



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

Unidad Iztapalapa

División de Ciencias Básicas e Ingeniería

Posgrado en Ciencias y Tecnologías de la Información

Idónea Comunicación de Resultados

Propuesta de un Sistema Paralelo para la Creación de Redes Porosas sujetas a Restricciones Geométricas en Arquitecturas Multicore

presenta:

Ing. Angel González Méndez

para obtener el Grado de:

Maestro en Ciencias
(Ciencias y Tecnologías de la Información)

Asesor del Proyecto:

Dra. Graciela Román Alonso

México, D.F.

Febrero de 2015

Resumen

El estudio de los medios porosos, con el fin de entender las características específicas de los materiales o procesos capilares de los mismos, es de gran importancia para un gran número de aplicaciones industriales. El Modelo Dual de Sitios y Enlaces (DBMS, por sus siglas en inglés) ha sido una base importante en el desarrollo de simuladores (in-silico) de medios porosos. Bajo este enfoque, se tiene que un material poroso se compone por sitios(cavidades, protuberancias) los cuales están interconectados a través de enlaces; cada sitio se interconecta con una serie de enlaces y cada enlace interconecta a dos sitios. En la actualidad, varios algoritmos computacionales para la simulación de redes porosas se han implementado, sin embargo, solo unos cuantos validan el cumplimiento de las restricciones geométricas que surgen al conectar dos enlaces adyacentes de un mismo sitio, en donde no debe existir interferencia espacial entre ellos. El validar este tipo de restricciones nos ayuda a crear redes porosas más realistas; sin embargo, la complejidad algorítmica que conlleva el cumplimiento de estas restricciones hace que el tiempo de construcción de una red aumente. En este trabajo, se parte de un algoritmo secuencial desarrollado como parte del Proyecto Interdisciplinario de los Departamentos de Ing. Eléctrica y de Química de la UAM-IZT, el cual genera redes porosas que incluyen las restricciones geométricas; el inconveniente de este algoritmo es que requiere de largo tiempo para construir redes porosas grandes. Para solucionar dicho aspecto, se proponen dos versiones paralelas de construcción de redes porosas, validando las restricciones geométricas entre todos los poros, basándonos en el DBSM. El objetivo de la primer propuesta es paralelizar el algoritmo secuencial anteriormente desarrollado, mientras que la segunda propuesta aplica el Método de Monte Carlo paralelo en la construcción de una red porosa. Nuestras propuestas paralelas fueron implementadas bajo un modelo de memoria compartida, usando OpenMP para crear un conjunto de hilos (tareas computacionales) los cuales trabajan de forma simultánea en espacios aleatorios e independientes.

Índice general

Resumen	III
Índice de figuras	VII
1. Introducción	1
2. Simulación de Redes Porosas	5
2.1. Modelado de Redes Porosas	5
2.2. Principio de Construcción	7
2.3. Restricciones Geométricas	7
3. Objetivos	9
3.1. Objetivos Particulares	9
4. Trabajo Relacionado	11
4.1. Algoritmos Secuenciales	11
4.1.1. Algoritmo BiaSED	11
4.1.2. Algoritmo NoMISS	12
4.2. Algoritmos Paralelos	14
4.2.1. Algoritmo Paralelo BiaSED	14
4.2.2. Algoritmo Paralelo S-NoMISS	15
4.2.3. Algoritmo Paralelo D-NoMISS	16
4.3. Conclusiones	17
5. Construcción Secuencial sujeta a RG	19
5.1. Solución Básica Aleatoria	19
5.2. Solución Híbrida	20
5.2.1. Sembrado de Clusters	20
5.2.2. Asignación de Enlaces	23
5.3. Generación de una red porosa válida	23
5.4. Mejoramiento de la isotropía	24
6. Construcción Paralela sujeta a RG	27
6.1. Distribución de la red porosa	27

6.2.	Solución Paralela Aleatoria	29
6.2.1.	Generación de una Red Porosa Válida	29
6.2.2.	Mejoramiento de la isotropía	29
6.3.	Solución Paralela Híbrida	29
6.3.1.	Inicialización	29
6.3.2.	Sembrado de Clusters	29
6.3.3.	Asignación de Enlaces	31
6.3.4.	Generación de una red porosa válida	33
6.3.5.	Mejoramiento de la isotropía	34
7.	Resultados	35
8.	Conclusiones y Trabajo Futuro	41
	Referencias	43

Índice de figuras

2.1. Representación bidimensional de un material poroso mediante el MDSE	6
2.2. Red porosa con los sitios representados por esferas y los enlaces representados por cilindros, con $C = 6$	6
2.3. Traslape entre las distribuciones F_B y F_S	7
2.4. Representación del PC y RG en un sitio con dos enlaces vecinos	8
4.1. Construcción de un cluster de tamaño $3 \times 3 \times 3$ con el algoritmo NoMISS	13
4.2. Distribución de una red porosa entre 8 nodos o procesos MPI	15
5.1. Red porosa inicializada con L^3 sitios y $3 \cdot L^3$ enlaces	20
5.2. Sembrado de un cluster de tamaño $3 \times 3 \times 3$	21
5.3. Red Porosa después del proceso de siembra de clusters	22
5.4. Ejemplo de un intercambio válido de dos sitios (a) selección y (b) intercambio	25
5.5. Ejemplo de un intercambio válido de dos enlaces (a) selección y (b) intercambio	25
5.6. Ejemplo de un intercambio inválido de dos sitios (a) selección y (b) intercambio	26
5.7. Ejemplo de un intercambio inválido de dos enlaces (a) selección y (b) intercambio	26
6.1. Red porosa dividida en ocho subredes; $N = 2 \cdot 2 \cdot 2$	28
6.2. Distribución de la Red para (a) 4 hilos, (b) 8 hilos, and (c) 64 hilos	28
6.3. (a) Origen en $(0, 0, 0)$ y (b) cambio de origen a $(0, 2, 0)$	30
7.1. Tiempos de ejecución de NoMISS, BSGR y BSGR paralelo, bajo diferentes valores de Ω (escala logarítmica)	36
7.2. Tiempos de ejecución de BSGR Paralelo utilizando de 2 a 16 hilos (escala logarítmica)	37
7.3. Redes porosas que permiten violaciones a las GR , con $L = 100$ y $\Omega = 0,15$, obtenidas con (a) BSGR y (b) BSGR Paralelo utilizando 8 hilos	38
7.4. Redes porosas libre de violaciones a las GR , con $L = 100$ y $\Omega = 0,15$, obtenidas con (a) BSGR and (b) BSGR Paralelo utilizando 8 hilos	38

7.5. Redes porosas después de aplicar 2,000 MCs adicionales, con L Pore networks after the application of 2000 additional MCs , con $L = 100$ y $\Omega = 0,15$, obtenidas con (a) BSGR and (b) BSGR Paralelo utilizando 8 hilos	39
---	----

Capítulo 1

Introducción

Por años se han utilizado las computadoras como herramientas para la solución, aproximación o simulación de problemas científicos reales, los cuales tienen una o varias de las siguientes características: son complejos, requieren de un gran número de cálculos o manipulan grandes volúmenes de datos. Lo anterior fue la razón por la cual nació la computación científica la cual es una actividad multidisciplinaria en la cual se hace uso de métodos y técnicas computacionales para dar soluciones exactas o aproximadas con la premisa de que al utilizar las computadoras el tiempo para obtener resultados es menor.

La simulación por computadora es una herramienta altamente utilizada debido a que nos permite obtener soluciones aproximadas sobre escenarios de la vida real, varios ramas de la ciencia se auxilian de simulaciones por computadora para lograr mejores resultados en experimentos reales basándose en la información obtenida de simulaciones. Cuando se habla de simulación por computadora, está inherente que se requiere de un modelo el cual nos ayude a abstraer características y limitaciones de un problema real. Adicionalmente de que la simulación por computadora nos puede permitir generar experimentos con mayor exactitud, ésta también nos puede ayudar a disminuir riesgos y ahorrar recursos.

En particular este proyecto hace énfasis en la simulación de materiales porosos, donde tal y como su nombre lo dice son materiales que tienen poros o huecos, estos poros son de distintos tamaños y se encuentran distribuidos en todo el material con la peculiaridad de que dichos poros se encuentran conectados entre sí. Debido a las características que tienen los materiales porosos son altamente utilizados en la industria, al estudiar la estructura y propiedades de estos materiales y adicionalmente con la simulación por computadora se pueden encontrar nuevas aplicaciones y usos industriales.

Varios métodos para la simulación de redes porosas han sido propuestos; sin embargo, muy pocos validan el cumplimiento de las restricciones geométricas que surgen

al conectar dos o mas poros adyacentes, en donde no debe existir interferencia espacial entre ellos. El validar este tipo de restricciones nos ayuda a crear redes porosas más realistas, pero el procesamiento de millones o billones de datos que pueden representar los poros de una red, junto con la complejidad algorítmica para hacer respetar las restricciones geométricas, se vuelve un reto computacional importante.

Por lo general la computación científica hace uso del computo de alto rendimiento(computo paralelo) a través de modelos de programación paralela, los cuales permiten el uso eficiente de los recursos computacionales para disminuir el tiempo en la obtención de resultados. El cómputo paralelo fue impulsado gracias a los avances tecnológicos como lo fueron las computadoras multi-procesador o los primeros clusters(Beowulf), en ambas arquitecturas hubo un avance significativo; en la primera fue la incorporación de más de un procesador en una misma tarjeta y en la segunda fue el uso de la capacidad de computo de computadoras independientes a través de su interconexión(cluster). En la actualidad el computo paralelo va cobrando mayor fuerza y además conforme pasa tiempo se está volviendo más accesible y por lo mismo se está aplicando en un mayor número de áreas de conocimiento. En particular, para aplicar el computo paralelo en un problema, se requiere elegir una arquitectura y un técnica de programación. Las arquitecturas más utilizadas para el cómputo paralelo o de alto rendimiento son: multi-procesador, multi-núcleo, gpus, clusters y grids. Respecto a técnicas de programación, las podemos dividir en 3 grandes grupos: la programación con memoria compartida, la programación con memoria distribuida o programación híbrida.

Cuando se utilizan arquitecturas multi-núcleo, la mejor opción de programación paralela se realiza a través de la creación de hilos(tareas computacionales), para que las unidades de procesamiento puedan acceder a la memoria de manera compartida. Dos de las tecnologías más utilizadas para el manejo de hilos son: Posix Threads[13] y OpenMP[6], ambos siguen el modelo fork-join, sin embargo OpenMP proporciona una interfaz de alto nivel que permite al programador concentrar la mayor parte de su esfuerzo en resolver el problema de aplicación y no en aspectos técnicos de creación explícita de hilos y manejo de mecanismos de sincronización, que en ocasiones generan errores que no se relacionan con el problema que se quiere resolver. Además OpenMP es un estándar avalado por diversas empresas internacionales y se encuentra soportado por los principales compiladores de C/C++ y Fortran.

Este trabajo contribuye a la simulación paralela de redes porosas que consideran el cumplimiento de restricciones geométricas entre poros adyacentes, usando una arquitectura multi-núcleo y OpenMP. Se proponen dos algoritmos paralelos que permiten construir redes porosas haciendo que varios hilos de ejecución trabajen en diferentes regiones de una red porosa cúbica para disminuir el tiempo de simulación. El alcance de este proyecto se enfoca en la comparación de esas dos propuestas.

En el Capítulo siguiente se presentan los conceptos básicos relacionados con la simulación de las redes porosas. Posteriormente, el Capítulo 3 presenta los objetivos de este trabajo. En el Capítulo 4 se muestra en forma de resumen el trabajo relacionado en cuanto a algoritmos para la construcción de redes porosas que se basan en MDSE y las ventajas del cómputo paralelo sobre sistemas de memoria compartida utilizando arquitecturas multi-core. En el Capítulo 5 se presentan dos algoritmos secuenciales para la creación de redes porosas sujetas a las restricciones geométricas. En el Capítulo 6 se presenta la paralelización de los dos algoritmos secuenciales para la creación de redes porosas sujetas las restricciones geométricas. En el Capítulo 7 se presentan la plataforma de pruebas y los resultados obtenidos así como una análisis de los mismos; por último, en el Capítulo 8 se presentan las conclusiones y el trabajo futuro.

Capítulo 2

Simulación de Redes Porosas

2.1. Modelado de Redes Porosas

Existen diversos modelos para la simulación de materiales porosos, algunos se enfocan en los procesos o fenómenos que suceden dentro de los mismos y otros en la representación del material por sí mismo, este último tiene la ventaja de que además de poder conocer las características específicas del material también podemos simular procesos y fenómenos dentro del mismo. Uno de los modelos teóricos más utilizados para obtener una adecuada descripción de la estructura y propiedades de un medio poroso es el Modelo Dual de Sitios y Enlaces(MDSE)[2]; en este modelo existen dos tipos de huecos o poros: sitios y enlaces, donde cada sitio está conectado con un determinado número de enlaces, C , llamado conectividad de la red y cada enlace permite la conexión entre dos sitios.

Un ejemplo del Modelo Dual de sitios y Enlaces(MDSE) se puede observar en la Figura 2.1, en la cual se muestra un medio poroso representado por sitios y enlaces interconectados. Existen varias aplicaciones relacionadas con el MDSE algunas de ellas se reportan en [8] y [10]. En particular los algoritmos presentados en [2], [3] y [4] para la creación de redes porosas y en [7] para la simulación de la porosimetría del mercurio se basan en el MDSE [1].

En este trabajo y como también se utiliza en [2], [3] y [4], definimos una red porosa como una matriz cúbica la cual está formada por un conjunto de elementos; cada elemento contiene un sitio conectado a tres enlaces directos, el sitio también se conecta a tres enlaces de forma indirecta a través de los sitios vecinos, siguiendo una topología tipo toro tridimensional. Por esto se tiene que cada sitio está conectado directa o indirectamente con seis enlaces, es decir la conectividad de la red es de $C = 6$. El tamaño de la red se caracteriza por el parámetro L , el cual representa el número de sitios a lo largo de un borde de la matriz cúbica. Con este modelo se tiene que una red de tamaño L contiene L^3 sitios y $3L^3$ enlaces (como se muestra en la Figura 2.2).

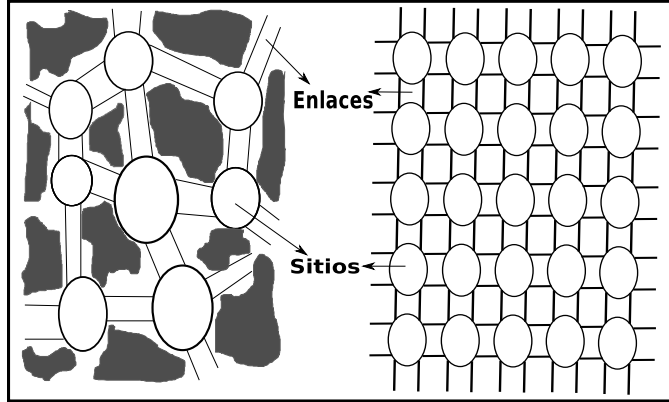


Figura 2.1: Representación bidimensional de un material poroso mediante el MDSE

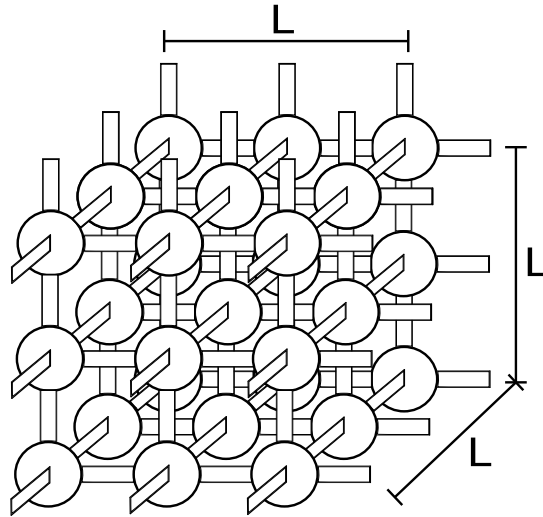


Figura 2.2: Red porosa con los sitios representados por esferas y los enlaces representados por cilindros, con $C = 6$

2.2. Principio de Construcción

Un importante aspecto a considerar en la construcción de redes porosas es el Principio de Construcción (*PC*) en el cual se establece que: El tamaño de cada sitio debe ser mayor o al menos igual al tamaño de cualquiera de los enlaces conectados al mismo. Los tamaños de los poros se representan a través de dos distribuciones normales $F_S(R_S)$ para los sitios y $F_B(R_B)$ para los enlaces. R_S es el radio de la esfera que representa a los sitios y R_B es el radio del cilindro que representa a los enlaces. Dada las anteriores distribuciones se sabe que si $F_S(R_S)$ y $F_B(R_B)$ se traslapan, algunos sitios y enlaces tendrán valores iguales. A esta intersección se le conoce como traslape Ω (Figura 2.3). El traslape representa la dificultad de que los sitios y enlaces se conecten de una forma válida, respetando el *PC*. Si $\Omega = 0$ esto significa que cualquier enlace es menor que cualquier sitio en términos de tamaño lo que significa que la construcción de una red de poros sería muy sencilla. Por el contrario si Ω es muy cercano a 1, $F_S(R_S)$ y $F_B(R_B)$ serían muy similares por lo que la asignación de enlaces a los sitios estaría más restringida.

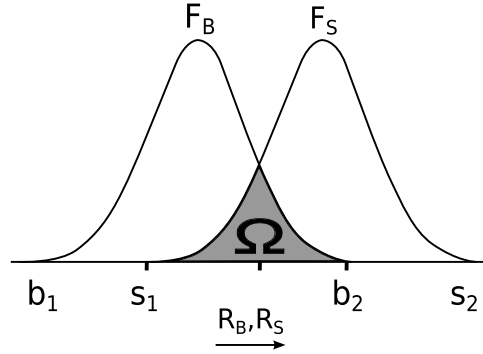


Figura 2.3: Traslape entre las distribuciones F_B y F_S

2.3. Restricciones Geométricas

En la mayor parte de los trabajos relacionados con la creación de redes porosas solo se basan en el *PC* para determinar si una red porosa es válida; sin embargo para obtener redes porosas que se asemejen más a la realidad se deben considerar las Restricciones Geométricas (*RG*) entre sitios y enlaces, lo que complementa al *PC*. Al obtener redes porosas más reales las simulaciones tienen mayor exactitud y los experimentos basados en las mismas tienen mayor probabilidad de éxito.

Para que una red porosa esté sujeta a *RG* se debe cumplir que para cada enlace conectado aun sitio determinado no debe solaparse con otro enlace conectado al mismo sitio, tal y como se muestra en la Figura 2.4. Las restricciones geométricas se aplican cuando se crea una red porosa consistente, mediante el establecimiento de que

para cada par de enlaces vecinos conectados a un sitio, la suma de los cuadrados de sus radios debe ser menor (o a lo más igual) que el cuadrado del sitio. Esto se expresa en la Ecuación 2.1, donde i, j varían desde 1 hasta 6.

$$R_B^2[i] + R_B^2[j] \leq R_S^2 \quad (2.1)$$

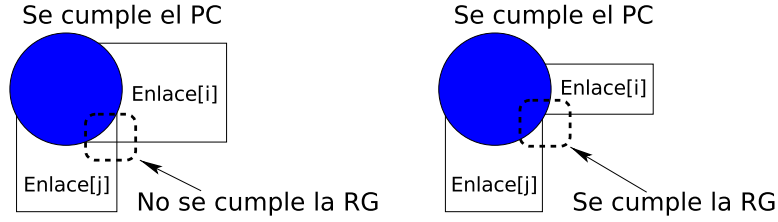


Figura 2.4: Representación del *PC* y *RG* en un sitio con dos enlaces vecinos

La creación de redes porosas de gran tamaño requiere de grandes recursos de cómputo debido a que un medio poroso está compuesto por millones, billones, trillones o más poros por unidad de masa, es por eso que se requieren de soluciones eficientes para poder simular redes porosas de gran tamaño. Debido al volumen de datos que se maneja en las redes porosas las capacidades de cómputo que se necesitan son realmente grandes, lo que se traduce a tiempos de ejecución muy largos. Para dar solución a este problema se pueden aplicar soluciones paralelas para la creación de redes porosas y de esta forma disminuir los tiempos de ejecución y aprovechar las arquitecturas actuales, algunos ejemplos de implementaciones paralelas se pueden ver en [4].

Capítulo 3

Objetivos

El objetivo principal de este trabajo es proponer e implementar un sistema eficiente para la simulación de Redes Porosas sujetas a Restricciones Geométricas. En el presente trabajo se plantea el desarrollo de un sistema paralelo que saque provecho de las ventajas de las arquitecturas multicore y la programación paralela sobre memoria compartida para acelerar el tiempo de construcción de las redes porosas.

3.1. Objetivos Particulares

- Diseñar e implementar un algoritmo para el particionamiento dinámico de datos en un sistema multi-core.
- Proponer una política de distribución dinámica de datos para permitir la transferencia de poros entre los procesadores.
- Obtener una comparación de los métodos paralelos propuestos identificando sus ventajas y desventajas.

Capítulo 4

Trabajo Relacionado

Existen varios algoritmos propuestos para la creación de redes porosas que siguen el MDSE y que solo están sujetos al *PC*. Entre los más sobresalientes están el método BiaSED[1] y el algoritmo NoMISS[3]. En este capítulo se presentarán ambos algoritmos junto con sus respectivas versiones paralelas, descritas en [4], las cuales destacan debido a que permiten crear redes porosas de gran tamaño.

4.1. Algoritmos Secuenciales

En esta sección se presentan dos algoritmos secuenciales para la creación de redes porosas sujetas únicamente al *PC*. El primer algoritmo es de tipo iterativo, que hace uso del Método de Monte Carlo [15] y el segundo algoritmo es un algoritmo voraz (o ávido) que construye eficientemente redes porosas.

4.1.1. Algoritmo BiaSED

El algoritmo BiaSED (Biased Simulation Early Design) se describe completamente en [1] y [4]. Se define como un algoritmo iterativo que se compone de tres pasos fundamentales.

Paso 1: Se generan aleatoriamente los tamaños de los sitios (L^3 tamaños de radios de sitios) y los enlaces ($3 * L^3$ tamaños de radios de enlaces), en base a las distribuciones $F_S(R_S)$ and $F_B(R_B)$. Durante la generación, los valores son asignados al azar dentro del espacio cúbico de una red porosa. La asignación se repite hasta que la red esté completamente inicializada. El resultado de este primer paso es una red porosa que probablemente no cumpla con el *PC*, especialmente cuando hay un alto traslape entre $F_S(R_S)$ y $F_B(R_B)$.

Paso 2: Este consiste en la ejecución de una serie de Pasos de Monte Carlo (*MCs*) hasta que se genera una red válida. Un paso de Monte Carlo involucra $4L^3$ intercambios de tamaños de poros, lo anterior para lograr que las conexiones entre los poros sean válidas, es decir, que cumplan con el *PC*. Cada uno de los intercambios se hace cambiando el tamaño de dos sitios o dos enlaces, los cuales se seleccionan aleatoriamente; un intercambio es válido si y solo si el número de violaciones al *PC* es menor o igual al número de violaciones existentes antes del intercambio, de lo contrario el intercambio es rechazado.

Paso 3: Se aplica un número adicional de *MCs* para mejorar la isotropía de la red porosa. El mejoramiento de la isotropía hace que las redes adquieran una distribución de poros más representativa de las redes porosas reales.

4.1.2. Algoritmo NoMISS

NoMISS (No Mistake Initial Seeding Situation) es un algoritmo voraz que trabaja con pequeñas soluciones válidas y que a través de iteraciones llega a una solución válida completa, este algoritmo se describe completamente en [3]. El método se puede separar en cuatro pasos fundamentales:

Paso 1. Generación de Poros: se crean dos listas de sitios L_S y L_{SC} . Los tamaños de radios de los sitios (L^3 radios) son generados de forma aleatoria (en base a la distribución $F_S(R_S)$), los radios se ordenan de forma ascendente y se almacenan en la lista etiquetada como L_S . Después se generan los radios de los enlaces de forma aleatoria (en base a la distribución $F_B(R_B)$). En adelante usaremos el término sitio o enlace para referirnos al radio del sitio o del enlace, respectivamente. Por cada enlace generado, este se intenta conectar al primer sitio de la lista L_S (al más pequeño de la lista), mientras se cumpla el *PC*. Si no es posible, el enlace se intenta conectar con el siguiente sitio en L_S , y así sucesivamente hasta que la conexión cumpla el *PC*. Cada vez que un sitio en L_S completa su contorno, es decir tiene $C = 6$ enlaces conectados, el sitio es trasladado al final de la lista etiquetada como L_{SC} la cual conserva el orden ascendente de los radios de sitios. Al final, L_{SC} contiene sitios con sus respectivos seis enlaces válidos y L_S contiene sitios con conexiones incompletas. Todos los enlaces conectados tanto en los sitios de L_{SC} como en los de L_S siempre cumplen el *PC*.

Paso 2. Sembrado: en este paso se eligen k semillas (es decir k sitios) tomadas de forma aleatoria de la lista L_{SC} , y son insertadas en posiciones aleatorias de la red, entonces los otros sitios de L_{SC} son insertados alrededor de cada semilla, generando así estructuras cúbicas (clusters cúbicos de poros) hasta lograr el tamaño establecido como el cluster-size. En la Figura 4.1 se muestra la construcción de un cluster de tamaño 3x3x3. Cuando un sitio es conectado a otro

sito en un cluster, solo se necesita de un enlace para su conexión (el cual debe de cumplir con el PC). Cuando dos enlaces se encuentran frente a frente para conectar dos sitios y los dos enlaces cumplen con el PC , el enlace de mayor tamaño es elegido para la conexión; de otra forma, se elige el enlace más pequeño el cual permite que el PC se cumpla en ambos extremos del enlace. El enlace sobrante es asignado a otro sitio en L_S , siguiendo el mismo procedimiento del Paso 1.

Paso 3. Rellenado: una vez terminado el proceso de siembra se comienza el relleno de los espacios vacíos de la red, esto se realiza seleccionando aleatoriamente una de las semillas iniciales y se hace crecer su cluster hasta que se ocupen todos los espacios vacíos de la red. Se hace notar que, si un espacio ya ha sido previamente inicializado, éste es descartado, considerando solamente los espacios vacíos.

Paso 4. Mejoramiento de isotropía: en este punto, igual que en el algoritmo BiaSED, la red porosa ya es válida y solo hay que aplicar un número adicional de MCs para mejorar su isotropía.

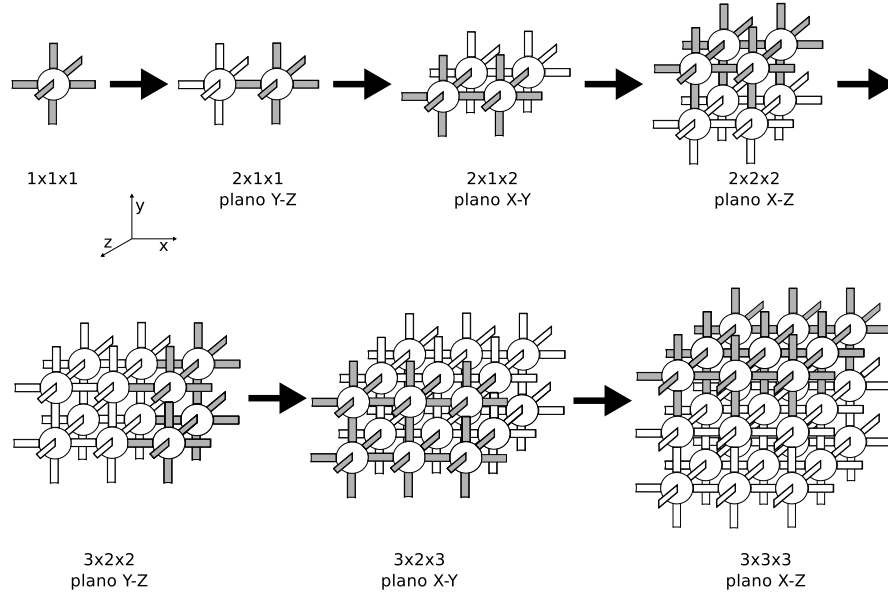


Figura 4.1: Construcción de un cluster de tamaño 3x3x3 con el algoritmo NoMISS

El Algoritmo NoMISS a diferencia del BiaSED, no hace uso de los pasos de Monte Carlo, sino que crea desde el inicio una red porosa válida.

Estos algoritmos que se acaban de presentar ofrecieron buenos resultados al construir redes porosas que respetan el PC ; sin embargo, ambos algoritmos necesitan tiempos largos para construir redes grandes. Debido a esto, hubo propuestas de paralelización de los dos algoritmos; en esta sección se presenta una descripción breve de las versiones paralelas de BiaSED y NoMISS, las cuales se encuentran descritas a detalle en [4].

4.2. Algoritmos Paralelos

Las versiones paralelas de BiaSED y NoMISS están diseñadas para trabajar bajo el modelo de Paso de Mensajes, utilizando la tecnología de Message Passing Interface (MPI-C). En cada versión paralela la red es particionada en pequeñas subredes, como se observa en la Figura 4.2; esta división se hace en base al número de nodos a utilizar, cada nodo tiene una subred de tamaño $L_x \cdot L_y \cdot L_z$, dicha distribución se hace utilizando funciones específicas de MPI. Los nodos mantienen una topología tipo toro, esto para crear una interconexión entre las distintas subredes. Para la explicación de los algoritmos se establece que un nodo es representado por un proceso MPI, por lo que utilizaremos indistintamente ambos términos.

4.2.1. Algoritmo Paralelo BiaSED

El algoritmo BiaSED-paralelo se describe completamente en [4]. Tal y como se comentó al inicio de esta sección, la red porosa se divide en subredes las cuales se distribuyen entre los nodos de un cluster utilizando la tecnología de MPI, como vemos en la Figura 4.2 al utilizar 8 procesos. A continuación se describen a grandes rasgos los pasos del funcionamiento de este algoritmo.

Paso 1: Cada proceso genera L^3/N sitios y $3L^3/N$ enlaces, donde N es el número de procesos a utilizar. Cada proceso ejecuta el paso uno del algoritmo secuencial BiaSED trabajando en su respectivo espacio de subred.

Paso 2: Lo siguiente es que cada proceso ejecuta una serie de MCs sobre su subred, a esto se le llama MCs paralelo. Este proceso se realiza excluyendo a los sitios ubicados en las caras exteriores de la subred, ya que dichos elementos no cuentan con sus 6 enlaces y no podría validarse el PC .

Paso 3: Para que cada poro tenga la posibilidad de intercambiarse con otro de una subred distinta, se realiza una transferencia parcial de subred hacia una dirección específica (x , y o z), entre los nodos del toro que tienen subredes vecinas. De esta manera, los sitios de las caras exteriores quedan ahora en la parte interna de una nueva subred.

Paso 4: Los Pasos 2 y 3 son repetidos, alternando los ejes x , y y z , hasta que se obtiene una red porosa válida.

Paso 5: En esta última parte los Pasos 2 y 3 son repetidos por un número determinado de veces, para mejorar la isotropía de la red porosa.

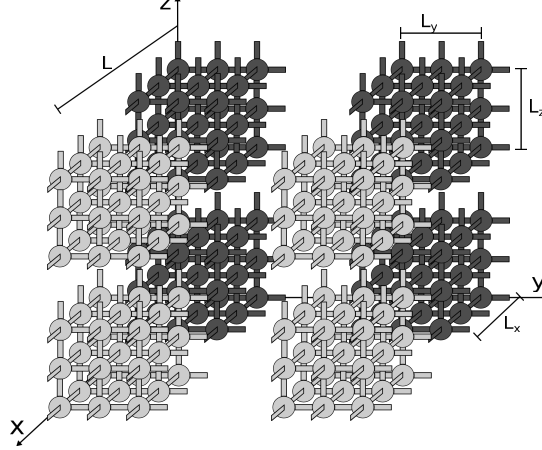


Figura 4.2: Distribución de una red porosa entre 8 nodos o procesos MPI

4.2.2. Algoritmo Paralelo S-NoMISS

El algoritmo paralelo S-NoMISS se describe con mayor detalle en [3], y está basado en el algoritmo NoMISS descrito en la sección anterior. Este algoritmo paralelo se distingue por utilizar un método estático para la distribución de carga, los pasos del algoritmo son los siguientes:

Paso 1. Generación de poros: Cada nodo genera L^3/N sitios y $3L^3/N$ enlaces, donde N es el número de nodos a utilizar. Los sitios se ordenan de forma ascendente (aplicando el algoritmo Parallel-Quicksort). De este modo cada nodo crea las listas locales L_S y L_{SC} , de la misma forma en que se hace en el Paso 1 del algoritmo NoMISS.

Paso 2. Sembrado y Rellenado: Cada nodo ejecuta sobre su subred el paso de sembrado y relleno del algoritmo NoMISS secuencial, con la restricción de que se omite la inicialización en posiciones ubicadas en las caras externas de cada subred.

Paso 3. Rellenado de caras externas: Para rellenar los espacios vacíos existentes entre las subredes y lograr cumplir el PC entre las fronteras de las subredes adyacentes, se realizan una serie de transferencias parciales de subred entre nodos, a lo largo de los ejes x , y y z del toro. Entre cada transferencia se aplica el método de relleno, para que los espacios vacíos que ahora quedaron en la parte interna de una subred se vayan inicializando, respetando el PC . Al terminar las transferencias, se tiene una red porosa válida, sin posiciones vacías.

Paso 4. Mejoramiento de isotropía: En esta última parte se aplica el mismo Paso 5 del método BiaSED-paralelo, para mejorar la isotropía de la red porosa.

Debido a que en este algoritmo los sitios de mayor tamaño quedaban siempre en la parte exterior de la red porosa, era muy difícil mejorar la isotropía de la red, sobre todo cuando se tenían traslapes Ω muy altos. Por tal motivo se propuso una nueva versión paralela de NoMISS, D-NoMISS, que permitió que los sitios de mayor tamaño pudieran distribuirse a lo largo de todo el espacio de la red, como lo hace la versión secuencial NoMISS.

4.2.3. Algoritmo Paralelo D-NoMISS

El algoritmo paralelo D-NoMISS se describe con mayor detalle en [4], este algoritmo ejecuta los pasos del algoritmo S-NoMISS con algunas modificaciones. Los pasos de D-NoMISS son los siguientes:

Paso 1. Generación de poros: Aquí cada proceso ejecuta simultáneamente el mismo paso 1 de S-NoMISS.

Paso 2. Sembrado paralelo: En este paso, el sembrado paralelo de sitios se realiza casi igual que en S-NoMISS, en donde cada proceso omite las caras externas de su subred; lo que cambia ahora es el espacio en donde las semillas son asignadas y agrandadas en clusters cúbicos de poros. Para que cada poro tenga la posibilidad de ser sembrado en cualquier parte de la red porosa, los procesos transfieren la mitad de su subred a sus respectivos vecinos en el toro (en las tres direcciones x , y y z), y entre cada transferencia se realiza una siembra paralela de sitios. De esta manera los espacios en las caras externas también podrían ser inicializados durante el sembrado. Los clusters de poros ocupan hasta el 25 % de la subred. Cabe destacar que las listas L_{SC} locales de cada nodo, al terminar el sembrado paralelo no son necesariamente del mismo tamaño, debido a los traslapes de clusters que posiblemente ocurrieron durante el proceso.

Paso 3. Rellenado paralelo: Cada proceso intenta llenar los lugares vacíos de su subred mediante un cluster recubridor que inicia desde el centro de la subred y que se extiende hasta un tamaño $(L_x - 2) \cdot (L_y - 2) \cdot (L_z - 2)$, excluyendo las caras externas de la subred. Debido al paso dos y las posibilidad de que las listas L_{SC} sean de distintos tamaños, cada vez que un proceso se queda sin sitios que asignar, se ejecuta una política de distribución de carga que hace que las listas de poros permanezcan equilibradas, respecto al número de sitios que contienen. Igual que en el paso 3 de S-NoMISS, para inicializar todos los espacios vacíos se realizan un serie de transferencias parciales de subred entre nodos, a lo largo de los ejes x , y y z del toro, y entre cada transferencia se construye un cluster recubridor.

Paso 4. Mejoramiento de isotropía: Como en todos los algoritmos descritos anteriormente, se recomienda aplicar un número adicional de *MCs* para mejorar la isotropía de la red porosa; esto se hace de la misma forma que el Paso 4 de S-NoMISS.

4.3. Conclusiones

En general se ha mostrado que los algoritmos NoMISS tienen mejor rendimiento que los algoritmos BiaSED [3], especialmente cuando se pretende construir redes porosas con alto traslape (Ω). En cuanto a las versiones paralelas de NoMISS la versión S-NoMISS se observa mejor en términos de tiempo; sin embargo en términos de la isotropía de la red el algoritmo D-NoMISS es mejor, el mayor problema de la versión D-NoMISS es que su método de distribución dinámica genera un punto de sincronización global que hace que su escalabilidad sea limitada.

El inconveniente de estas versiones es que únicamente toman en cuenta el cumplimiento del Principio de Construcción, por lo que es de gran interés el desarrollo de simuladores de redes porosas que consideren también el cumplimiento de las Restricciones Geométricas (*RG*) durante la interconexión de poros. En [5] se muestra una primera aproximación para la creación de redes porosas las cuales cumplen completamente con el *PC* y las *RG*; sin embargo, el método propuesto resultó ser una solución impráctica ya que requería de grandes tiempos de ejecución para la generación de redes porosas de tamaños de red relativamente pequeños (que contenían a lo más 40^3 poros).

En búsqueda de algoritmos eficientes que consideren el cumplimiento de ambas restricciones, *PC* y *RG*, se implementó y se evaluó una adaptación del algoritmo secuencial NoMISS [16] para crear redes de poros que cumplan con los dos tipos de restricciones. Sin embargo, debido a que los enlaces y sitios se generan de forma aleatoria fue muy difícil encontrar configuraciones válidas, lo que se transformaba en tiempos de ejecución muy altos y como resultado solo se logro generar redes porosas con traslapes muy pequeños ($\Omega \leq 0,0007$) utilizando este esquema. En base al resultado anterior no se intentó paralelizar dicha versión ya que la limitante del traslape afectaría de igual forma a una versión paralela.

Para resolver este problema, inspirados por el funcionamiento de NoMISS y BiaSED, se propuso una nueva solución [17] para la construcción de redes porosas más reales considerando las Restricciones Geométricas. En [17] se propone un algoritmo secuencial híbrido que inicialmente ejecuta un procedimiento tipo voraz para inicializar la red y posteriormente aplica un método iterativo para eliminar las violaciones a las restricciones de *PC* y *RG*. La desventaja de este algoritmo son sus tiempos de ejecución para crear redes de gran tamaño debido a procesos de ordenamiento y de búsqueda que tuvieron que incluirse.

En este trabajo se proponen dos versiones paralelas para la construcción de redes porosas que consideran el cumplimiento de PC y RG . La primer versión se refiere a la paralelización del algoritmo híbrido presentado en [17]. Para tener otro punto de comparación también se propuso una adaptación al algoritmo BiaSED-paralelo para que considerara los dos tipos de restricciones. Ambas propuestas fueron desarrolladas utilizando las arquitecturas multi-núcleo, para sacar el mayor provecho de la memoria compartida entre procesadores. Como trabajo futuro sería de gran interés desarrollar estas versiones considerando arquitecturas de memoria distribuida y así ampliar el panorama comparativo. Las versiones paralelas de NoMISS y BiaSED se toman únicamente como antecedentes y no como un punto de partida o comparación, ya que el trabajo propuesto se refiere a un algoritmo diferente el cual toma en cuenta el cumplimiento de las RG .

En los Capítulos 5 y 6 se presentarán respectivamente el algoritmo secuencial híbrido propuesto en [17] y los algoritmos paralelos propuestos en este trabajo.

Capítulo 5

Construcción Secuencial sujeta a RG

En este capítulo se describen dos algoritmos para la creación de redes porosas sujetas a restricciones geométricas. En ambos algoritmos la generación de sitios y enlaces se basa en las distribuciones $F_S(R_S)$ y $F_B(R_B)$. Ambos algoritmos propuestos se pueden separar en dos grandes fases: inicialización de la red porosa con sitios y enlaces y la generación de una red porosa válida. Cabe señalar que una red porosa válida es aquella que se encuentra libre de violaciones a las RG . En la primera fase el primer algoritmo inserta de forma aleatoria sitios y enlaces hasta cubrir toda la red, mientras tanto el segundo algoritmo sigue el método de sembrado del algoritmo secuencial NoMISS. con la diferencia de que los sitios que conforman a los clusters no tienen enlaces asignados inmediatamente después del sembrado el algoritmo comienza a asignar enlaces a los sitios siguiendo la regla de intentar conectar siempre a cada sitio los enlaces de mayor tamaño posible. Después de la fase de inicialización ambos algoritmos pueden tener violaciones a las RG por lo que la segunda fase se basa en la eliminación de las violaciones a las RG utilizando el Método de Monte Carlo. A continuación se describe a detalle cada algoritmo.

5.1. Solución Básica Aleatoria

En este algoritmo tiene por objetivo inicializar la red porosa con sitios y enlaces de forma aleatoria en dos pasos, en el primer paso se generan e insertan en la red porosa L^3 sitios en base a la distribución $F_S(R_S)$, conforme se van generando los sitios estos se insertan en la red porosa. El segundo paso consiste en conectar tres enlaces a cada sitio de la red porosa, cada enlace es generado en base a la distribución $F_B(R_B)$ y al final tendremos $3 \cdot L^3$ enlaces dentro de la red porosa.

Cabe destacar que aun cuando se le asignaron solo tres enlaces a cada sitio, la conectividad de estos sigue siendo igual a seis debido a que los otros tres enlaces

los comparte con sus sitios vecinos siguiendo una topología tipo toro tal y como se muestra en la Figura 5.1 donde se puede apreciar que al sitio de color gris oscuro le comparten un enlace cada uno de sus sitios vecinos que están representados en color gris claro, a su vez el sitio de color gris oscuro le comparte sus enlaces a los sitios que se encuentran en la posición frente-inferior-derecho, trasero-superior-derecho y frente-superior-izquierdo de la red porosa.

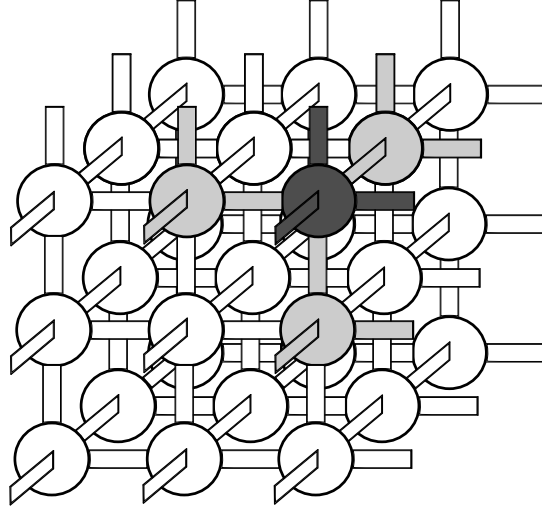


Figura 5.1: Red porosa inicializada con L^3 sitios y $3 \cdot L^3$ enlaces

5.2. Solución Híbrida

El algoritmo que se presenta a continuación inicializa una red porosa con sitios y enlaces donde se intenta que la conexión entre estos cumpla con las RG . La primera acción del algoritmo es crear dos listas de tamaños de poros ordenadas de forma descendente (en base al tamaño de los sitios o enlaces respectivamente) mediante un algoritmo de ordenamiento por inserción. La primera lista L_S se compone de L^3 sitios mientras que la segunda L_B contiene $3L^3$ enlaces. Subsecuentemente a la creación de las listas se lleva a cabo el proceso de sembrado y rellenado similar al aplicado en el algoritmo NoMISS descrito en la Sección 4.1.2 después del sembrado y rellenado sigue el proceso de asignación de enlaces a los sitios. A continuación se describe a detalle el algoritmo.

5.2.1. Sembrado de Clusters

Durante todo el proceso de sembrado y rellenado de la red porosa cada vez que se toma un elemento de la lista L_S se hace referencia a que se toma el primer elemento actual de L_S siendo este el sitio actual más grande.

El proceso de sembrado de clusters se divide en dos pasos el primer paso consiste en tomar el primer sitio (semilla) de la lista L_S e insertarlo en una posición aleatoria de la red porosa, el segundo paso consiste en tomar más elementos de L_S y uno a uno insertarlos alrededor de la semilla actual hasta de crear un cluster de sitios de tamaño $ClusterSize$ el cual tendrá la forma de un cubo; este procedimiento se describe en las líneas 1-6 del Algoritmo 1. En la Figura 5.2 se muestra de forma gráfica la creación de un cluster donde $ClusterSize = 3$.

Cada vez que se inserta un elemento de L_S en una posición aleatoria (i, j, k) de la red, dicha posición se almacena en la lista L_{SC} que se mantiene ordenada de forma descendente en base al tamaño de los sitios insertados. El procedimiento de inserción de semillas y la creación de un clusters de tamaño $ClusterSize$ se repite p veces, donde p es un número de clusters a insertar. En caso que durante la creación de los clusters exista un traslape entre ellos, el sembrado se omite en las regiones ya ocupadas(en las que existe traslape) y se continua el sembrado de los sitios en los espacios aun vacíos.

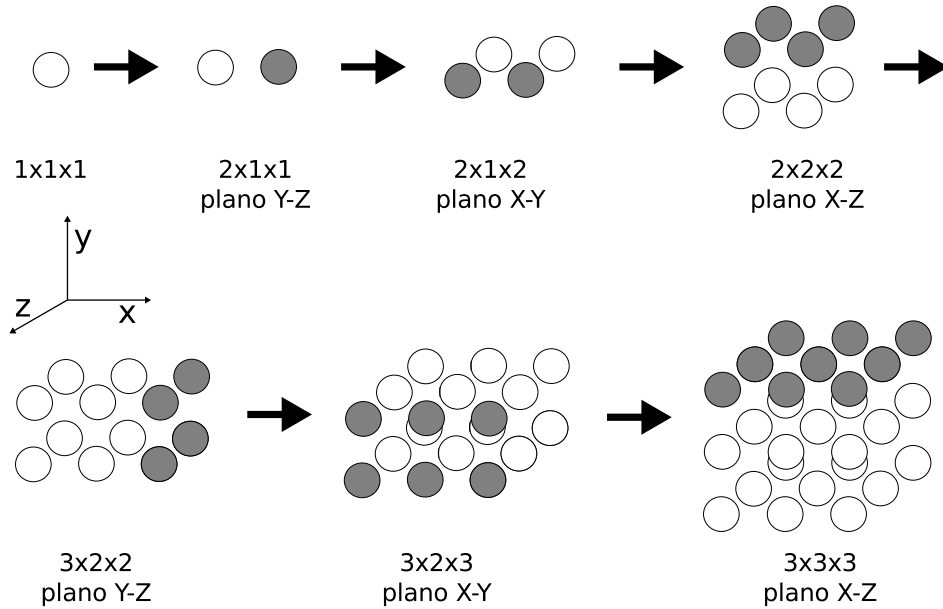


Figura 5.2: Sembrado de un cluster de tamaño 3x3x3

En la Figura 5.3 se muestra una red porosa después del proceso de siembra de p clusters de tamaño 3x3x3 cada uno, también se puede observar que en la red quedan espacios vacíos los cuales serán rellenados de la siguiente forma: una vez completado el proceso de siembra de clusters, al primer cluster generado se le insertan alrededor suyo todos los sitios restantes de L_S (líneas 7-9 del Algoritmo 1) siguiendo las mismas reglas de construcción de cluster anteriores, con la diferencia de que se establece $ClusterSize = L$ con lo cual se garantiza que se ocuparan todos los espacios vacíos

de la red porosa.

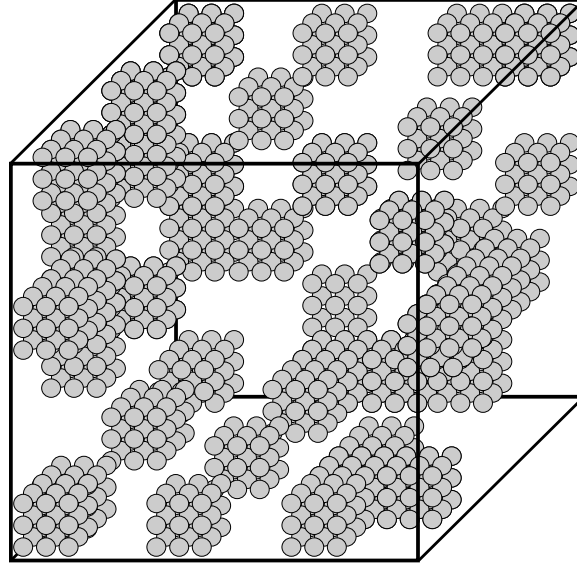


Figura 5.3: Red Porosa después del proceso de siembra de clusters

Algoritmo 1 Sembrado de clusters dentro de la red porosa($pnet$)

Require: L_S , L_{SC} , $NClusters$, $ClusterSize$

```

1: for  $m \leftarrow 1$  to  $NClusters$  do
2:    $pnet[i][j][k] \leftarrow \text{FIRST}(L_S)$  //  $i, j, k$ : posición aleatoria
3:   for  $p \leftarrow 1$  to  $ClusterSize$  do
4:      $\text{INSERTPCLUSTER}(pnet, i, j, k, \&L_S, \&L_{SC})$ 
5:   end for
6: end for
7: while  $\text{SIZE}(L_S) > 0$  do //  $i, j, k$ : La posición de la primera semilla
8:    $\text{INSERTPCLUSTER}(pnet, i, j, k, \&L_S, \&L_{SC})$ 
9: end while

```

Al final del proceso de siembra y rellenado, los sitios en su mayoría tienen a su alrededor sitios con tamaños similares con lo cual se tiene mayor oportunidad de encontrar soluciones válidas al conectar los sitios con los enlaces y que cumplan con las RG , esto se debe a que es mas sencillo encontrar un enlace para conectar dos sitios similares a encontrar un enlace que conecte dos sitios de tamaños distintos(o muy distintos). En contraste con la versiones de NoMISS descritas en el Capítulo 4, en este algoritmo los sitios insertados durante el sembrado y rellenado no tienen aún enlaces asignados.

5.2.2. Asignación de Enlaces

La asignación de enlaces se inicia con los sitios de más grandes hasta los sitios más pequeños. Para este fin, los elementos de la lista L_{SC} son tomados uno a uno desde la primera posición de la lista. Como se menciono anteriormente, cada elemento de L_{SC} contiene la posición en la cual se asigno cada sitio dentro de la red porosa, y el orden de los elementos es descendente en base al tamaño de los sitios, entonces el primer elemento de la lista siempre almacenara la posición dentro de la red del sitio más grande. Cuando un elemento es tomado de L_{SC} , se le intentan conectar C enlaces al sitio en la posición correspondiente; los enlaces son tomados de la lista L_B , intentando usar los enlaces de mayor tamaño primero. Cada uno de los C enlaces conectados a los sitios debería cumplir con el PC y las RG . Solo en el caso que no exista un enlace en L_B que cumpla con estas restricciones, para completar el contorno de enlaces se toma el enlace más grande de L_B para ser conectado con el sitio actual, lo anterior permite la existencia de violaciones a las RG . En el Algoritmo 2 se muestra este comportamiento.

Algoritmo 2 Asignación de enlaces

Require: $L_B, L_{SC}, C = 6, pnet$

```

1: while SIZE( $L_{SC}$ ) > 0 do
2:    $(i, j, k) \leftarrow \text{FIRST}(L_{SC})$ 
3:   for  $p \leftarrow 1$  to  $C$  do //  $C = 6$  para una red cúbica
4:     ASSIGNEBONDSRG( $pnet, i, j, k, p, \&L_B$ )
5:   end for
6: end while
```

5.3. Generación de una red porosa válida

Una vez que la red porosa ha sido inicializada por completo ya sea con el algoritmo de la Solución Básica Aleatoria o con el de la Solución Híbrida con sitios y enlaces, la red porosa puede tener violaciones a las RG esto se debe a que en la Solución Básica Aleatoria no se verifica el cumplimiento de las RG al asignar un enlace a un sitio debido a que es un método completamente aleatorio, por el contrario la Solución Híbrida intenta conectar cada enlace con el sitio mas grandes posible donde la conexión entre sitio y enlace cumplan con las RG sin embargo existen casos en los cuales no es posible que se cumplan las RG y por consiguiente la conexión provoca violaciones a las RG . Cabe destacar que el número de violaciones a las RG esta directamente relacionado con el valor del traslape(Ω).

Para eliminar las violaciones al PC y RG se utilizo en método el Método de Monte Carlo tal y como lo hace el algoritmo secuencial BiasSED descrito en la Sección 4.1.1, entonces se aplica una serie de Pasos de Monte Carlo(MCs) a la redes porosas

generadas por los algoritmos descritos en las secciones 5.1 y 5.2 para eliminar por completo las violaciones tanto al PC como a las RG .

En nuestro enfoque los intercambios de sitios o enlaces durante los pasos de Monte Carlo se deben cumplir tanto el PC como las RG , en caso contrario el intercambio es rechazado, el algoritmo para la generación de una red porosa válida termina cuando todos los poros en la red cumplen tanto con el PC como con las RG , como se muestra en el Algoritmo 3.

Algoritmo 3 Esquema de genración de una red porosa válida

Require: $pnet$

```

1: while GRVIOLATIONS( $pnet$ ) > 0 do
2:   POREEXCHANGE( $pnet$ )
3:   if NONVALIDEXCHANGE( $pnet$ ) then
4:     REJECTEXCHANGE( $pnet$ )
5:   end if
6: end while

```

En las Figuras 5.4 y 5.5 se muestra un ejemplo del intercambio válido de entre dos sitios y entre dos enlaces respectivamente, en Figuras 5.6 y 5.7 se muestra un ejemplo de intercambio inválido de entre dos sitios y entre dos enlaces respectivamente. El tiempo que lleva el proceso de eliminación de violaciones al PC y RG varia dependiendo del traslape(Ω) entre las distribuciones utilizadas para generar a los sitios como a los enlaces de la red porosa y si este mismo es muy grande puede que el algoritmo 3 no termine.

5.4. Mejoramiento de la isotropía

Para que una red porosa válida sea lo más cercana a la realidad se requiere tanto del cumplimiento de las restricciones geométricas así como tener una buena isotropía es decir que los distintos tamaños de los poros estén lo mejor distribuidos en la red para lo cual después de generar una red porosa válida se aplican una número extra de MCs siguiendo las mismas reglas utilizadas en la sección anterior, cabe destacar que el número extra de MCs necesarios para mejorar la isotropía depende directamente del traslape(Ω) entre sitios y enlaces.

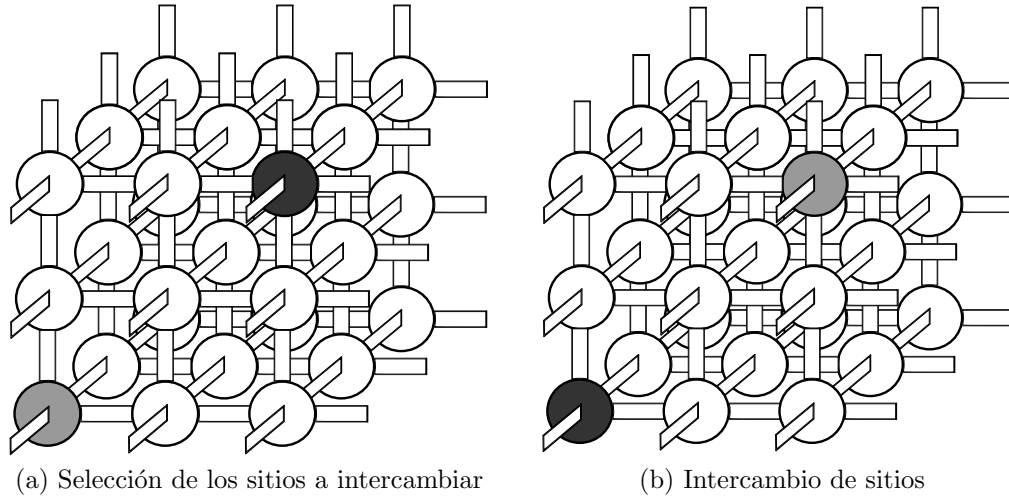


Figura 5.4: Ejemplo de un intercambio válido de dos sitios (a) selección y (b) intercambio

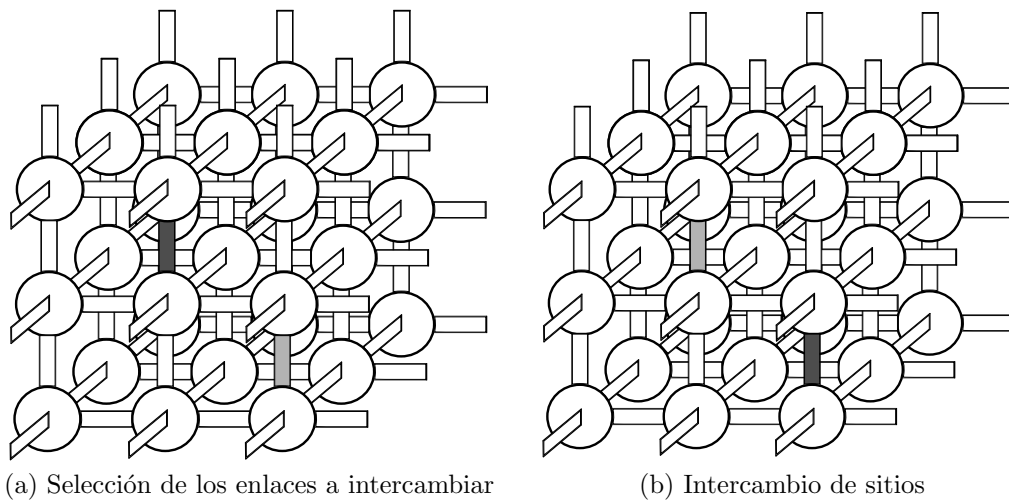


Figura 5.5: Ejemplo de un intercambio válido de dos enlaces (a) selección y (b) intercambio

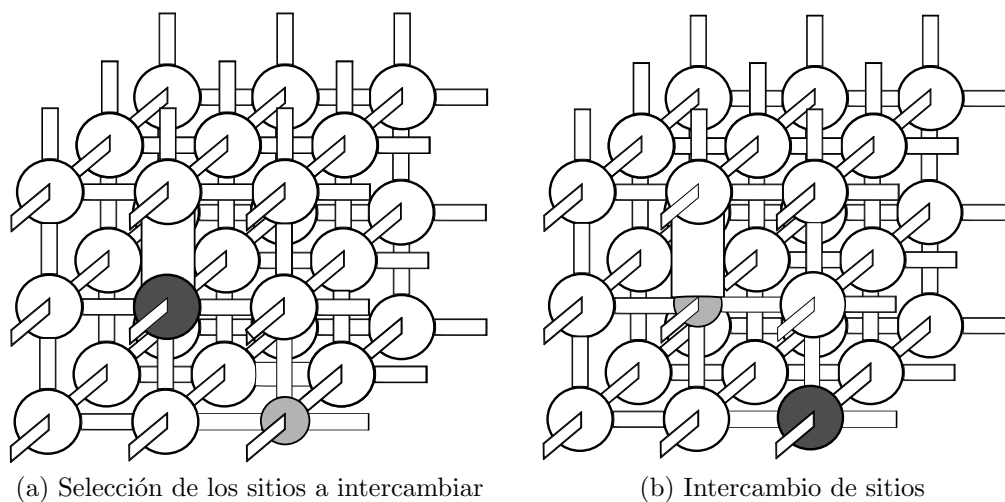


Figura 5.6: Ejemplo de un intercambio inválido de dos sitios (a) selección y (b) intercambio

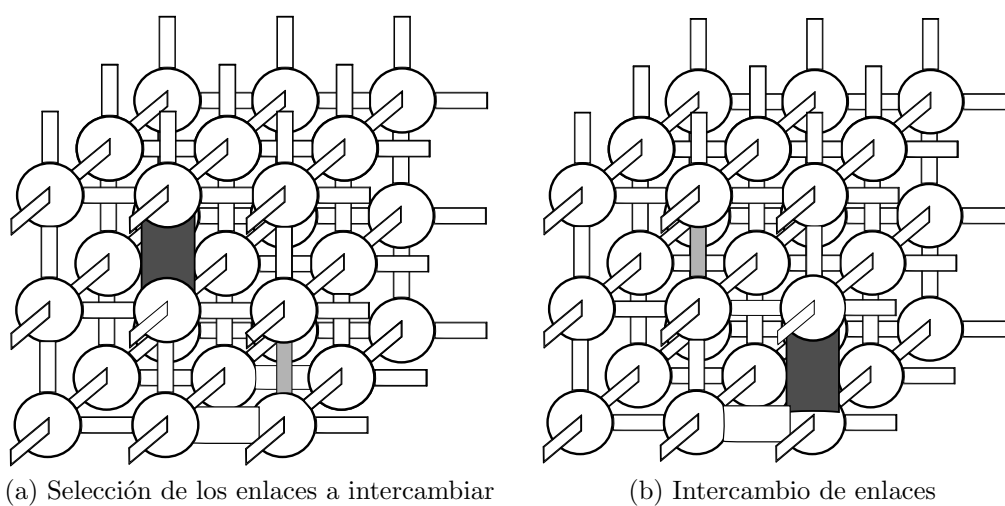


Figura 5.7: Ejemplo de un intercambio inválido de dos enlaces (a) selección y (b) intercambio

Capítulo 6

Construcción Paralela sujeta a RG

En este capítulo se describe la implementación paralela de los algoritmos descritos en el capítulo 5 para la creación de redes porosas sujetas a Restricciones Geométricas. Las implementaciones paralelas trabajan sobre el modelo de memoria compartida, donde varios hilos cooperan en la construcción de una red porosa válida siguiendo los principales pasos de los algoritmo presentados en el capítulo anterior. El primer paso para las dos soluciones paralelas es la distribución espacial de la red entre los hilos después viene la inicialización y por último la generación una red porosa válida.

6.1. Distribución de la red porosa

En este paso una red porosa es dividida en N subredes donde N es el número de hilos a utilizar. El objetivo de este paso es dividir la red en N subredes las cuales deben mantener una estructura lo más parecida a un cubo, para lograr esto la red se divide a lo largo de los tres ejes x, y y z respectivamente cada eje se dividirá a , b , y c partes. Se debe cumplir que el producto de a , b , y c es igual a N . El tamaño de cada subred esta definido por $L_x \cdot L_y \cdot L_z$, como se puede observar en la Figura 6.1. Si por ejemplo tomamos $N = 4$, la configuración generada sería $a = 1, b = 2, c = 2$, mientras que para $N = 45$ la configuración generada sería $3, 3, 5$, y para $N = 27$ la configuración generada sería $3, 3, 3$ que representa la raíz cubica de 27. La mejor distribución se da cuando a , b , y c corresponden a la raíz cubica de N ; de esta forma las subredes generadas adoptan la una estructura cúbica que ayuda a que la distribución de los poros sea equitativa a lo largo de los ejes x , y y z de cada subred. En la Figura 6.2 se muestran algunos ejemplos de particionamiento.

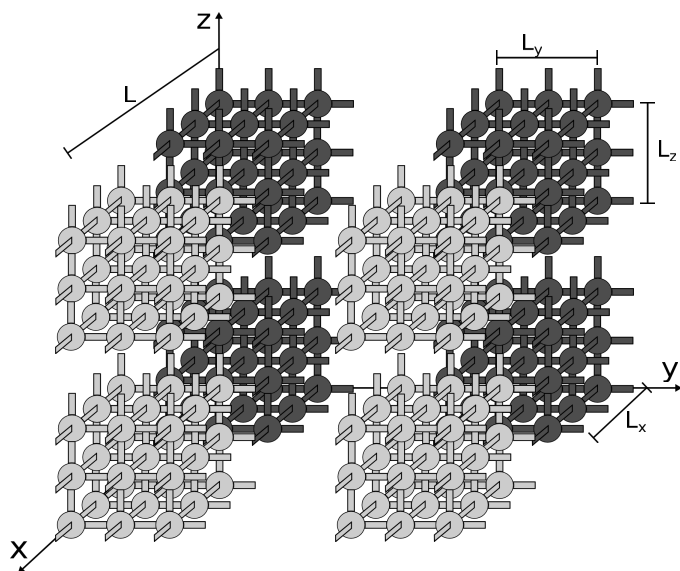


Figura 6.1: Red porosa dividida en ocho subredes; $N = 2 \cdot 2 \cdot 2$

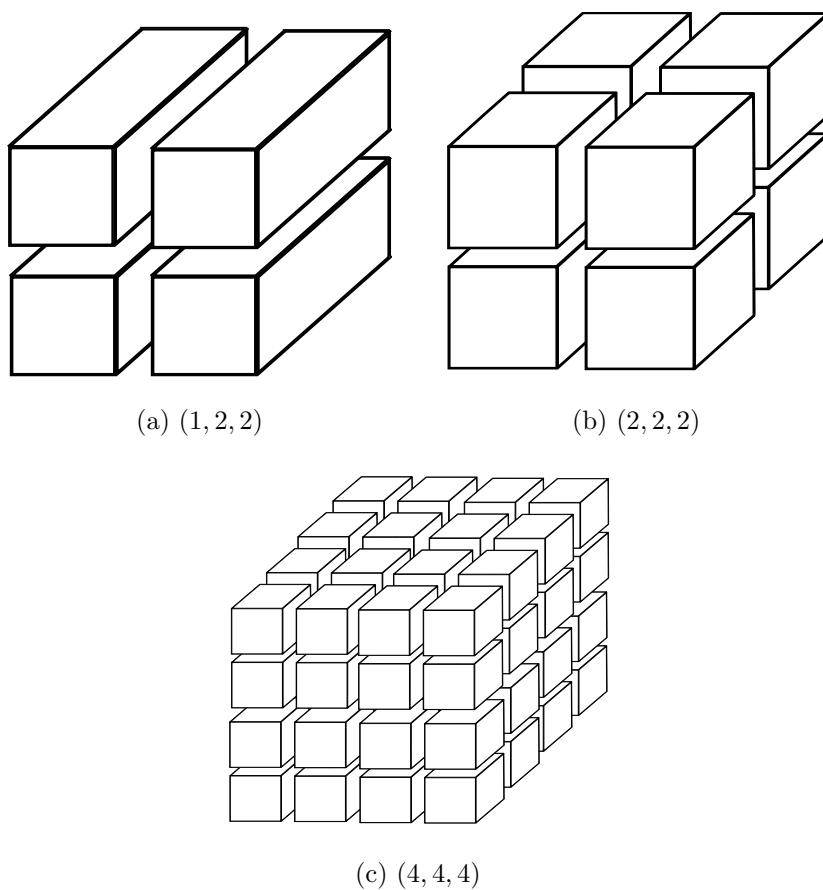


Figura 6.2: Distribución de la Red para (a) 4 hilos, (b) 8 hilos, and (c) 64 hilos

6.2. Solución Paralela Aleatoria

Una vez que la red porosa fue distribuida entre los N hilos utilizando el algoritmo descrito en la sección anterior, cada hilo trabajara de forma independiente en una subred de tamaño $L_x \cdot L_y \cdot L_z$ tal y como se muestra en la Figura 6.1 sin necesidad de sincronizarse durante el proceso de inicialización.

Cada hilo inserta de forma aleatoria en su subred $L_x \cdot L_y \cdot L_z$ sitios hasta rellenar por completo la red, una vez que la red esta completamente inicializada con sitios a cada sitio se le asignara únicamente tres enlaces(izquierdo, trasero y superior) esto para evitar la sincronización entre los hilos.

6.2.1. Generación de una Red Porosa Válida

6.2.2. Mejoramiento de la isotropía

6.3. Solución Paralela Híbrida

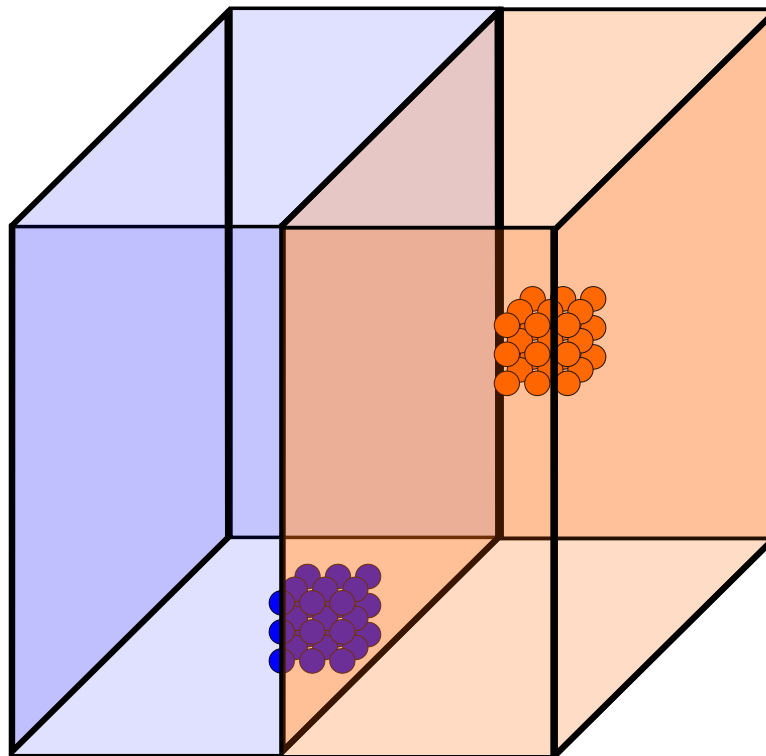
6.3.1. Inicialización

Los hilos trabajan en subredes diferentes. por cada hilo, tal y como en la solución propuesta en el capítulo anterior se generan las listas ordenadas L_S y L_B . L_S contiene $L_x \cdot L_y \cdot L_z$ tamaños de sitios ordenados de forma descendente, y L_B contiene $3 \cdot L_x \cdot L_y \cdot L_z$ tamaños de enlaces ordenados también de forma descendente. La sincronización entre los hilos no es necesaria para el uso o modificación de las listas L_S , L_{SC} and L_B porque estas listas son locales a cada hilo.

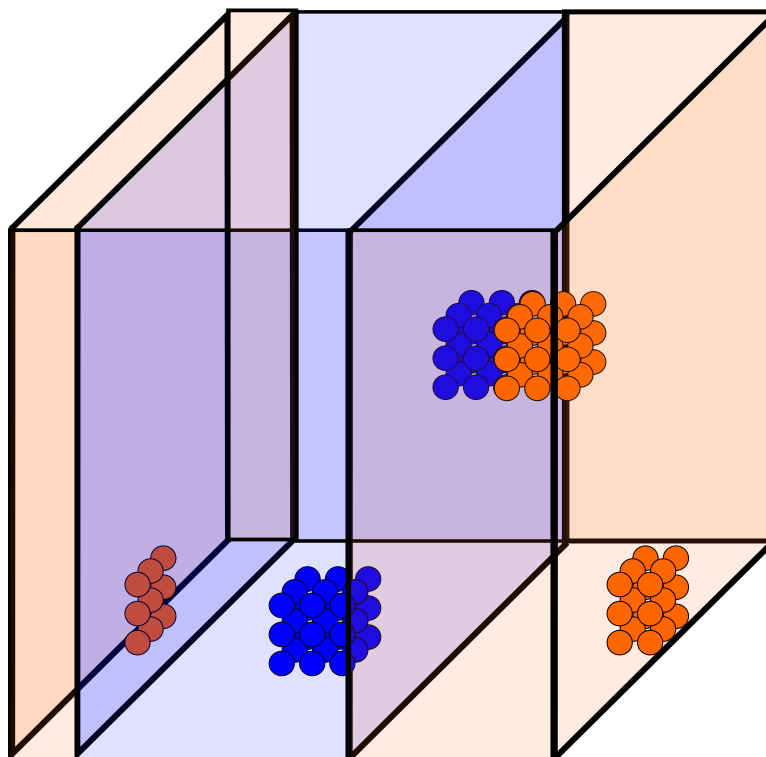
6.3.2. Sembrado de Clusters

Por cada hilo, el número de semillas corresponde a $NClusters/N$. Cada semilla es insertada en una posición aleatoria en su respectiva subred. Los demás elementos en L_S son tomados uno por uno para cubrir la semilla y formar un cluster, tal y como se explica en el capítulo anterior. La posición aleatoria en la cual se asignara la semilla en la subred es generada de tal forma que no puede ser asignada en las caras externas de la subred. Durante el sembrado todos los hilos se sincronizan a través de una *barrera* después de que cada uno complete un cluster, entonces el origen (x, y, z) se cambia de forma aleatoria a lo largo de los ejes x, y y z en rango que esta entre 0 to $L - 1$. El cambio de origen se hace con el propósito de que los hilos puedan trabajar en subredes independientes y diferentes de la red porosa.

El origen de la red porosa esta inicialmente en $(0, 0, 0)$, como se muestra en la Figura 6.3a, si movemos el origen a $(0, 2, 0)$, esto causaría que las áreas de trabajo(subredes) de cada hilo cambien como se muestra en la Figura 6.3b, las nuevas áreas de trabajo se resaltan en color azul y naranja.



(a) Distribución inicial del espacio



(b) Distribución posterior del espacio

Figura 6.3: (a) Origen en $(0, 0, 0)$ y (b) cambio de origen a $(0, 2, 0)$

Después de completar el sembrado de clusters, el origen de la red es trasladado a $(0, 0, 0)$ de manera que cada hilo, comienza a trabajar en su subred inicial. El siguiente paso consiste en rellenar su actual subred con los sitios restantes en su lista L_S ; sin embargo en este momento el número de sitios en las listas L_S de cada hilo son diferentes. Puede que para algunos hilos los sitios que tienen en sus listas L_S no sean suficientes para rellenar su subred, mientras que otros pueden tener sitios de sobra en sus listas L_S de los requeridos para rellenar su subred. Para solucionar el problema anterior los elementos de las listas L_S requieren ser distribuidos entre los hilos.

Los pasos necesarios para distribuir los elementos de las listas L_S se presentan en el Algoritmo 4 el cual es una versión simplificada del algoritmo presentado en [11] para la distribución de carga.

Por cada hilo se tiene, identificador del hilo (id), el número $M[id]$ de sitios requeridos el cual depende de: el tamaño de la subred $SNS[id]$ ($SNS[id] = L_x \cdot L_y \cdot L_z$), el número de sitios que ya han sido insertados en la subred $SI[id]$, y el número de sitios en su lista $AL_S[id]$, denotado por $Size(L_S[id])$. En el algoritmo el arreglo M su contexto es global por lo cual es una variable compartidas.

La primera etapa consiste en el calculo del número de sitios requeridos; cada hilo calcula $M[id]$ como se indica en la línea 1 del Algoritmo 4. En el segundo paso, los hilos que tienen $M[id] < 0$, que indica que tienen sitios de sobra y es por eso que insertan su id en la lista compartida de Hilos Pesados denotada por HT , (línea 4), esta inserción se hace a través de exclusión mutua entre los hilos (líneas 2-6). Después todos los hilos se sincronizan mediante un mecanismo de barrera (línea 7). Esta barrera hace que los hilos con $M[id] > 0$ (con sitios faltantes) esperen a que la lista HT sea inicializada por los demás hilos. En el último paso, los hilos con $M[id] > 0$ trabajan utilizando exclusión mutua (líneas 9-23) para tomar sus sitios faltantes de las listas L_S de los hilos en HT . Cuando un hilo id toma los sitios de otro hilo k en HT (líneas 13 y 17), los nuevos valores $M[id]$ y $M[k]$ se actualizan, como se muestra en las líneas 14, 15, 18 y 19. En caso de que un hilo en HT había dado todos sus hilos sobrantes, este es removido de la lista HT (línea 20).

Una vez que la distribución de los sitios es completada, cada hilo hace crecer su primer cluster generado hasta rellenar por completo su subred y su lista L_S esta vacía.

6.3.3. Asignación de Enlaces

En la sección anterior, cada hilo mantuvo su lista L_{SC} , la cual contiene las posiciones de los sitios insertados durante el sembrado y rellenado de red porosa, tal y como se hace en la solución básica. La listas L_{SC} de cada hilo contienen las posiciones en las cuales se insertaron los sitios a lo largo de la red porosa; sin embargo sus los elementos de la lista L_{SC} están dispersos en la red porosa.

Algoritmo 4 Redistribución de los sitios entre los hilos

Require: M : Arreglo compartido

Require: HT : Lista compartida de hilos pesados

Require: id : Identificador del hilo

```

1:  $M[id] = SNS[id] - SI[id] - Size(L_S[id])$ 
2: if  $M[id] < 0$  then
3:   omp critical
4:      $INSERTID(id, HT)$ 
5:   end omp critical
6: end if
7: omp barrier
8: if  $M[id] > 0$  then
9:   omp critical
10:    while  $M[id] > 0$  do
11:       $k = getFirst(HT)$ 
12:      if  $M[id] < |M[k]|$  then
13:         $MOVENSITES(M[id], L_S[id], L_S[k])$ 
14:         $M[k] = M[k] + M[id]$ 
15:         $M[id] = 0$ 
16:      else
17:         $MOVENSITES(M[k], L_S[id], L_S[k])$ 
18:         $M[k] = 0$ 
19:         $M[id] = M[id] + M[k]$ 
20:         $REMOVEID(k, HT)$ 
21:      end if
22:    end while
23:  end omp critical
24: end if

```

Debido a las acciones realizadas en la sección anterior las listas L_{SC} se pueden estar en desbalance por lo que es necesario distribuir los elementos entre los hilos. Para distribuir los elementos de las listas L_{SC} se utiliza el mismo algoritmo que de la sección anterior (Algoritmo 4), con dos cambios, el primero es el cambio en todo el algoritmo de L_S por L_{SC} y el segundo es cambiar la línea 1 por $M[id] = SNS[id] - Size(L_{SC}[id])$.

Una vez que las listas están balanceadas, cada hilo, toma las posiciones de los sitios una a uno de la lista L_{SC} y conecta los tres correspondientes enlaces al sitio (izquierdo, trasero y superior). Cada conexión entre sitio y enlace debe cumplir con el PC y las RG , siguiendo el mismo procedimiento descrito en la sección 5.2.2. Cada sitio es conectado a solo tres enlaces porque, como se define en el Capítulo 1, un sitio tiene tres enlaces propios mientras que los otros tres enlaces son compartidos con los sitios vecinos. Lo anterior se hace para evitar la sincronización entre los hilos que posiblemente se necesitara al conectar los enlaces compartidos (derecho, frontal e inferior). Al finalizar este paso se obtiene una red porosa con violaciones al PC y a las RG .

6.3.4. Generación de una red porosa válida

Para que la red creada a partir de los pasos descritos en las secciones anteriores de este capítulo sea válida en términos del PC y de las RG , es necesario aplicar una serie de MCs para eliminar por completo las violaciones. Por cada intercambio de sitios o enlaces durante un MCs el PC y las RG deben ser respetadas.

De igual manera los MCs se realizaran paralela a través de hilos los cuales trabajan de manera independiente en distintas subredes, los pasos para el intercambio de poros son los siguientes:

1. La red porosa es dividida en $2N$ subredes utilizando el algoritmo descrito en la Sección 6.1.
2. A cada hilo se le asignan aleatoriamente dos subredes de las generadas en el paso anterior
3. Los intercambios se omiten si los poros involucrados pertenecen a las caras externas de sus subredes
4. Cada hilo genera una lista L_{SE} que contiene las posiciones de los sitios que no cumplen con las GR en ambas subredes asignadas
5. Si $Size(L_{SE}) > 0$, se toma el primer elementos de la lista L_{SE} que es la posición de un sitio con violaciones geométricas, en otro caso se toma aleatoriamente la posición de un sitio de cualquiera de las dos subredes asignadas, esta posición se

etiqueta como $s1$. Una posición($s2$) de un sitio se toma aleatoriamente de cualquiera de las dos subredes asignadas. Posteriormente, $s1$ y $s2$ se intercambian mutuamente sitios o enlaces (ej. intercambiar el enlace derecho de $s1$ por el enlace frontal de $s2$). El intercambio se mantiene solo si el número de violaciones a las RG es menor o igual al número de violaciones antes del intercambio, en otro caso el intercambio es rechazado

6. El paso 5 se repite $4((L_x - 2) \cdot (L_y - 2) \cdot (L_z - 2))^3$ veces por cada hilo, después de esto el origen de la red se traslada de forma aleatoria para que los hilos puedan trabajar en regiones distintas de la red
7. Cada hilo calcula el número total de sitios con violaciones a las GR en ambas subredes, de existir , incluyendo las caras externas. Cuando el número total de violaciones es igual a cero el algoritmo termina, en otro caso se repite desde el paso 4

6.3.5. Mejoramiento de la isotropía

Capítulo 7

Resultados

Nota: Este apartado esta siendo traducido del artículo que se presentara en el workshop PDSEC 2014 en el Congreso IEEE IPDPS 2014, adicionalmente se complementara con resultados de pruebas en progreso.

El algoritmo propuesto en la Capítulo 6 fue implementando utilizando OpenMP. Las pruebas fueron realizadas en una computadora con un procesador Intel(R) Core(TM) i7 CPU Extreme Edition a una velocidad de 3.47GHz y con 16GB de RAM. La versión secuencial descrita en el Capítulo 5 se ejecuto en un solo procesador.

Nuestra solución básica secuencial (llamada en este capítulo como BSGR: Solución Básica considerando GR), con la cual se pueden generar redes porosas que cumplen con el PC y las RG ; sin embargo, el ordenamiento de los enlaces y la búsqueda de configuraciones válidas esto se transforma en que se requiere un mayor número de cálculos que la versión secuencial NoMISS como se muestra en la Figura 7.1. Podemos observar en esta figura con $L = 100$ que con BSGR y su versión paralela solo se podrán construir redes porosas con traslapes bajos, en comparación con la versión secuencial de NoMISS, con la cual en las referencias [4] y [3] donde se alcanzaron altos traslapes.

Comparamos la versión paralela de BSGR en las redes porosas con bajo diferentes valores de Ω . En la Figura 7.1 podemos observar que la versión BSGR Paralela (utilizando 8 hilos) supera a la versión BSGR independientemente de los valores del traslape.

Es evidente que el valor del traslape Ω alcanzado en las redes que consideran el cumplimiento del PC y las RG , es relativamente bajo ($\Omega < 1$). Este hecho se debe a la restricción impuesta por las restricciones geométricas. Esto último se ilustra en las ecuaciones 7.1 y 7.2:

$$B_C(R_S) \geq S(R_S) \tag{7.1}$$

$$B_C(R_S) = \left\{ \int_0^{R_S} \dots \int_0^{R_S} F_B(R_{B1}) \dots F_B(R_{BC}) dR_{B1} \dots dR_{BC} \right\}^{1/C} \quad (7.2)$$

donde $B_C(R_S)$ es corresponde el volumen definido por la ecuación 7.2; esta se relaciona con el conjunto de enlaces que pueden ser conectados a un sitio, evitando al mismo tiempo la existencia de interferencias entre ellos. $S(R_S)$ es la fracción de sitios que son de tamaño R_S o más pequeños.

Las ecuaciones 7.1 y 7.2 restringen el valor de traslape como se muestra en [5], ya que la definición matemática de $B_C(R_S)$ impide en si alcanzar valores cercanos a la unidad, es por eso que se obtienen valores de traslape son $\Omega < 1$.

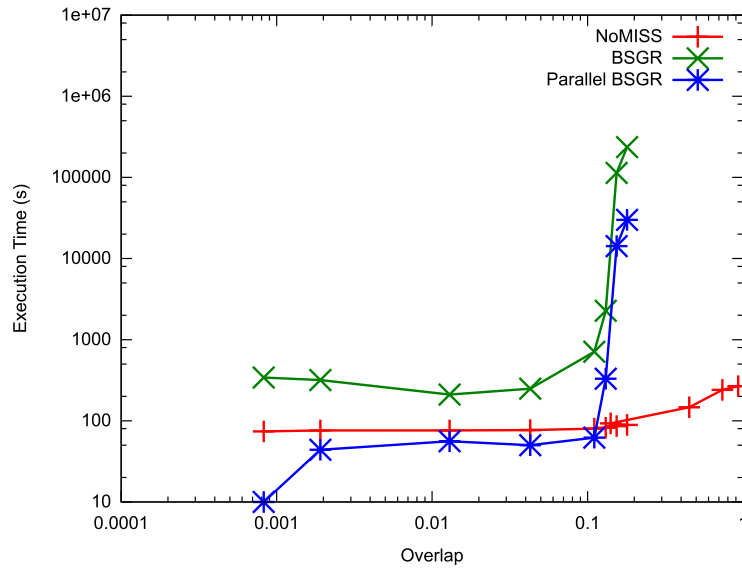


Figura 7.1: Tiempos de ejecución de NoMISS, BSGR y BSGR paralelo, bajo diferentes valores de Ω (escala logarítmica)

La Figura 7.2 muestra el tiempo de ejecución requerido para crear una red porosa con $L = 100$, $\Omega = 0,15$, $ClusterSize = 32$, y $NClusters = 30$ utilizando un número de hilos diferente. El tiempo de ejecución en paralelo en general disminuye mientras aumenta el número de hilos. Podemos observar en algunos casos, como cuando el número de hilos es igual a 6 y 14, el tiempo de ejecución no disminuye; creemos que estos casos se deben a la siembra aleatoria de clusters lo cual genera un número mayor de violaciones a las RG que en los otros casos, al tener un mayor número de violaciones el tiempo que lleva generar una red porosa válida es mayor.

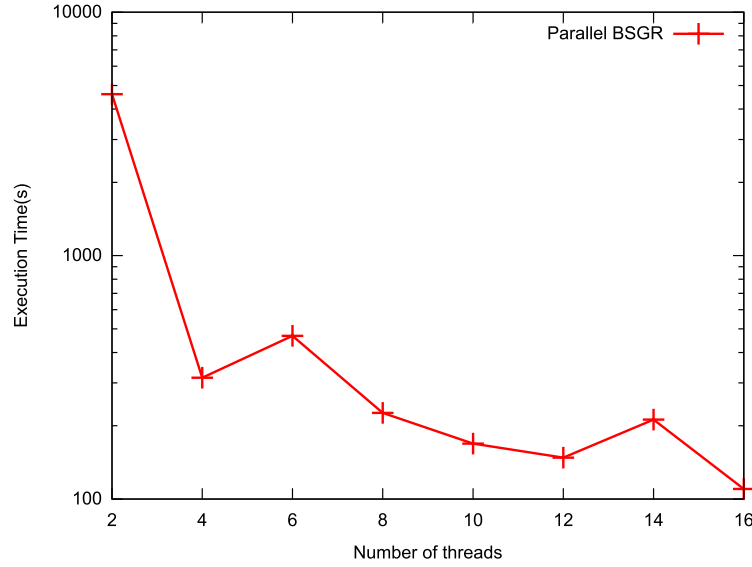


Figura 7.2: Tiempos de ejecución de BSGR Paralelo utilizando de 2 a 16 hilos (escala logarítmica)

En la Figura 7.3 observamos un ejemplo gráfico de una red porosa con $L = 100$ y $\Omega = 0,15$, obteniendo a partir de la versión BSGR (Figura 7.3a), así como de la versión BSGR Paralela (Figura 7.3b) utilizando 8 hilos. Estas imágenes representan redes porosas después del sembrado de cluster de poros y los pasos de asignación de enlaces; es decir, que se permite la existencia de violaciones a las RG . El código de color asignado en las Figuras 7.3, 7.4 y 7.5 es como sigue: los poros grandes se muestran de color rojo, los poros de tamaño medio de color azul y los poros pequeños en color azul claro.

La Figura 7.4 muestra las anteriores redes porosas después de eliminar por completo las violaciones a las RG a través de la aplicación de MCs . En las Figuras 7.4a y 7.4b, se puede observar que aun quedan estructuras de poro cúbicas que en redes porosas reales no se presentan.

Después de aplicar un número adicional de MCs le isotropía de la red se mejora, obteniendo redes porosas que representan redes porosas más reales, como se muestra en las Figuras 7.5a y 7.5b.

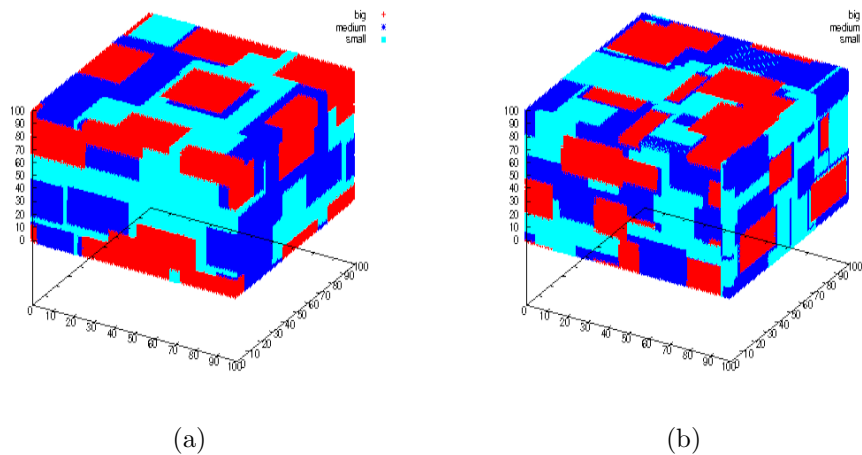


Figura 7.3: Redes porosas que permiten violaciones a las GR , con $L = 100$ y $\Omega = 0,15$, obtenidas con (a) BSGR y (b) BSGR Paralelo utilizando 8 hilos

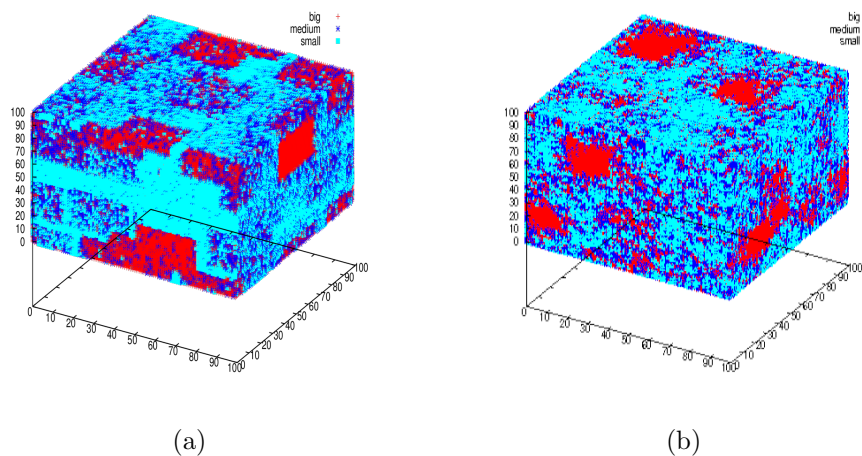


Figura 7.4: Redes porosas libre de violaciones a las GR , con $L = 100$ y $\Omega = 0,15$, obtenidas con (a) BSGR and (b) BSGR Paralelo utilizando 8 hilos

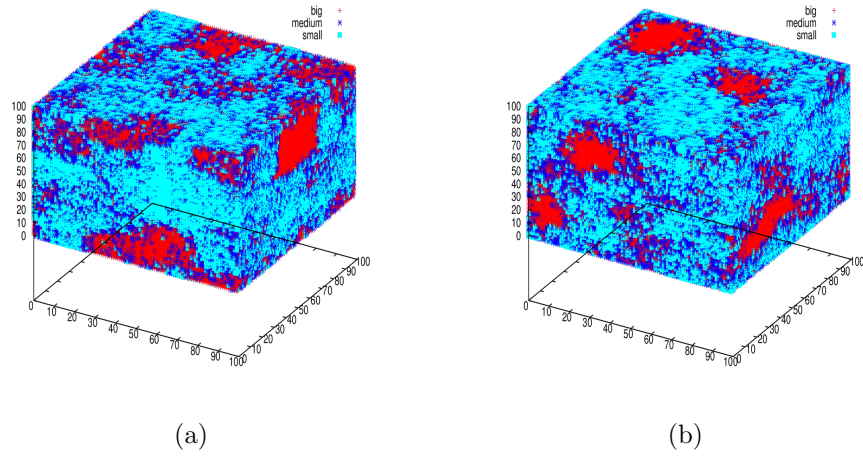


Figura 7.5: Redes porosas después de aplicar 2,000 MCs adicionales, con L Pore networks after the application of 2000 additional MCs , con $L = 100$ y $\Omega = 0,15$, obtenidas con (a) BSGR and (b) BSGR Paralelo utilizando 8 hilos

Capítulo 8

Conclusiones y Trabajo Futuro

Nota: Este apartado esta siendo traducido del artículo que se presentara en el workshop PDSEC 2014 2014 en el Congreso IEEE IPDPS 2014, adicionalmente se complementara con resultados de pruebas en progreso.

In this work, a basic solution, BSGR, to simulate pore networks under the existence of Geometrical Restrictions was proposed. This approach is a contribution in the study of more realistic pore materials. In order to offer an efficient solution, we also proposed a parallel version of BSGR. The parallel algorithm was designed by using a set of threads which cooperate in the construction of the pore network. A dynamic data partitioning was performed among the executing threads. Our results indicated that the proposed parallel algorithm outperformed its sequential counterpart, for example in a configuration with $L = 100$, $\Omega = 0,13$ and using 16 threads the acceleration obtained was 20,6 times faster. Future work includes the design and comparison of different versions of our parallel solution using different architectures like clusters, multi-core processors and GPU's.

Referencias

-
- [1] S. Cordero, et al., "Review: Site-Bond Network Modeling of Disordered Porous Media," vol. 21, pp. 101–116, 2004.
 - [2] S. Cordero, F. Rojas, J.L. Riccardo, "Simulation of three-dimensional porous networks," *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, vol. 187–188, pp. 425–438, 2001.
 - [3] G. Román, F. Rojas, M. Aguilar, S. Cordero, M.A. Castro, "In-silico simulation of porous media: Conception and development of a greedy algorithm," *Microporous and Mesoporous Materials*, vol. 137, pp. 18–31, 2011.
 - [4] J. Matadamas, G. Román-Alonso, F. Rojas, M. Castro, A. Boukerche, M. Aguilar, S. Cordero, "Parallel Simulation of Pore Networks Using Multicore CPUs", *IEEE Transactions on Computers*, 2012.
 - [5] "Refinements of the Twofold Description of Porous Media", Mayagoitia V., Rojas F., Kornhauser I., Zgrablich G., Faccio R.J., Gilot B., and Guiglion C., *Langmuir*, 12, 211–216, 1996.
 - [6] B. Chapman, G. Jost, R. van der Pas, "Using OpenMP: Portable Shared Memory Parallel Programming," *The MIT Press*, pp. 384, 2007.
 - [7] C.H. Moreno, F. Rojas, G. Román, S. Cordero, M.A. Castro, M. Aguilar, "A Parallel Simulator for Mercury (Hg) Porosimetry," M. Ropo et al. (Eds.): *EuroPVM/MPI 2009*. LNCS, Springer, vol. 5759, pp. 294–304, 2009.
 - [8] M. Sahimi, "Flow phenomena in rocks: from continuum models to fractals, percolation, cellular automata, and simulated annealing," *Rev. Mod. Phys.* 1993, 65(4), 1393–1534.
 - [9] U. Gil-Cruz, M. A. Balderas-Altamirano, S. Cordero-Sánchez, "Textural study of simulated dimorphic porous substrates," *Colloids Surf. A*, 2010, 357(1–3), 8492UTF{2013}90.
 - [10] M.D. Kalugin, and A.V. Teplukhin, "Parallel Monte Carlo study on caffeine-DNA interaction in aqueous solution", *IPDPS*, pp.1–8, 2009 *IEEE International Symposium on Parallel & Distributed IP Processing*, 2009.

- [11] V. Mayagoitia, F. Rojas, I. Kornhauser and H. Pérez-Aguilar. "Modeling of Porous Media and Surface Structures: Their True Essence as Networks," *Langmuir*. vol. 13, pp. 1327-1331 1997.
- [12] T. Sterling. "Beowulf Cluster Computing with Linux," MIT Press, Cambridge, 2001.
- [13] David R. Butenhof, "Programming With Posix Threads," Addison-Wesley, 1997.
- [14] H. Chung, C. Chang, H. Hsiao and Y. Chao, "The Load Rebalancing Problem in Distributed File Systems," *Cluster Computing (CLUSTER)*, IEEE International Conference on, pp.117,125, 24-28 Sept. 2012.
- [15] M. Newman and G. Barkema, "Monte Carlo Methods in Statistical Physics," Oxford University Press, Chap. 2, pp. 31-44, 2007.
- [16] A. González-Méndez, G. Román-Alonso, F. Rojas-González, M.A. Castro-García, M. Aguilar-Cornejo, and S. Cordero-Sánchez; "Construction of Porous Networks subjected to Geometric Restrictions by using OpenMP"; IEEE 28th International Parallel & Distributed Processing Symposium Workshops, Phoenix, USA, pp. 1189-1197, 2014.
- [17] Fernando Rojas-González, Graciela Román-Alonso, Salomón Cordero-Sánchez, Miguel Alfonso Castro-García, Manuel Aguilar-Cornejo and Jorge Matadamas Hernández; Book Chapter 1: "On The Conception and Assessment of Mesopore Networks: Development of Computer Algorithms"; Nova Science Publishers, Inc. pp.1-28, to appear, 2014.