site). Depending on F and on the configuration x , the defect $z^{(i)}$ can originate in one time step up to three defects in sites $i-1$, i and $i+1$. Then

$$x(t+1) \oplus y(t+1) = F'_{i,i-1} \wedge z^{(i-1)} \oplus F'_{i,i} \wedge z^{(i)} \oplus F'_{i,i+1} \wedge z^{(i+1)},$$

where $F'_{i,j} = 0, 1$ and the AND operation \wedge is performed between the number $F'_{i,j}$ and each element of the defect $z^{(i)}$. The quantities

$$F'_{i,j} = \frac{\partial x_i(t+1)}{\partial x_j(t)}$$

are the elements of the Boolean Jacobian matrix F' of F . These are defined in terms of the Boolean derivative of the local evolution rule f of eq. (2); for instance

$$\frac{\partial x_i(t+1)}{\partial x_j(t)} = f(x_{i-1}, x_i, x_{i+1}) \oplus f(x_{i-1}, x_i, x_{i+1} \oplus 1).$$

Since f has range 1, $\partial x_i(t+1)/\partial x_j(t)$ vanishes if $|i-j| > 1$, and F' is a Jacobi matrix. If the local evolution rule is expressed in terms of AND and XOR operations (ring sum expansion), the Boolean derivatives extract the linear part of f .

We are interested in the limit of a small initial perturbation to a given trajectory. This limit corresponds in discrete dynamics to the presence of only one point defect. If, during the evolution, m defects appear, we consider m replicas of the system and assign one of the defects to each one. We indicate with $N_i(t)$ the number of replicas carrying the defect $z^{(i)}$ at time t . If for instance, we start at time zero with only one defect at some site i ($N_i(0) = 1$), and the rule allows the spreading of the defects to the sites of the neighborhood at each time step; at $t=1$, $N_{i-1} = N_i = N_{i+1} = 1$; at $t=2$, $N_{i-2} = N_{i+2} = 1$, $N_{i-1} = N_{i+1} = 2$, $N_i = 3$, etc.

The time evolution of the number of defects at site i is given by

$$N_i(t+1) = \sum_j F'_{i,j}(t) N_j(t),$$

or, in matrix form,

$$N(t+1) = F' N(t), \quad (3)$$

where the elements of F' are not interpreted as integer numbers. It is worth noting that $N_i(t)$ is also the number of paths in defect space that reach the site i at time t starting from any defect at time $t=0$.

We define the finite-time MLE $\lambda(T)$ of the map (3) as

$$\lambda(T) = \frac{1}{T} \sum_{t=0}^{T-1} \log \eta(t),$$

is positive for $p \geq \frac{1}{2}$. Our numerical simulations agree well with this mean field approach for $p \geq p_c$, with a maximum deviation of 18% at $p = p_c$.

In the numerical calculation of the Lyapunov exponent λ one needs to renormalize $N(t)$ [10]. This is impossible if N is defined over the integers. However, since the Lyapunov exponents are independent of the choice of the initial vector and of the norm in the ergodic case [11], we let F' (or M) act on some abstract "tangent" space in \mathbb{R}^d , using the usual Euclidean norm. Applying standard methods one obtains the Lyapunov exponents related to the exponential divergence of the norm of the product of F' .

3. Elementary cellular automata

We computed the mean number of ones $\mu(T)$ in the Jacobian matrix and the finite-time MLE $\lambda(T)$ for all the 88 "minimal" elementary CA for $L=256$ and $L=512$ and $5000 \leq T \leq 15000$ starting from random initial configurations with fixed fraction α_0 of live sites, $\alpha_0 = L^{-1} \sum x_i(0)$. The quantities $\mu(T)$ and $\lambda(T)$ are generally already asymptotic for $T \sim 5000$; moreover they show a very weak dependence on α_0 for $0.2 \leq \alpha_0 \leq 0.8$ (only rules 6, 25, 38, 73, 134 and 154 vary between 10% and 20%).

We note that

(i) CA with constant F' independent of the configuration (rules 0, 15, 51, 60, 90, 105, 150, 170 and 204) have $\lambda = \log 3\mu$ with $\mu = 0, \frac{1}{2},$ or 1.

(ii) CA for which all configurations are mapped to a homogeneous state (rules 0, 8, 32, 40, 128, 136, 160 and 168) have $\lambda = -\infty$. The control parameter μ is zero. These are class 1 CA in Wolfram's classification [3].

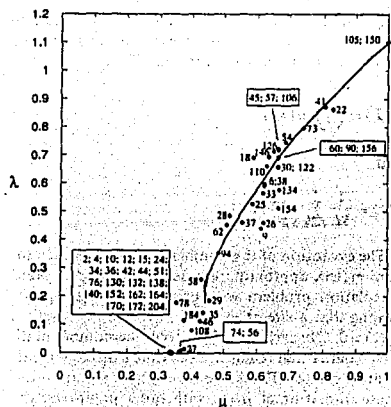
(iii) "Chaotic" class 3 CA with nonconstant F' (rules 18, 22, 30, 41, 45, 54, 106, 110, 122, 126 and 146) have $\mu > p_c$, $\lambda > 0$ and the damage spreads.

The values of the MLE for the "chaotic" CA of cases (i) and (iii) agree well with the random matrix approximation, as shown in fig. 1. This is also trivially true for the automata of case (ii).

For the CA with $0 < \mu < p_c$, λ depends on the initial condition; this is revealed by choosing a special initial condition $N(0)$ having only one nonzero component in the map (3). For those automata whose evolution leads to a nonhomogeneous periodic space

pattern (class 2 CA), the MLE is the logarithm of the largest eigenvalue of the product of the Jacobian matrices over the periodic state. The measured value of λ is always nonnegative. This suggests that the asymptotic state is unstable ($\lambda > 0$) or marginally stable ($\lambda = 0$). One can think that the "freezing" of the evolution occurs because there are no "close" configurations which can be used as an intermediate state towards a more stable state. Therefore, we "heated" the evolution by exchanging the states of a small number s of pairs of randomly chosen sites at each time step. In fig. 2, we show the values of μ and λ for all the minimal CA for which $\lambda \geq 0$ starting with $\alpha_0 = 0.5$ in the presence of a small amount of noise.

After the introduction of noise the CA can be divided roughly in three groups. In the first group with $\lambda = -\infty$, we find all class 1 CA and some class 2 CA (rules 1, 3, 5, 7, 11, 13, 14, 19, 23, 43, 50, 72, 77, 104, 142, 178, 200 and 232). Rules 50, 77 and 178 show very long transients of the order of 15000 time steps. The CA in this group have a small μ in the absence of noise ($\mu < 0.373$). Rule 232, a majority rule,



illustrates well a typical behavior. Configurations $\{0\}^L$ and $\{1\}^L$ are fixed points for this CA. A single defect in these configurations is recovered in one time step. On the other hand, an arbitrary initial configuration will relax in a few time steps to a pattern of strips. By adding a noise as described above, the borders of the strips perform a sort of random motion, thus allowing their merging. Finally, one of the two fixed points is reached, according to the initial density of the configuration.

The second group of CA has a positive MLE. It contains the class 3 CA and rules 6, 9, 25, 26, 28, 33, 37, 38, 57, 62, 73, 94, 134, 154 and 156 which are not class 3 but show local damage spreading. The values of μ and λ are slightly affected by the noise. The CA in this group have $\mu > \rho_c$ and λ close to the curve of the random matrix approximation.

CA in the third group have $\lambda \sim 0$, a value which is never found in the product of random matrices. The CA in this group have an intermediate value of μ ($0.281 < \mu < 0.54$ without noise and $\lambda < \mu < \rho_c$ in the presence of noise). Contrary to the prediction of the random matrix approximation N does not vanish for long times. The CA in this group are rules 2, 4, 10, 12, 15, 24, 27, 29, 34, 35, 36, 42, 44, 51, 56, 58, 74, 76, 78, 108, 130, 132, 138, 140, 152, 162, 164, 170, 172, 184 and 204. Moreover, rules 4, 10, 12, 15, 34, 42, 51, 76, 138, 140, 170 and 204 have conserved additive quantities [12].

In this Letter we have shown how the MLE can be defined for CA using the Boolean derivative. A positive Lyapunov exponent is associated to local damage spreading and on the other hand reflects the exponential growth of paths on directed percolation clusters. For CA with $0 < \mu < \rho_c$ which do not spread damage but have a positive Lyapunov exponent the introduction of a small noise produces a collapse to $\lambda = 0$ or $\lambda = -\infty$. A random matrix model is directly suggested by the CA dynamics and displays a directed percolation phase transition. The same phase transition is observed in the CA rule space in the

presence of a small amount of noise. The extension of our definition of Lyapunov exponent to other discrete systems, and possibly to probabilistic dynamics will be the subject of future investigations.

Acknowledgement

This work sprang from a discussion of one of the authors (S.R.) with G. Vichniac. We are grateful to R. Bulajich, R. Livi and A. Maritan for fruitful discussions and suggestions. R.R. would like to thank the Dipartimento di Fisica, Università di Firenze for hospitality. This work was partially supported by CNR of Italy, and CONACYT and DGAPA-UNAM of Mexico.

References

- [1] D. Stauffer, in: *Chaos and complexity*, eds. R. Livi et al. (World Scientific, Singapore, 1987).
- [2] S. Wolfram, *Rev. Mod. Phys.* 55 (1983) 601.
- [3] S. Wolfram, *Physica D* 10 (1984) 1.
- [4] S. Wolfram, *Phys. Scr.* T 9 (1985) 170; N.A. Packard, in: *Dynamical systems and cellular automata*, eds. J. Daemongot, E. Goles and M. Tchuente (Academic Press, New York, 1985); E. Jen, *Physica D* 45 (1990) 3; M.A. Shereshevsky, *J. Nonlinear Sci.* 2 (1992) 1; P. Grassberger, in: *Appendix, Theory and applications of cellular automata*, ed. S. Wolfram (World Scientific, Singapore, 1986) table 6.
- [5] G. Vichniac, *Physica D* 45 (1990) 63.
- [6] F. Bagnoli, *Boolean derivatives and computation of cellular automata*, *Int. J. Mod. Phys. C*, in press.
- [7] S.R. Broadbent and J.M. Hammersley, *Proc. Cambridge Philos. Soc.* 53 (1957) 629.
- [8] W. Kinzel, in: *Percolation structures and processes*, eds. G. Deutsch, R. Zallen and J. Adler (Hilger, Bristol, 1983).
- [9] L. Balents and M. Kardar, *J. Stat. Phys.* 67 (1992) 1.
- [10] G. Benettin, L. Galgani, A. Giorgilli and J.M. Strelcyn, *Meccanica*, March (1980) 21.
- [11] V.I. Oseledec, *Trans. Moscow Math. Soc.* 19 (1968) 197.
- [12] T. Hattori and S. Takesue, *Physica D* 49 (1991) 295.

Apéndice D

Auto Difusión en el modelo de 9 velocidades

1. 1980

2. 1981

Lattice Gas Self Diffusion in Random Porous Media

Raúl Rechtman

*Depto. de Física, Facultad de Ciencias,
Universidad Nacional Autónoma de México,
Apdo. Postal 70-542, México D. F., Mexico*

Alejandro Salcido

*División de Fuentes de Energía,
Instituto de Investigaciones Eléctricas,
Apdo. Postal 475, 62000 Cuernavaca Mor., Mexico*

July 7, 1994

Abstract

A nine velocities lattice gas on a square two dimensional lattice is the simplest model where conservation of energy is a constraint independent of conservation of mass. We present computer experiments of self diffusion of this lattice gas in a model random porous medium and find the dependence of the diffusion coefficient with energy density and temperature.

1 Introduction

Lattice gas automata where particles move with more than one speed are used in the simulation of heat flow phenomena. [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7] In contrast to the classical HPP [8] and FHP [9] gases with particles moving with the same speed, the conservation of energy is a constraint on the collisions independent of mass conservation.

The thermodynamic equilibrium properties of multi-speed models are not normal meaning that the entropy is not an always increasing function of the energy. [10] Since the energy spectrum per site has a lower and an upper bound, the system has a large degree of order near these bounds and the entropy increases for small energies and decreases when the energy is large. This behavior is similar to that of nuclear spins.[11] The temperature assumes positive and negative values and has an infinite discontinuity in the maximum of the entropy. The simplest lattice gas that exhibits this type of behavior is a nine velocities model defined on a square two dimensional lattice where particles are either at rest, traveling along the axes to their nearest neighbors or on the diagonals to their next-nearest neighbors. For other multi-speed models, for example an hexagonal lattice where particles may travel with different speeds, the same type of thermodynamic behavior holds. In section 2 we define the model and present its thermodynamic equilibrium properties.

From the knowledge of the equilibrium behavior of the nine velocities lattice gas we attempt the study of self-diffusion in an empty container and through a random porous medium. Model porous media bring to mind percolation theory but it is not yet clear that porous media occur only near the percolation threshold.[12] Flows through random porous media have been studied using lattice gases with special attention to the measurement of porosity and Darcy's law using mainly FHP models. [13, 14, 15, 16] Porous media have been modeled by random obstacles such as circles, diamonds or squares. In this paper we chose as obstacles circles of random radius where the area of the pores, that is the space occupied by the gas is far from the percolation threshold. This is discussed in section 3. In section 4 we present our results, mainly the dependence of the diffusion coefficient on energy density and temperature. We end with some conclusions.

2 Equilibrium thermodynamics

We consider a square two-dimensional lattice containing V sites. The state of the system at time t is specified by the set of occupation numbers $\{n(c_k, r, t)\}$ where $n(c_k, r, t)$ is 1 if there is a particle at site r with velocity c_k and 0 otherwise. The set of nine velocities is labeled in such a way that $k = 0$ corresponds to a particle at rest, $k = 1, \dots, 4$ to the slow particles moving along the axes and $k = 1', \dots, 4'$ corresponds to the fast particles moving along the diagonals. That

is,

$$e_k = \begin{cases} 0 & k = 0 \\ 1 & k = 1, \dots, 4 \\ \sqrt{2} & k = 1', \dots, 4' \end{cases} \quad (1)$$

Slow particles have an energy $e_k = 1/2$ while fast ones have an energy $e_{k'} = 1$.

The equilibrium thermodynamics of this model has been discussed elsewhere [10] so we briefly present some results in the microcanonical ensemble where the total energy E and the total number of particles N are fixed. The total momentum is zero. Let $n = N/V$ be the occupation number, $n_k = N_k/V$ the occupation number in direction k where N_k is the number of particles moving in direction k and $e = E/V$ the energy density. Then

$$n = \sum_k n_k, \quad e = \sum_k e_k n_k. \quad (2)$$

The particles obey a Fermi exclusion principle. For a fixed average occupation number $n = N/V$ there exists a lower and an upper bound on the energy density e denoted by e_F (Fermi energy density) and e_M respectively given by

$$e_F = \begin{cases} 0 & 0 \leq n \leq 1 \\ [2cm] \frac{n-1}{2} & 1 \leq n \leq 5, \\ [2cm] n-3 & 5 \leq n \leq 9 \end{cases} \quad (3)$$

$$e_M = \begin{cases} n & 0 \leq n \leq 4 \\ [2cm] \frac{n+4}{2} & 4 \leq n \leq 8, \\ [2cm] 6 & 8 \leq n \leq 9 \end{cases} \quad (4)$$

For example if $n = 3$ the minimum energy configuration has a particle at rest and the other two moving along the axes so that $e_F = 1$ and the maximum energy configurations has three fast particles so that $e_M = 3$.

The entropy density s is given by

$$s = - \sum_k [n_k \ln(n_k) + (1 - n_k) \ln(1 - n_k)]. \quad (5)$$

For e and n fixed the equilibrium occupation numbers $\{\bar{n}_k\}$ are found by maximizing s subject to (2). The equations of state for β the inverse temperature, P/β P the pressure and μ/β , μ the chemical potential follow. In figure 1 we show the equilibrium occupation numbers for $n = 2$.

For n fixed the entropy density s has a maximum at $e^* = 2n/3$ is an increasing function for $e \in (e_F, e^*)$ and a decreasing function for $e \in (e^*, e_M)$. Hence, the temperature is positive for $e \in (e_F, e^*)$, negative for $e \in (e^*, e_M)$ and goes to infinity at $e = e^*$ (see ref. [10]).

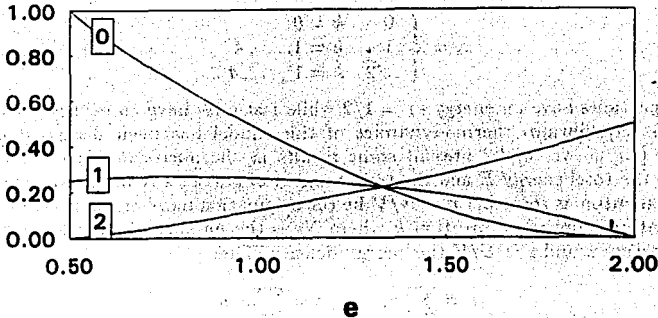


Figure 1: Equilibrium occupation numbers for $n = 2$ as a function of e , $e_F < e < e_M$. The curves labeled by 0, 1, 2 correspond to \bar{n}_0 , \bar{n}_1 and \bar{n}_2 .

3 Model porous media

Porous media (PM) are a great challenge due to their complexity.[17] When discussing flows through PM, percolation theory seems to be relevant since the fluid must be able to pass through the media, yet it is not clear if the fractal nature of the infinite cluster at the percolation threshold determines the properties of PM. [12] Flow through porous media is essentially a three dimensional problem, therefore modeling a two dimensional PM requires some imagination. For lattice gas flows in two dimensions PM have been simulated with pictures of cuts of three dimensional natural porous rocks. [15] Also, in order to have a well-defined and reproducible model random obstacles like overlapping squares [13], overlapping circles [14] and rhombi [16] have been used.

The obstacles in these model PM must be large enough to be considered as macroscopic, small enough so that a large number of them may fit in a lattice of reasonable size and the void spaces sufficiently large to allow the lattice gas to behave as a continuum.

As candidates for a model porous medium we chose different types of clusters. The first is site percolation on a square lattice where clusters are formed by nearest and next-nearest neighbor sites, the others are variants of the Swiss cheese model of continuum percolation.[20, 19] Percolation theory studies the number and distribution of sizes of clusters of marked sites for a given fraction of randomly marked sites p . For site percolation we find that the percolation threshold p_c is $p_c \sim 0.406(2)$ in 1000×1000 lattices where the number in parenthesis is the error in the last significant digit in agreement with previous calculations.[20] The set of sites in the percolation cluster M may be decon-

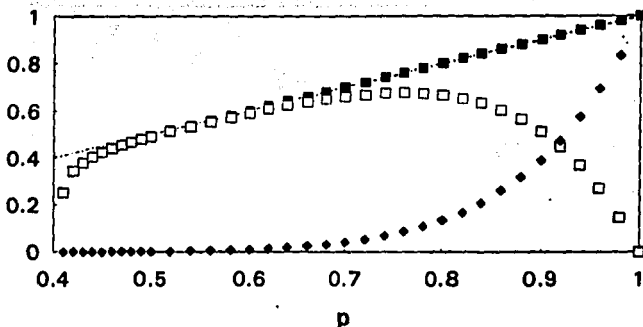


Figure 2: Site percolation. The full squares show m , the open ones b and the full diamonds i all as function of p . The dotted line is the identity function. These simulations were performed on a $1,000 \times 1,000$ sites lattice.

posed as $M = B \cup I$ where B is the set of sites on the border and I the set of interior sites. Then $m = b + i$ where m , b and i are the fractions of sites on the percolation cluster, on its border and on its interior respectively. Near the percolation threshold i is close to 0 and increases slowly as p increases. This behavior is shown in figure 2. This model is not suitable for our purposes since there is hardly any interior where the lattice gas can be considered as a continuum, except for p close to 1.

In the next two models, a fraction $1 - p$ of sites is filled with circles of radius r , the first with r constant and small compared to the side of the lattice and the second one with r chosen at random between 2 and some value r_{max} again small with respect to the side of the lattice. These circles are the obstacles of the model PM. For these models we find from simulations that $0.31 < p_c < 0.42$ for different r_{max} . If $p > p_c$ the gas may flow around the obstacles. In figure 3 we show the values of m , b and i for the latter model. The border does not contribute significantly to the mass m of the percolating cluster. This seems to be a better model since the space occupied by the fluid may be considered as a continuum. The same qualitative result is found for circles of constant radius.

The last two models are the inverse of those mentioned before, that is, the gas flows through the circles of radius r , one with constant r the other one with randomly chosen r smaller than some r_{max} . A fraction of sites p is occupied by these circles. We found from simulations that $0.58 < p_c < 0.69$ for different r_{max} . Again, the border does not contribute significantly to the total mass m . Obstacles of any shape may be considered. In the simulations that follow we chose the third model; the obstacles are circles of random radius.

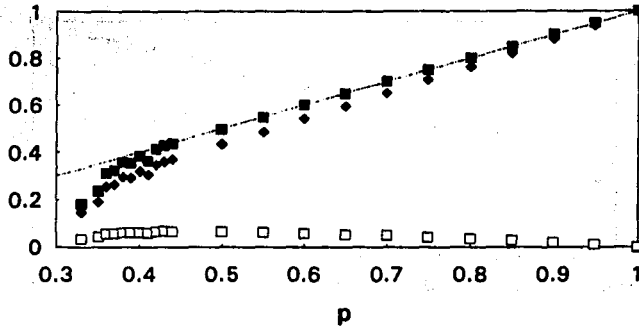


Figure 3: Percolation on a square lattice with circles of random radius r as obstacles with $2 < r < 20$. The full squares show m , the open ones b and the full diamonds i all as function of p . The dotted line is the identity function. These simulations were performed on a $1,000 \times 1,000$ sites lattice

4 Diffusion in a model porous medium

In the experiments we used a 200×200 sites lattice in which a fraction p of sites is occupied by circles of random radius r with $2 < r < 10$. All experiments were performed at fixed values of the average energy per site ϵ and occupation number n that define a thermodynamic equilibrium state characterized by the occupation numbers of rest, slow and fast particles \bar{n}_0 , \bar{n}_1 and \bar{n}_2 as mentioned in section 2. In the initial state the particles are thrown at random in such an equilibrium state. A small number of tagged particles (~ 200) are initially inside a small circle of radius 10 which is (obstacles permitting) more or less in the center of the lattice. The lattice gas evolves as usual, all collisions are considered. If a tagged particle participates in a collision one of the possible outcomes is chosen and the tagged particle is assigned at random to any one of the outgoing particles. Particles invert their velocities upon a collision with an obstacle.

The diffusion coefficient D was calculated from the relation

$$\langle r^2(t) \rangle = 4Dt \quad (6)$$

where t is time and $\langle \cdot \rangle$ is an ensemble average over the displacement of the tagged particles. Experimentally the ensemble consisted of twenty repetitions and D was estimated by fitting a straight line to the experimental data with $100 < t < t_{max}$, and t_{max} chosen in such a way that the tagged particles do not reach the sides of the lattice (for $n = 2$ and $p = 1$, $t_{max} = 700$).

PAGINACION VARIA

COMPLETA LA INFORMACION

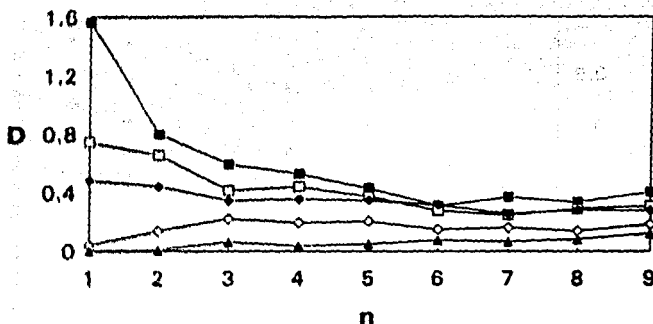


Figure 4: Dependence of the self Diffusion coefficient D on the occupation number n . The full squares correspond to $p = 1.0$, the open ones to $p = 0.9$, the full diamonds to $p = 0.8$, the open ones to $p = 0.7$ and the full triangles to $p = 0.6$. The lines are included to guide the eye.

In figure 4 we show the diffusion coefficient as a function of the mean occupation number n for different values of p with $\epsilon = 2n/3$. At this value of ϵ the nine directions are equally probable and $T = \infty$ where T is the temperature. For $p = 1$ we see that D decreases as n increases but this tendency is reversed for small p . The collisions of particles with obstacles could be responsible for this behavior. For small n and p tagged particles go back and forth between obstacles and diffuse slowly. As n increases the probability that a tagged particle collides before reaching an obstacle increases and hence diffuses faster. There must be a value of p between 0.7 and 0.8 for which D does not depend on n .

In figure 5 we show the dependence of the diffusion coefficient D on the energy per site ϵ with $\epsilon_p \leq \epsilon \leq \epsilon_M$ for different values of p and $n = 2$. For $\epsilon = 3$ we found the same qualitative behavior.

The knowledge of the thermodynamic equilibrium behavior of the lattice as described in section 2 allows the determination of the dependence of D on $-\beta$, the (minus) inverse temperature as shown in figure 6 for $n = 2$ or on any other thermodynamic quantity. The quantity $-\beta$ is an increasing function of ϵ which is zero when $\epsilon = 2n/3$. The values of $-\beta$ shown in the figure correspond to $0.65 \leq \epsilon \leq 1.35$.

5 Conclusions

We have shown how a nine velocities lattice gas can model self diffusion in a model of a porous medium. For such a model we chose a lattice with overlapping

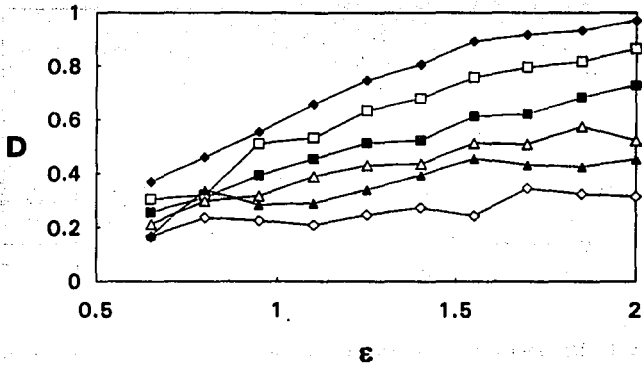


Figure 5: Dependence of D on ϵ for different values of p and $n = 2$. The bottom curve corresponds to $p = 0.5$, the next ones increment p by 0.1 up to the top curve for $p = 1.0$. The lines are included to guide the eye.

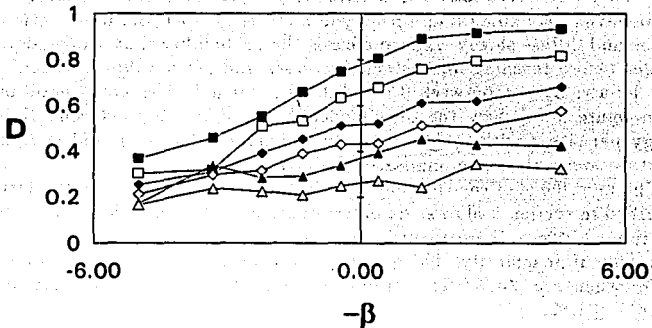


Figure 6: Dependence of D on β for different values of p and $n = 2$. Again the bottom curve corresponds to $p = 0.5$, the next one to $p = 0.6$ up to the top curve that corresponds to $p = 1.0$. The lines are included to guide the eye.

circles of random radius and random position as obstacles. The fraction of sites where the gas can flow, p was chosen sufficiently far from the percolation threshold where the relation between the mass of the infinite cluster and p is linear as shown in figure 3. We expect normal diffusion so that the diffusion coefficient can be determined from equ. (6). The knowledge of the equilibrium properties of the lattice gas allows us to measure D with respect to the thermodynamic parameters as shown in figure 6.

For $p = 1$ the diffusion coefficient D may be found theoretically using linear response theory.[21, 22, 23, 7] The evaluation of the transport coefficients follows from the knowledge of the linearized Boltzmann collision term which depends on the type of collisions taken into account. In the experiments we reported above all the possible collisions occur and hence the evaluation of the linearized Boltzmann collision term is a complex task. A preliminary calculation considering only two-body collisions between tagged and untagged particles and $T = \infty$ leads to a value of D smaller than the experimental values. On the other hand, a simple mean field type calculation does not seem to explain the results for different values of p .

Acknowledgments

This research was supported in part by the project "Dinámica y Estructura de Sistemas Complejos" of the DGAPA-UNAM.

References

- [1] D. d'Humières, P. Lallemand, U. Frisch, *Europhys. Lett.* **2** (1986) 291.
- [2] D. d'Humières, P. Lallemand, *Helvetica Physica Acta* **59** (1986) 1231.
- [3] S. Chen, M. Lee, K. Zhao, G. D. Doolen, *Physica* **37D** (1989) 42.
- [4] B. Chopard, M. Droz, *Pys. Lett.* **126A** (1988) 476.
- [5] D. Bernardin, O. E. Sero-Guillaume, C. H. Sun, in *Discrete Models of Fluid Dynamics*, A. A. Alves editor, World Scientific, Singapore, 1991.
- [6] S. Chen, H. Chen, G. D. Doolen, S. Gutman, M. Lee, *J. Stat. Phys.* **62** (1991) 1121.
- [7] S. P. das, M. H. Ernst, *Physica A* **187** (1992) 191.
- [8] H. Hardy, Y. Pomeau, O. de Pazzis, *J. Math. Phys.* **14** (1973) 1736.
- [9] U. Frisch, B. Hasslacher, Y. Pomeau, *Phys. Rev. Lett.* **56** (1986) 1505; U. Frisch, D. d'Humières, B. Hasslacher, P. Lallemand, Y. Pomeau, J. P. Rivet, *Complex Systems*, **1** (1987) 649.

- [10] R. Rechtman, A. Salcido, Thermodynamic Entropy and Temperature of a Nine Velocities Lattice Gas, in *Discrete Models of Fluid Dynamics*, Figueira da Foz, Portugal, A. A. Alves editor, World Scientific Singapore, 1991.
- [11] N. F. Ramsey, *Phys. Rev.* **103** (1956) 20.
- [12] E. Guyon, C. D. Mitescu, J-P. Hulin, S. Roux, *Physica D* **38**, (1989) 172.
- [13] D. H. Rothman, *Geophysics* **53** (1988) 509.
- [14] U. Brosa, D. Stauffer, *J. Stat. Phys.* **63** (1991) 405.
- [15] S. Chen, K. Diemer, G. D. Doolen, K. Eggert, C. Fu, S. Gutman, B. J. Travis, *Physica D* **47** (1991) 72.
- [16] G. A. Kohring, *J. Stat. Phys.* **63** (1991) 411.
- [17] F.A.L. Dullien, *Porous Media: Fluid Transport and Pore Structure*, 2nd ed., Academic Press, New York, 1992.
- [18] D. Stauffer *Introduction to Percolation Theory*, Taylor & Francis, London, 1985.
- [19] A. Bunde, S. Havlin, Percolation I, in A. Bunde, S. Havlin (eds.), *Fractals and Disordered Systems*, Springer-Verlag, Berlin, 1991.
- [20] D. Stauffer, *Introduction to Percolation Theory*, Taylor & Francis, 1985.
- [21] M. H. Ernst in *Fundamental Problems in Statistical Mechanics VII*, H. van Beijeren editor, Elsevier, 1990.
- [22] M. H. Ernst, J. W. Dufty, *J. Stat. Phys.* **58** (1990) 57.
- [23] M. H. Ernst, S. P. Das, *J. Stat. Phys.* **66** (1992) 465.