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. **Mayo de 2016**

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 algorítimica 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 seguna 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

Índice de figuras

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: multiprocesador, 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 accesar 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. Ademas 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 un 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 al 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 sitos 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).

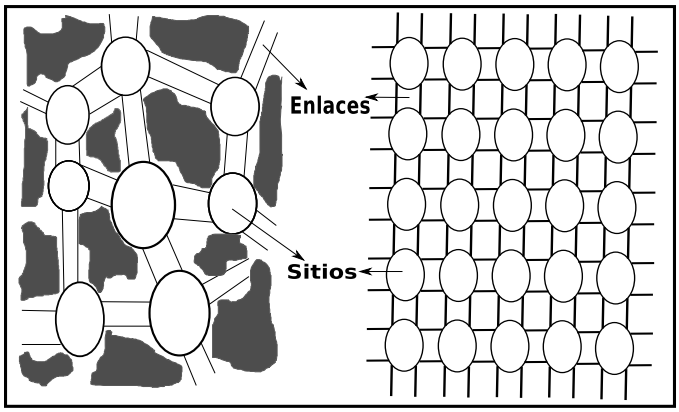


Figura 2.1: Representación bidimensional de un material poroso mediante el MDSE

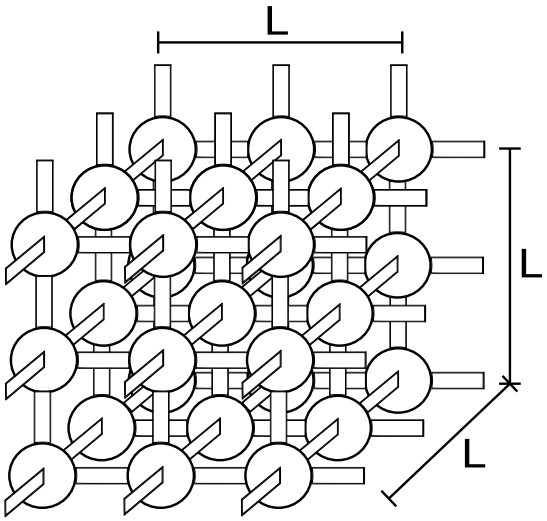


Figura 2.2: Red porosa con los sitios representados por esferas y los enlaces representados por cilindros, con $C = 6$

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 $FS(RS)$ 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.

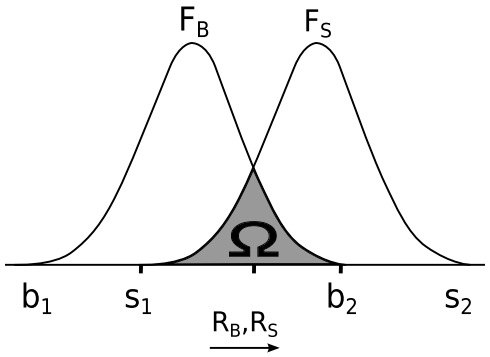


Figura 2.3: Traslape entre las distribuciones F_B y F_S

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.

$$R_B^2[i] + R_B^2[j] \leq R_S^2 \tag{2.1}$$

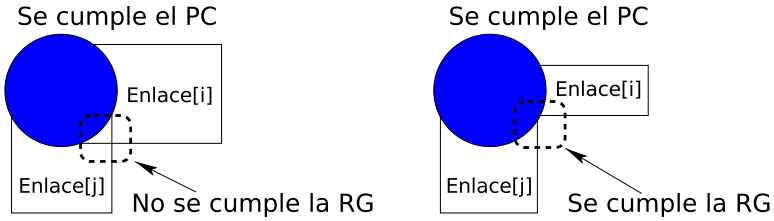


Figura 2.4: Representación del PC y RG en un sitio con dos enlaces vecinos

La creación de redes porosas de gran tamaño requiere de grandes recursos de cómputo debido a que un medio poroso esta 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 distribuci'on 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 sitios 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 logar 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 rellenado 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.

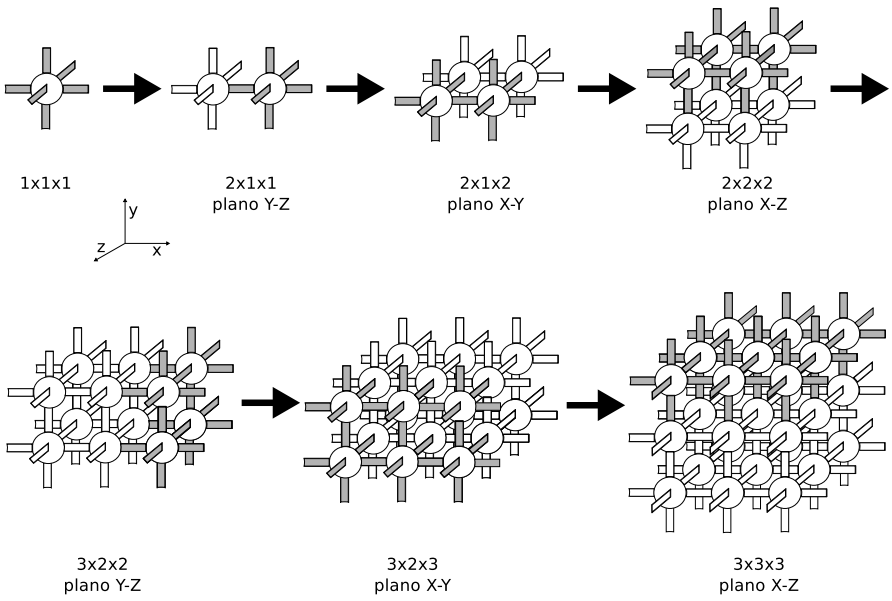


Figura 4.1: Construcción de un cluster de tamaño 3x3x3 con el algoritmo NoMISS

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 especificas 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 este última parte los Pasos 2 y 3 son repetidos por un número determinado de veces, para mejorar la isotropía de la red porosa.

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, lo pasos del algoritmo son los siguientes:

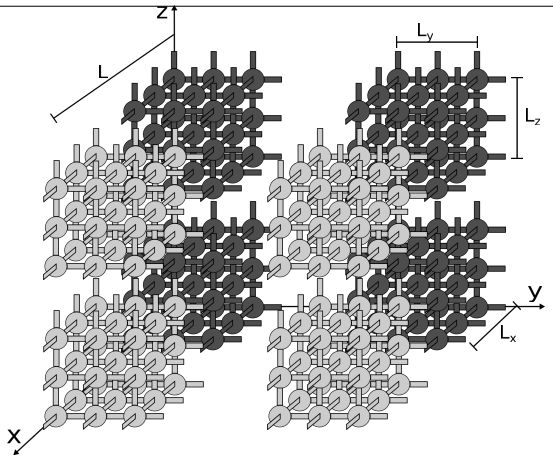


Figura 4.2: Distribución de una red porosa entre 8 nodos o procesos MPI

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 rellenado 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 un serie de trasferencias 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 rellenado, 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 difćil mejorar la isotropía de la red, sobre todo cuando se tenían translapes 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 sigientes:

Paso 1. Generación de poros: Aquí cada proceso ejecuta simuiltáneamente 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 trasfieren la mitad de su subred a sus respectivos vecinos en el toro (en las tres direcciones x, y y z), y entre cada trasferencia 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 translapes 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 trasferencias 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 ísotropía 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 Retricciones 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 retricciones. Sin embargo, debido a que los enlaces y sitios se generan de forma aleatoria fue muy difícil encontrar configuraciones válidas, lo que se trasformaba en tiempos de ejecución muy altos y como resultado solo se logro generar redes porosas con traslapes muy pequeños ($\Omega <= 0{,}0007$) 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 prosas 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 de Redes Porosas respetando RG

En este capítulo se describen dos algoritmos secuenciales 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 tres grandes fases: inicalización de la red porosa con sitios y enlaces, la generación de una red porosa válida y el mejoramiento de la isotropía. Como se ha dicho anteriormente, 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 inicializar toda la red. Por otra parte, la inicialización del segundo algoritmo primero asigna los sitios a la red basándose en el método de sembrado del algoritmo secuencial NoMISS; la diferencia ahora es que los sitios que conforman a los clusters no tienen enlaces asignados. Es inmediatamente después del sembrado que el segundo 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 inicalización, es posible que ambos algoritmos hayan generado redes porosas que tienen violaciones a las RG, por lo que la segunda fase consiste en la eliminación de dichas violaciones utilizado el Método de Monte Carlo. Por último, la tercera fase se encarga del mejoramiento de la isotropía de las redes porosas. A continuación se describe a detalle cada algoritmo.

5.1. Solución Básica Aleatoria basada en el Método de Monte Carlo: Inicialización

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 tamaños de radio de sitios, en base a la distribución $F_S(R_S)$; conforme se van generando los sitios éstos 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. Se puede apreciar que al sitio de color gris obscuro le comparten un enlace cada uno de sus sitios vecinos que están representados en color gris claro, a su vez el sito de color gris obscuro 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.

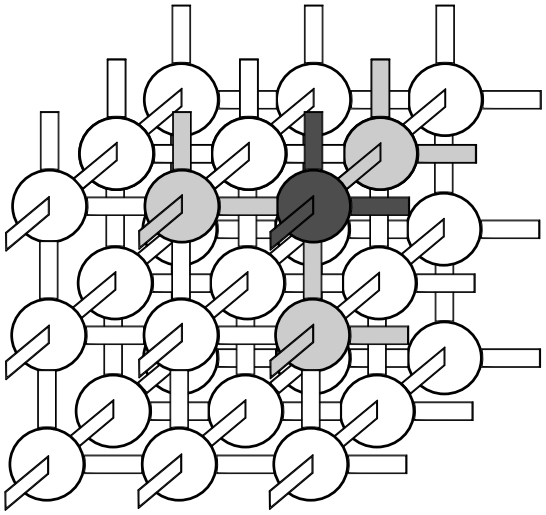


Figura 5.1: Red porosa inicalizada con L^3 sitios y $3 \cdot L^3$ enlaces, con L=3.

5.2. Solución Híbrida: Inicialización

El algoritmo que se presenta a continuación [17] 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 (con base al tamaño de los sitios y enlaces, respectivamente) mediante un algoritmo de ordenamiento por inserción. De esta manera, el primer sitio/enlace de cada lista es el que tiene el mayor tamaño respecto a los otros elementos subsecuentes. La primera lista L_S se compone de L^3 radios de sitios, mientras que la segunda, L_B, contiene $3L^3$ enlaces. Después de la creación de las listas se lleva acabo el proceso de sembrado y rellenado de sitios basado en el algoritmo NoMISS descrito en la Sección 4.1.2. Al finalizar esta parte, sigue el proceso de asignación de enlaces a los sitios. A continuación se describe a detalle el algoritmo.

5.2.1. Sembrado de Clusters de Sitios

Durante todo el proceso de sembrado y rellenado de sitios en 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 crear un cluster de sitios de tamaño $ClusterSize$, el cual tendrá la forma de un cubo; este procedimiento se describe en las lineas 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 cluster de tamaño $ClusterSize$ alrededor de cada semilla se repite p veces, donde p es el 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 posiciones ya ocupadas (en las que existe traslape) y se continua el sembrado de los sitios en los espacios aun vacíos.

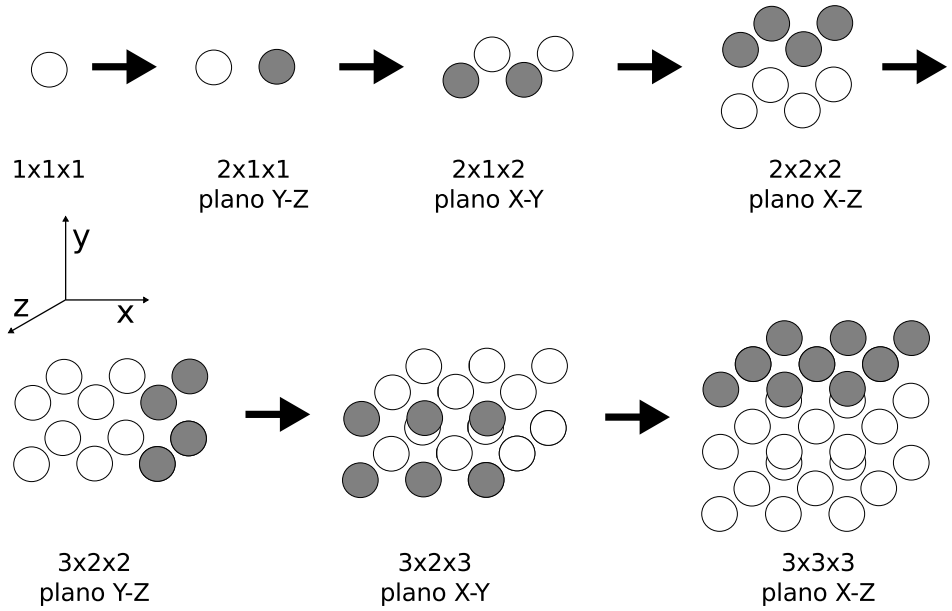


Figura 5.2: Sembrado de un cluster de sitios de tamaño 3x3x3

En la Figura 5.3 se representa 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 (lineas 7-9 del Algoritmo 1) siguiendo las mismas reglas de construcción de cluster anteriores, con la diferencia de que se establece $ClusterSize = L$. Con esto se garantiza que todos los espacios vacíos de la red porosa serán inicializados.

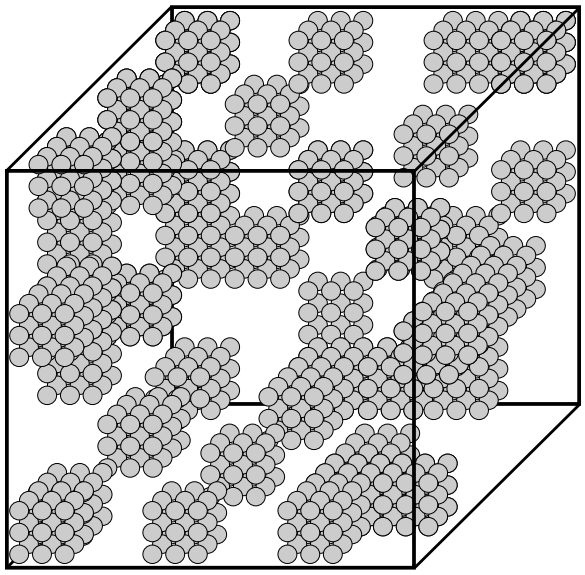


Figura 5.3: Red Porosa después del proceso de siembra de clusters

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: $pnet[i][j][k] \leftarrow$ FIRST(L_S) // i, j, k:posición aleatoria
3: **for** $p \leftarrow 1$ **to** $ClusterSize$ **do**
4: INSERTPCLUSTER($pnet, i, j, k, \&L_S, \&L_{SC}$)
5: **end for**
6: **end for**
7: **while** SIZE(L_S) > 0 **do** // i, j, k:La posición de la primera semilla
8: 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 de tamaño similar a encontrar un enlace que conecte dos sitios de tamaños distintos (o muy distintos). En contraste con las 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 consiste en asignar 6 enlaces, primero a los sitos más grandes, luego se continúa con los sitios más pequeños de la red. Para este fin, los elementos de la lista L_{SC} son tomados uno a uno desde la primera posición de la lista. Como se mencionó anteriormente, cada elemento de L_{SC} contiene la posición en la cual cada sitio fue asignado 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 almacenará la posición dentro de la red del sitio más grande de la lista. Cuando una posición es tomada de L_{SC}, se le intenta conectar $C = 6$ enlaces al sitio en dicha posición; 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. Si el primer enlace de L_B no permite que se cumplan las restricciones respecto a los enlaces previamente asignados al sitio, se intenta tomar al siguiente enlace en la lista, así hasta encontrar un enlace que permita el cumplimiento de las restricciones PC y 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 ocasiona la existencia de violaciones a las RG en la inicialización de la red. En el Algoritmo 2 se muestra este comportamiento.

Algoritmo 2 Asignación de enlaces

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

```
while SIZE(L_SC) > 0 do
    (i, j, k) ←FIRST(L_SC) // se retira el primer elemento de la lista
    for p ← 1 to C do // C = 6 para una red cúbica
        ASSIGNEBONDSRG(pnet, i, j, k, p, &L_B)
    end for
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, la red porosa puede tener violaciones a las RG. Como se explicó anteriormente, la Solución Básica Aleatoria no verifica el cumplimiento de las RG al asignar un enlace a un sitio debido a que es un método completamente aleatorio. Por otra parte, la Solución Híbrida intenta conectar los enlaces grandes con los 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 para ambos algoritmos, el número de violaciones a las RG está directamente relacionado con el valor del traslape (Ω).

Para eliminar las violaciones al PC y RG los algoritmos aplican un número sucesivo de pasos de Monte Carlo, hasta obtener una red válida, tal y como lo hace el algoritmo secuencial BiaSED descrito en la Sección 4.1.1. A diferencia del algoritmo BiaSED, los algoritmos previamente descritos en las secciones 5.1 y 5.2 también consideran el cumplimiento de RG en cada uno de los intercambios de poros, si esto no ocurre, el intercambio es rechazado. La fase 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.

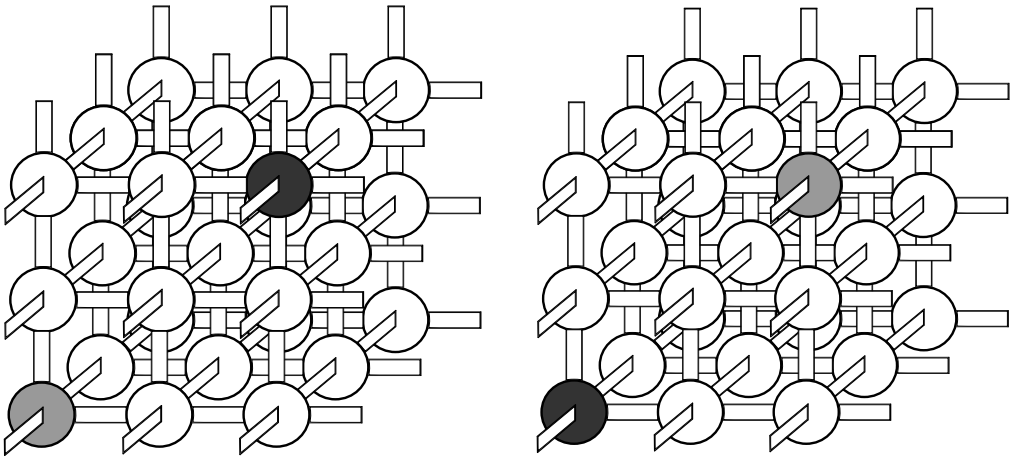
Algoritmo 3 Esquema de genración de una red porosa válida

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 entre dos sitios y entre dos enlaces respectivamente. En las Figuras 5.6 y 5.7 se muestra un ejemplo de intercambio inválido 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 tamaños de sitios como de los enlaces de la red porosa y si este mismo es muy grande puede que el algoritmo 3 no termine.

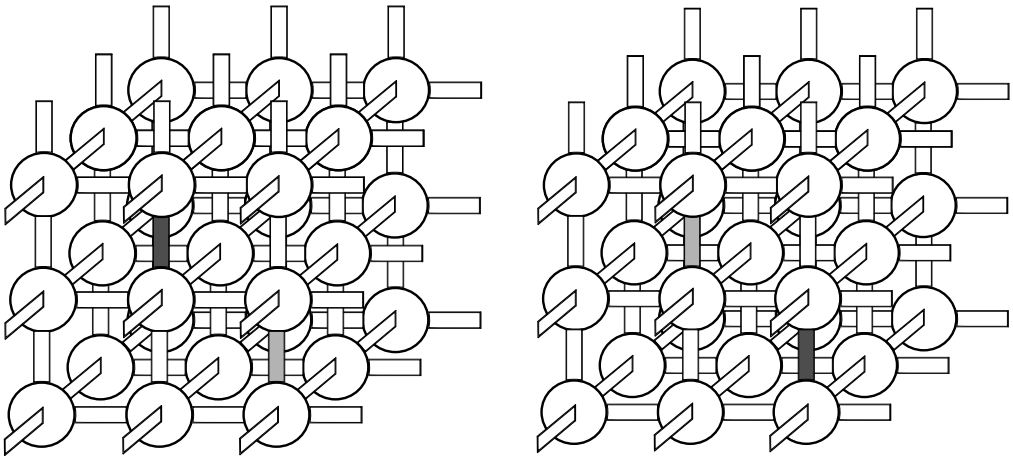
5.4. Mejoramiento de la isotropía

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 esto, después de generar una red porosa válida se aplican una número extra de pasos de MC, siguiendo las mismas reglas utilizadas en la sección anterior. Cabe destacar que el número extra de pasos de MC necesarios para mejorar la isotropía hasta ahora ha sido determinado de manera experimental y depende directamente del traslape(Ω) entre sitios y enlaces.



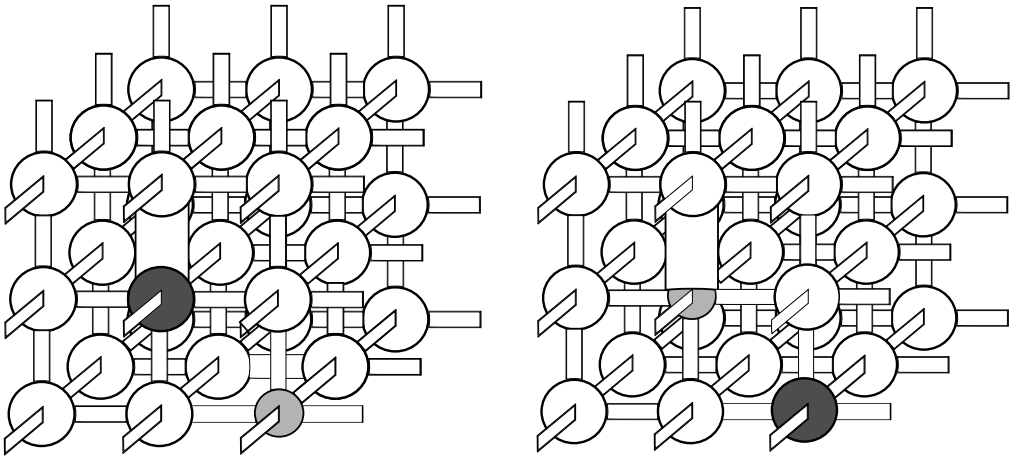
(a) Selección de los sitios a intercambiar (b) Intercambio de sitios

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



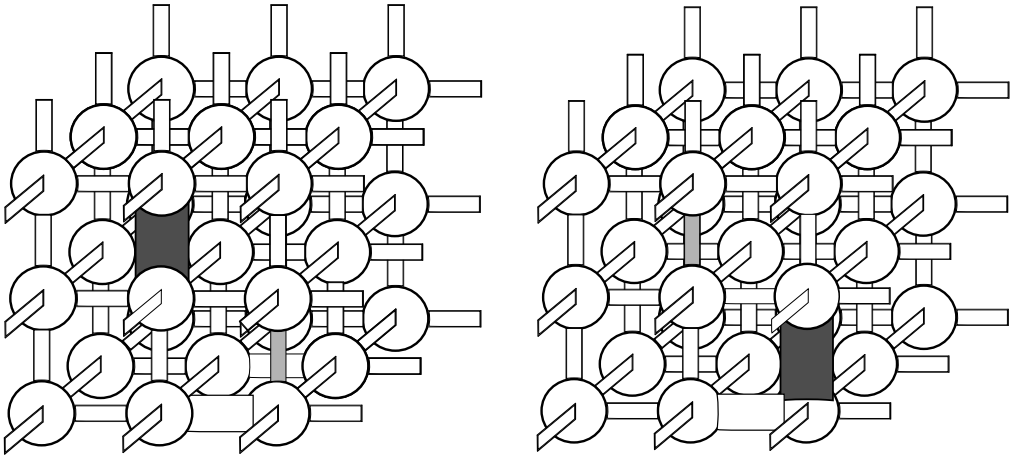
(a) Selección de los enlaces a intercambiar (b) Intercambio de sitios

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



(a) Selección de los sitios a intercambiar (b) Intercambio de sitios

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



(a) Selección de los enlaces a intercambiar (b) Intercambio de enlaces

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

Capítulo 6

Construcción Paralela de Redes Porosas 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 algoritmos presentados en el capítulo anterior. El primer paso para las dos soluciones paralelas es la distribución espacial de la red entre los hilos a utilizar dicha distribución es igual para ambos algoritmos. Después de la distribución espacial de red cada algoritmo comenzara con su respectivo procedimiento de construcción (inicialización, eliminación de violaciones y mejoramiento de la isotropía) en paralelo. Primero presentaremos el algoritmo común de distribución espacial y luego la paralelización de las etapas de construcción.

6.1. Distribución Dinámica 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 es dividir la red en N partes 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 en a, b, y c partes, respectivamente. 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. Por ejemplo, si tomamos $N = 4$, una configuración generada sería $a = 1, b = 2, c = 2$, mientras que para $N = 45$ una configuración generada sería $a = 3, b = 3, c = 5$, y para $N = 27$ una configuración generada sería $a = 3, b = 3, c = 3$, 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 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.

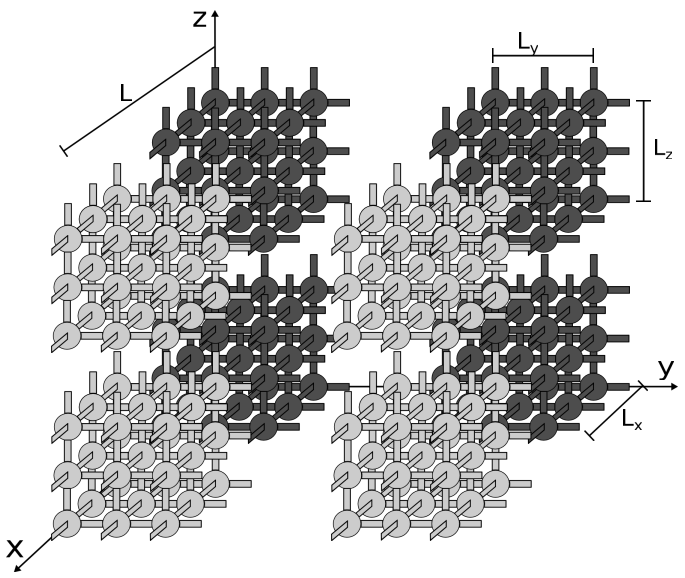
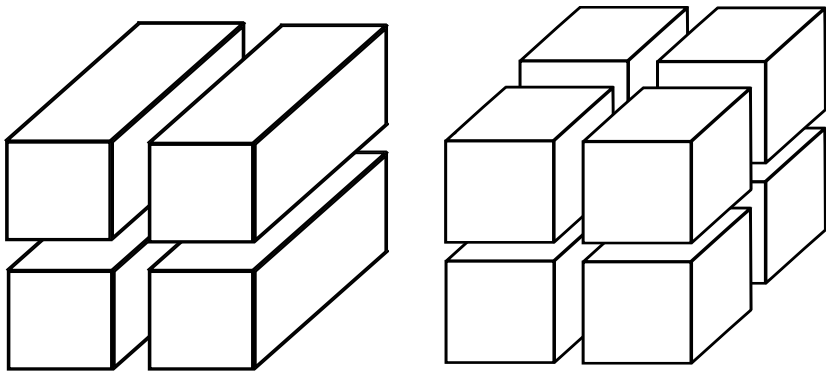
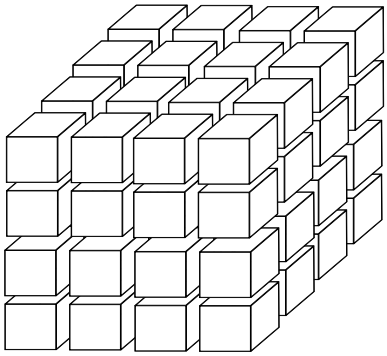


Figura 6.1: Red porosa dividida en ocho subredes; $N = 2 \cdot 2 \cdot 2$



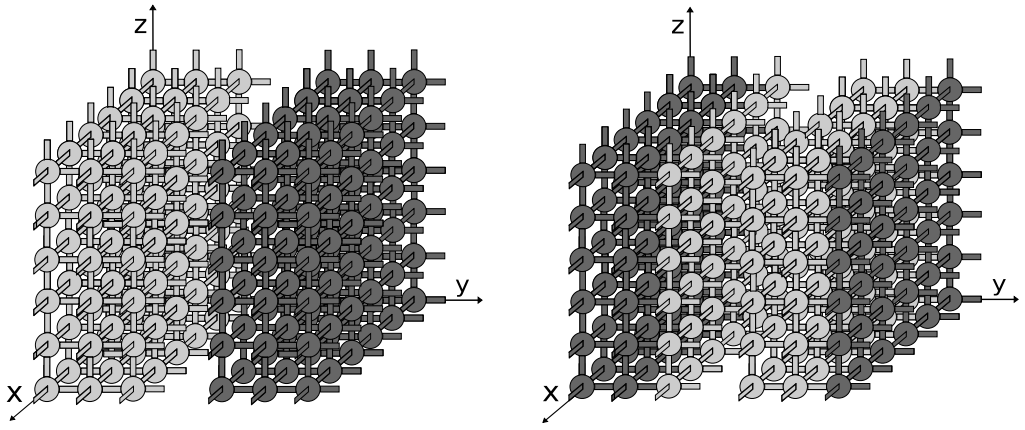
(a) $(1, 2, 2)$ (b) $(2, 2, 2)$



(c) $(4, 4, 4)$

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

Para permitir que la distribución del espacio de la red porosa no sea siempre el mismo, en este trabajo se propone una distribución dinámica en donde el particionamiento no siempre empieza a partir del origen (0,0,0) de la red. Se propone un cambio de origen con el propósito de obtener un desplazamiento lógico del espacio de la red, para que los hilos puedan trabajar en subredes independientes y diferentes de la red porosa. En la Figura 6.3 se muestra un red porosa distribuida a partir del origen (0,0,0) entre dos hilos (Figura 6.3a) y un ejemplo de un desplazamiento lógico sobre y, con cambio de origen a (0,2,0), puede verse en la Figura 6.3a. En esa figura se observa que las subredes sobre las cuales trabajaran los hilos han cambiado, esta es una de las grandes ventajas de trabajar sobre memoria compartida ya que el tiempo que toma un desplazamiento es totalmente despreciable ya que en ningún momento existe algún tipo de trasferencia física de los datos. Al contrario, si se utilizase memoria distribuida esta operación de desplazamiento se traduciría en trasferencia de datos entre nodos tal y como se comento en la Sección 4.2, dicha trasferencia podría trasformarse en un cuello de botella.



(a) Distribución inicial (b) Desplazamiento sobre y

Figura 6.3: Ejemplo de un desplazamiento lógico (a) Posición inicial (0,0,0), (b) desplazamiento sobre y (0,2,0)

6.2. Solución Paralela Aleatoria basada en el Método de Monte Carlo

Una vez que se determinó la distribución del espacio de la red porosa entre N hilos como se presentó en la sección anterior, cada hilo trabaja de forma independiente en una de las subredes de tamaño $L_x \cdot L_y \cdot L_z$; la Figura 6.1 muestra un ejemplo de distribución de espacio poroso entre 8 hilos. En 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 inicializada con sitios, a cada sitio se le asignan únicamente tres enlaces: izquierdo, trasero y superior. La asignación de dichos enlaces permite inicializar

el contorno completo de cada sitio, evitando la sincronización entre los hilos que accesan las caras externas de subredes adyacentes dentro de la red porosa global.

6.2.1. Generación de una Red Porosa Válida

Después de que la red porosa ha sido inicializada ésta puede contener violaciones a las RG ya que al igual que su respectiva versión secuencial la inicialización no verifica el cumplimiento de las RG al asignar un valor a los enlaces. En seguida, para eliminar las violaciones se aplica una serie de MCs Paralelos; este comportamiento se resume en el Algoritmo 4. Cada paso de MC Paralelo implica que cada hilo aplicará un paso de MC normal tal y como se hace en el algoritmo secuencial descrito en la sección 5.3, trabajando sobre su respectiva subred y omitiendo las caras externas (lineas 7-12 del Algoritmo 4). Al omitir las caras externas se evita la sincronización entre hilos que poseen subredes adyacentes.

Para que cada poro(sitio o enlace) de las caras externas de cada subred tenga la posibilidad de intercambiarse con otro, se realizan desplazamientos lógicos a lo largo de los ejes x, y y z después de ejecutar cada paso de MC Paralelo(linea 17 del algoritmo 4). Con dichos desplazamientos se logra que caras externas en un momento queden al interior de una subred. Al igual que en la versión secuencial los pasos de MC Paralelos se repetirán hasta eliminar por completo las violaciones a las RG.

6.3. Solución Paralela Híbrida

A continuación describiremos el algoritmo paralelo correspondiente al algoritmo secuencial descrito en la sección 5.2. Al igual que en su versión secuencial el algoritmo presentado en esta sección se compone de 3 principales pasos: inicalización (sembrado de clusters de sitios y asignación de enlaces), generación de una red porsa válida y mejoramiento de isotropía. El algoritmo hace uso del algoritmo de distribución dinámica descrito en la sección 6.1 para distribuir la red porsa entre los N hilos a utilizar. Cada hilo ejecuta en paralelo la etapa de inicilización, luego se aplican sucesivos pasos de MC paralelos para eliminar las violaciones a las RG. Al finalizar el algoritmo obtiene una red porosa libre de violaciones a las RG.

6.3.1. Inicialización

Igual que en el algoritmo basado en Monte Carlo, en esta versión Híbrida los hilos trabajan en subredes diferentes. En la inicialización cada hilo genera dos listas ordenadas L_S y L_B, también se crea la lista L_{SC} la cual inicialmente estará vacía. L_S contiene L' elementos de tamaños de sitos ordenados de forma descendente, y L_B contiene $3L'$ elementos de tamaños de enlaces ordenados también de forma descendente, donde L' es igual a $L_x \cdot L_y \cdot L_z$. Cabe destacar que L' es local a cada hilo ya que aun cuando el algoritmo de distribución de la red intenta que las subredes sean del mismo tamaño,

Algoritmo 4 Algoritmo paralelo de MC para generar una red porosa válida

Require: *pnet*: red porosa
Require: *dist*: Arreglo con la distribución de la red
1: $continue \leftarrow$ GRviolations($\&pnet$) > 0
2: **omp parallel private** $(tid, nMCs, exchanges)$
3: $tid \leftarrow$ OmpGetTid( )
4: $nMCs = 4((dist[tid].L_x - 2) \cdot (dist[tid].L_y - 2) \cdot (dist[tid].L_z - 2))^3$
5: **while** *continue* **do**
6: $exchanges \leftarrow nMCs$
7: **while** $(exchanges - -) > 0$ **do**
8: PoreExchange($\&pnet, \&dist[tid]$)
9: **if** NonValidExchange($\&pnet, \&dist[tid]$) **then**
10: RejectExchange($pnet, dist[tid]$)
11: **end if**
12: **end while**
13: **omp barrier**
14: **omp master**
15: $continue \leftarrow$ GRviolations($\&pnet$) > 0
16: **if** *continue* **then**
17: Shift($\&pnet, \&dist[tid]$) // desplazamiento sobre (x, y, z)
18: **end if**
19: **end omp master**
20: **omp barrier**
21: **end while**
22: **end omp parallel**

existen casos en los cuales no es posible, ésto da como resultado subredes de diferentes tamaños. La sincronización entre los hilos no es necesaria para el uso o modificación de las listas L_S, L_{SC} y L_B porque estas listas son locales a cada hilo.

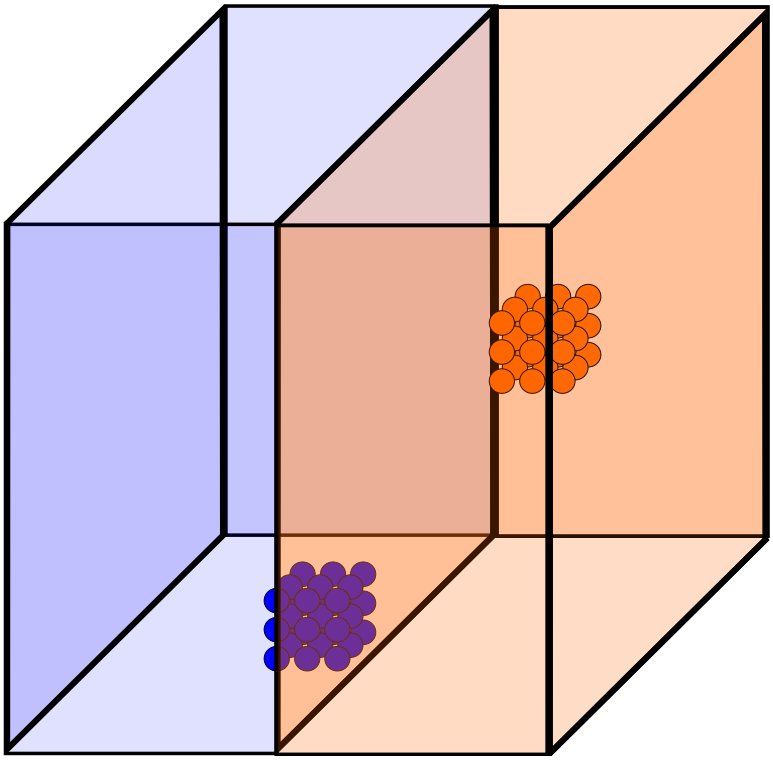
Sembrado de Clusters y Rellenado de la Red Porosa

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 asignará 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) de distribución se desplaza de forma aleatoria a lo largo de los ejes x,y y z en un rango que esta entre 0 y $L - 1$. El cambio de origen de distribución nos ayuda a que cada hilo tenga la posibilidad de sembrar un cluster en cualquier posición de la red porosa.

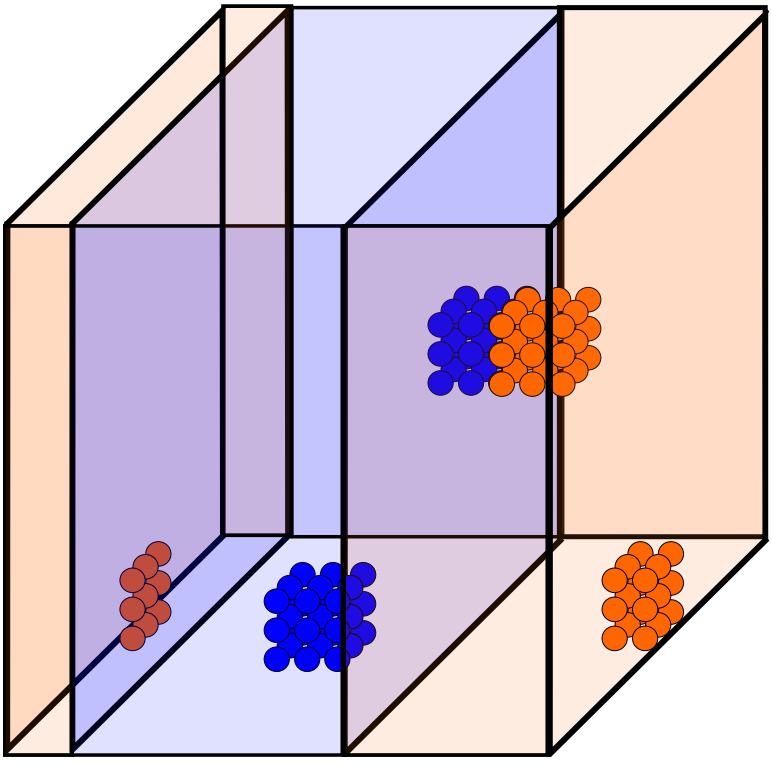
El la Figura 6.4 se muestra un ejemplo del cambio de origen durante el proceso de sembrado. La Figura 6.4a muestra dos clusters de sitios construidos al tener el origen de la red porosa inicialmente en $(0, 0, 0)$. Si movemos el origen a $(0, L/2, 0)$, esto causaría que las áreas de trabajo(subredes) de cada hilo cambien para construir en paralelo otro cluster de sitios, como se muestra en la Figura 6.4b. Las áreas de trabajo de cada hilo se resaltan en color azul y naranja, antes y después del desplazamiento. El cambio de origen, además de permitir que las caras externas de cada subred sean tomadas en cuenta durante el sembrado, nos permite hacer parecer(emular) que la red porosa fue inicializada por un solo hilo como en la versión secuencial, ya que prácticamente cada hilo podría trabajar en algún momento en cualquier parte de la red porosa.

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, debido a posibles translapes durante el sembrado de clusters, en este momento el número de sitios en las listas L_S de cada hilo es diferente. Puede ser que para algunos hilos los sitios que tienen en sus listas L_S no sean suficientes para rellenar su subred, mientras que para otros el número de sitios en sus listas L_S puede ser mayor al de los requeridos para rellenar su subred. Para solucionar este problema 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 5 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 tiene contexto global



(a) Distribución inicial del espacio



(b) Distribución posterior del espacio

Figura 6.4: (a) Origen en $(0, 0, 0)$ y (b) cambio de origen a $(0, L/2, 0)$

por lo cual es una variable compartida.

La primera etapa consiste en el calculo del número de sitios requeridos; cada hilo calcula $M[id]$ como se indica en la linea 1 del Algoritmo 5. En el segundo paso, los hilos que tienen $M[id] < 0$ (los que tienen sitios de sobra) insertan su id en la lista compartida de Hilos Pesados denotada por HT,(line 4). Esta inserción se hace a través de exclusión mutua entre los hilos (lineas 2-6). Después todos los hilos se sincronizan mediante un mecanismo de barrera (linea 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 (lineas 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 (lineas 13 y 17), los nuevos valores $M[id]$ y $M[k]$ se actualizan, como se muestra en las lineas 14, 15, 18 y 19. En caso de que un hilo en HT había dado todos sus sitios sobrantes, éste es removido de la lista HT (linea 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 queda vacía.

Asignación de Enlaces

En la parte del sembrado de clusters de sitios cada hilo también mantuvo su lista L_{SC} del mismo modo que se hace en la versión secuencial. 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 los elementos de cada lista L_{SC} están dispersos en todo el espacio de la red porosa.

Debido a las acciones realizadas en la sección anterior las listas L_{SC} 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 de la sección anterior (Algoritmo 5), con dos cambios. El primer cambio sustituye en todo el algoritmo L_S por L_{SC} y el segundo cambia la linea 1 por $M[id] = SNS[id] - Size(L_{SC}[id])$.

Una vez que las listas están balanceadas, cada hilo, toma las posiciones de los sitos 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 necesitaría al conectar los enlaces compartidos (derecho, frontal e inferior). Al finalizar este paso se obtiene una red porosa con posibles violaciones al PC y a las RG.

Algoritmo 5 Algoritmo de redistribución de los sitos 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
```

6.3.2. Generación de una red porosa válida

Para que la red creada a partir de los pasos descritos en las secciones anteriores sea válida en términos del PC y de las RG, es necesario aplicar una serie de pasos de MC Paralelos Modificados (MMC-Paralelos). MMC-Paralelos se basa en los MCs Paralelos utilizados en la Sección 6.2.1 con dos grandes modificaciones. La primer modificación es que se utiliza la operación de cambio de origen y la segunda es que a cada hilo se le asignan dos subredes. Ambas modificaciones fueron pensadas para que, al igual que un paso de MC normal, cada poro pueda ser intercambiado por cualquier otro de la red porosa. Por cada intercambio de sitios o enlaces durante un $MMCs$ se verifica que se cumpla tanto con el PC y las RG. A continuación se detallan los pasos para la eliminación de las violaciones a las RG:

1. La red porosa es dividida en $2N$ subredes como se describe 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 desplaza de forma aleatoria para que los hilos puedan trabajar en regiones distintas de la red a las que inicialmente se les asignaron
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

6.4. Mejoramiento de la isotropía

Para mejorar la isotropía es necesario aplicar un numero adicional (K) de pasos de MMC-Paralelos para las redes creadas ya sea por el algoritmo de la Sección 6.2

o el algoritmo de la Sección 6.3 respectivamente. En el primer caso se sigue el mismo procedimiento del algoritmo descrito en la Sección 6.2.1 y en el segundo se sigue el procedimiento descrito en la Sección 6.3.2, ambos procedimientos se deben de repetir K veces.

Capítulo 7

Resultados

El algoritmo Solución Paralela Aleatoria(SPA) descrito en la Sección 6.2 y el algoritmo Solución Paralela Híbrida(SPH) descrito en la Sección 6.2 se implementaron haciendo uso del API de OpenMP versión 3, las pruebas de estos se realizaron en un equipo de computo con las siguientes características: 16GB de memoria RAM y un procesador Intel(R) Core(TM) i7 CPU Extreme Edition con 6 cores(12 con multithreading). Los respectivos versiones algoritmos secuenciales Solución Aleatoria(SA) descrito en la Sección 5.1(SA) y Solución Híbrida(SH) descrito en la Sección 5.2 se probaron en el mismo equipo de computo haciendo uso de un único procesador(core).

Con las soluciones SA, SH, SPA y SPH se pueden construir redes porosas que cumplan tanto PC y las RG; sin embargo el ordenamiento y búsqueda de sitios y enlaces se transforma un mayor numero de cálculos para las versiones SH y SPH. En las Figura 7.1 y 7.2, se muestran los distintos tiempos de construcción para una red porosa de tamaño $L = 100$ utilizando y variando el traslapeΩ, en ambas figuras podemos observar que conforme el traslape aumenta el tiempo de ejecución también aumenta esto se debe a que tanto en las versiones secuenciales y paralelas el encontrar enlaces que cumplan con las RG para un sitio se vuelve mas complicado lo que se traduce un notable incremento en numero de cálculos.

Comparando las versiones SA y SPA se puede ver en la Figura 7.1 que SPA comienza a tener un mejor rendimiento en términos de tiempo cuando el traslape es cercano o mayor a 0,1 esto se debe a que el numero de violaciones a las RG aumenta y por consiguiente el numero de pasos de Monte Carlo para eliminarlas incrementa y es donde al incrementar el numero de hilos comienza a mejorar el rendimiento.

Comparando las versiones SH y SPH se puede ver en la Figura 7.2 que SPH siempre es mejor en términos de tiempo independientemente de valor del traslape esto se debe al procedimiento de sembrado de sitios y asignación de enlaces, lo que permite una mejor distribución del trabajo entre los hilos.

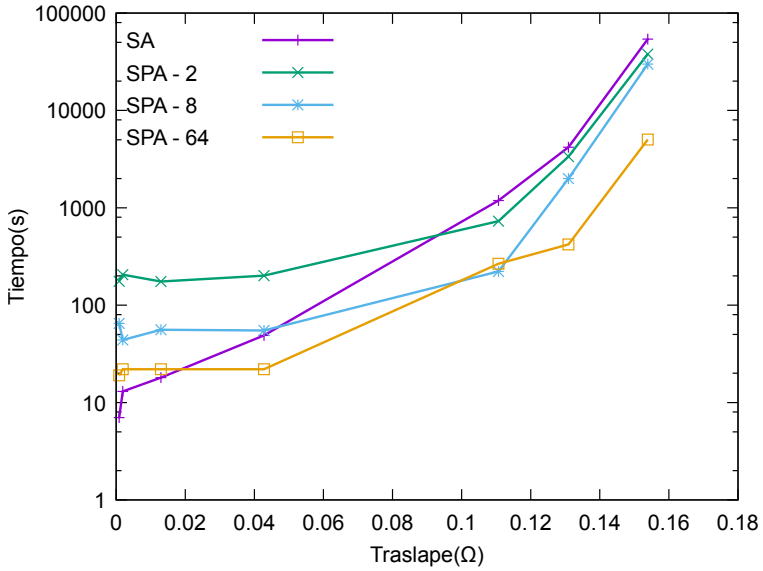


Figura 7.1: Tiempos de ejecución de SA y SPA utilizando 2,8 y 64 hilos bajo diferentes valores de Ω (escala logarítmica)

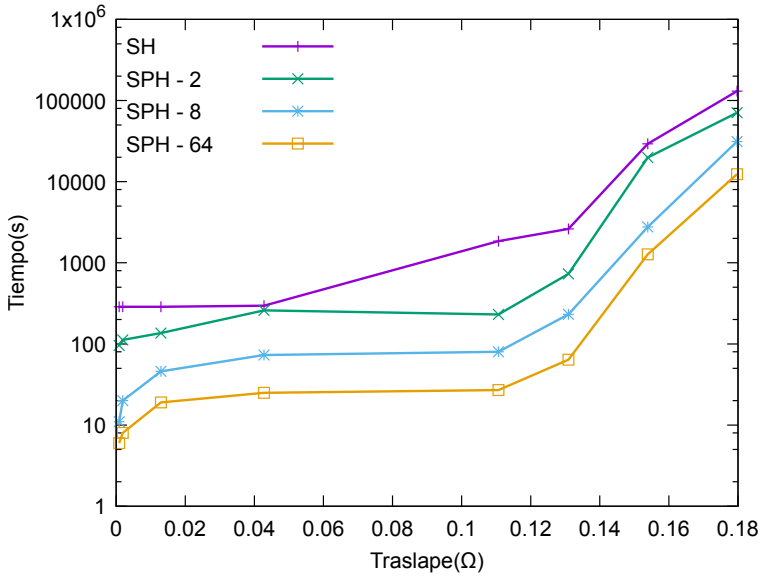


Figura 7.2: Tiempos de ejecución de SH y SPH utilizando 2,8 y 64 hilos bajo diferentes valores de Ω (escala logarítmica)

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:

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

$$B_C(R_S) = \{ \int_0^{R_S} ... \int F_B(R_{B1}) \; ... \; F_B(R_{BC}) dR_{B1} \; \ldots \; dR_{BC} \}^{1/C} \tag{7.2}$$

donde $B_C(R_S)$ corresponde al 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 los valores mostrados del traslape $\Omega < 1$.

En la Figura 7.3, se muestran cuatro casos de comparación entre las soluciones SPA y SPH en términos del tiempo de construcción de una red porosa de tamaño $L = 100$ con distintos traslapes y variando el numero de hilos utilizados para la construcción de la red. En cada caso se añade como referencia dos lineas rectas que representan los tiempos de construcción de la red porosa con el traslape especificado para las soluciones SA y SH.

En la Figura 7.3a, se muestra el primer caso para construcción de una red de tamaño $L = 100$ con un traslape de $\Omega = 0{,}001908$, la solución SPH muestra en general un mejor rendimiento que SPA sin embargo muestra un bajo rendimiento respecto a SA esto se debe a que al utilizar un traslape tan pequeño el numero de violaciones a las RG es bajo por lo cual la solucion SPH consume la mayor parte de su tiempo en la inicialización de la red particularmente en proceso de ordenamiento de sitios y enlaces mientras que SA trabaja directamente en la eliminación de las violaciones, lo mismo ocurre con SH.

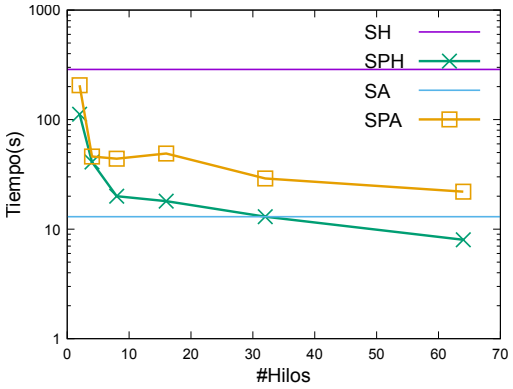
En la Figura 7.3b, se muestra el segundo caso para construcción de una red de tamaño $L = 100$ con un traslape de $\Omega = 0{,}042809$, podemos ver que SPA y SPH muestran un compartimento muy similar en el cual a partir del uso de mas de 8 hilos mejoran su rendimiento respecto a SA, al aumentar el traslape también aumenta el numero de violaciones a las RG lo que se transforma en mayor trabajo para cada hilo. Para SPA en el caso anterior y en el actual(hasta 8 hilos) la mayor parte de tiempo se consumía en la distribución y redistribución de los datos es por eso que se

muestra un rendimiento menor que SA. Para SPH por las mismas causas tiene que un compartimento similar al del caso sin embargo en este caso se obtuvo un recudimento mejor que el de SA utilizando 8 hilos a diferencia de los 32 necesarios en el caso anterior.

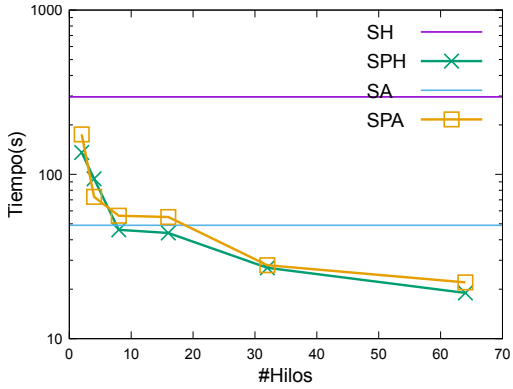
En la Figura 7.3c, se muestra el tercer caso para construcción de una red de tamaño $L = 100$ con un traslape de $\Omega = 0{,}153895$, la solución SPH muestra un mejor rendimiento que SA y SPA esto como consecuencia de dos factores el primero es que el traslape ocasiono un aumento significativo de violaciones a las RG y el segundo es el proceso de inicializacion que en SA y SPA es completamente aleatorio lo que hace que el numero de violaciones a las RG respecto a SH y SPH sea mucho mayor.

En la Figura **??**, se muestra el cuarto caso para construcción de una red de tamaño $L = 100$ con un traslape de $\Omega = 0{,}179723$, para este valor de traslape los tiempos de ejecución de las soluciones SA y SPA se incrementaron de forma exponencial por lo cual se interrumpió su ejecución. Para SPH se pudo observar que en todos los casos siempre se mantuvo con un mejor rendimiento respecto a SH.

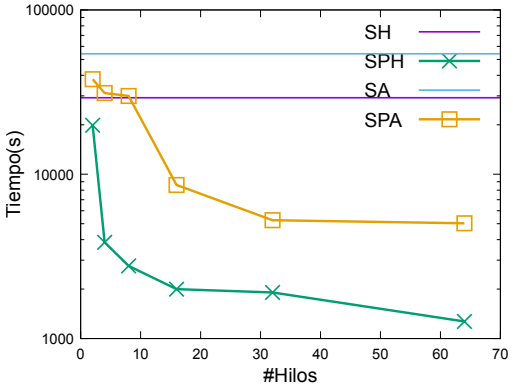
Adicionalmente en todos los casos mostrados en la Figura 7.3, se utilizaron hasta 64 hilos en las pruebas lo cual supera al numero cores o hilos de ejecución(hyperthreading) disponibles en el equipo de computo donde se realizaron las pruebas, sin embargo esta sobrecarga no efecto de forma negativa el rendimiento de las soluciones SPA y SPH si no al contrario, esto se debe a dos factores el primero es la naturaleza de los algoritmos utilizados en los cuales al particionar y operar sobre los datos no es necesaria una operación de reducción o unión esto da como resultado que la suma del tiempo de trabajar con conjuntos de datos mas pequeños sea menor al tiempo que se necesitaría completar la misma tarea con un conjunto del tamaño de la suma se los conjuntos mas pequeños, el segundo factor es la planificación de los hilos por parte del sistema operativo el cual puede manejar un numero de hilos superior al numero al numero cores o hilos de ejecución(hyperthreading). La mejora en tiempo con sobrecarga se obtuvo de forma constante utilizando hasta 64 hilos, al utilizar una valor mas elevado se comenzaron a tener resultados impredecibles.



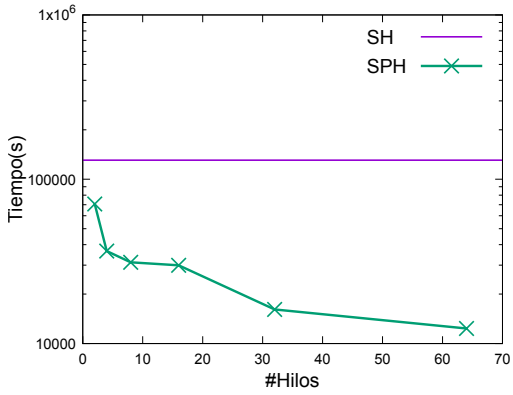
(a) $\Omega = 0{,}001908$



(b) $\Omega = 0{,}042809$



(c) $\Omega = 0{,}153895$



(d) $\Omega = 0{,}179723$

Figura 7.3: Tiempos de ejecución para SH, SPH, SH y SPH con distintos traslapes y variando el numero de hilos(escala logarítmica)

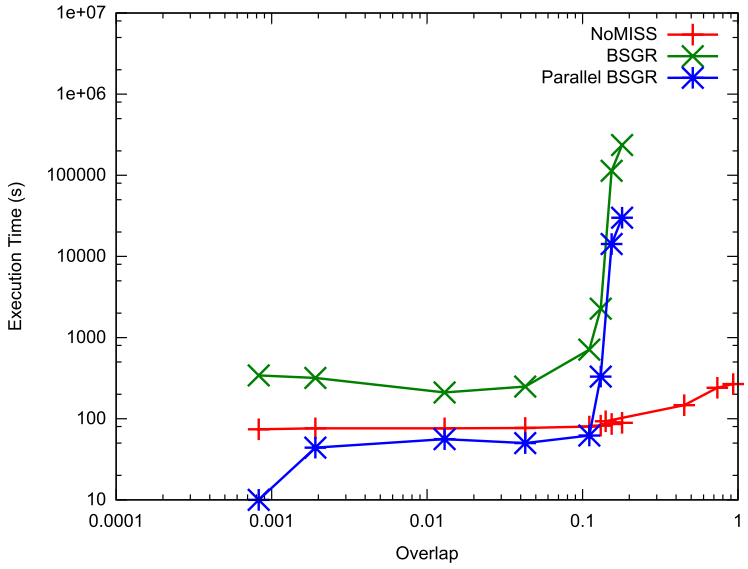


Figura 7.4: Tiempos de ejecución de NoMISS, BSGR y BSGR paralelo, bajo diferentes valores de Ω (escala logarítmica)

La Figura 7.5 muestra el timepo 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 e 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.

En la Figura 7.6 observamos un ejemplo gráfico de una red porosa con $L = 100$ y $\Omega = 0{,}15$, obteniendo a partir de la versión BSGR (Figura 7.6a), así como de la versión BSGR Paralela (Figura 7.6b) utilizando 8 hilos. Estas imágenes representas 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 7.6, 7.7 y 7.8 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 7.7 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 7.7a y 7.7b, 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 ísotropia de la red se mejora, obteniendo redes porosas que representan redes porosas más reales, como se muestra en las Figuras 7.8a y 7.8b.

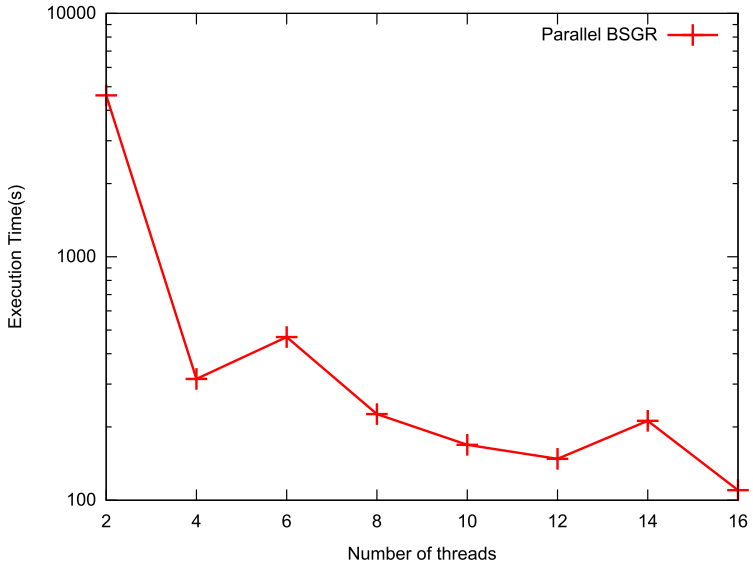
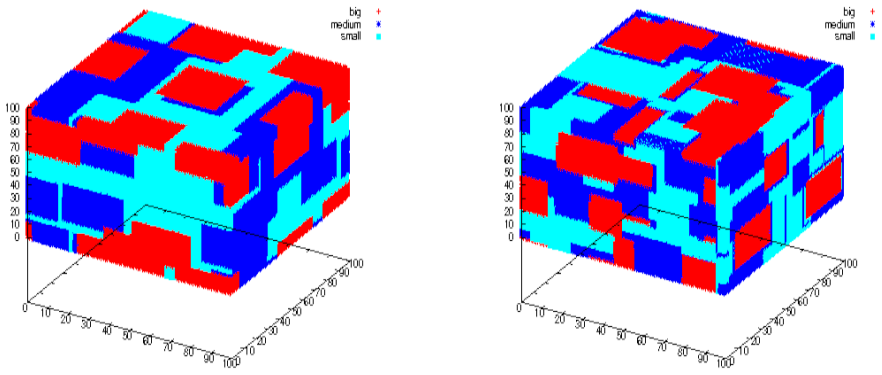
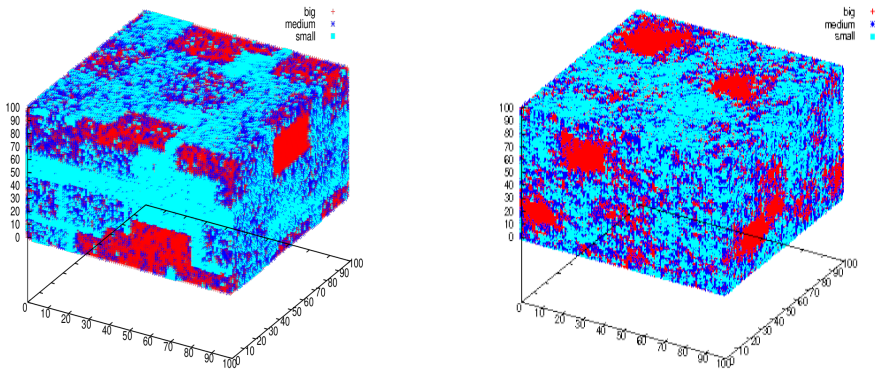


Figura 7.5: Tiempos de ejecución de BSGR Paralelo utilizando de 2 a 16 hilos (escala logarítmica)



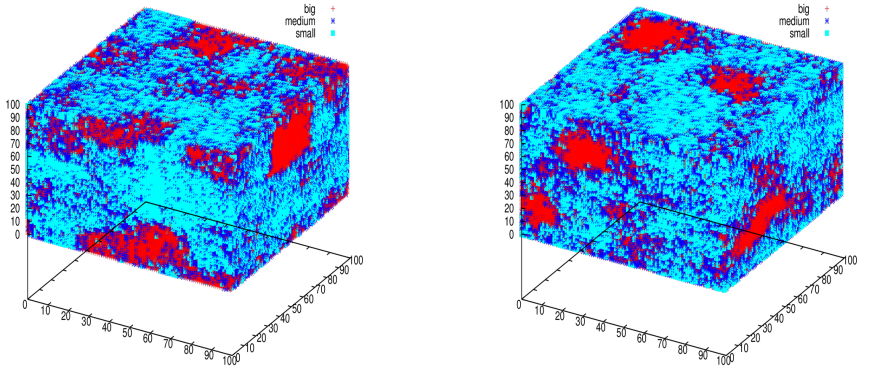
(a) (b)

Figura 7.6: 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



(a) (b)

Figura 7.7: 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



(a) (b)

Figura 7.8: 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

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 Çomprehensive Guide for Mesoporous Materials"; Chapter : "On The Conception and Assessment of Mesopore Networks: Development of Computer Algorithms"; Nova Science Publishers, Inc. vol. 3, pp.1-28, to appear (2o trimestre de 2015), ISBN: 978-1-63463-318-5, 2015.

[18] S. Cordero, F. Rojas, and J.L. Riccardo; "Simulation of three-dimensional porous networks Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects", 187-188 (2001), pp.425- 438, 2001.