

Cómputo en Paralelo para Integrales Multicéntricas usando una Distribución Balanceada

Ana Rosso¹, Claudia Denner¹, Guillermo Frascchetti², María Laura Tardivo^{2,5},
Jorge E. Pérez³, Juan Cesco^{4,5}

¹ Departamento de Matemática. Universidad Nacional de Río Cuarto.
(X5804BYA) Río Cuarto, Córdoba, Argentina
arosso@exa.unrc.edu.ar, cdenner@exa.unrc.edu.ar

² Departamento de Computación, Universidad Nacional de Río Cuarto.
(X5804BYA) Río Cuarto, Córdoba, Argentina
gfrascchetti@dc.exa.unrc.edu.ar, lauratardivo@dc.exa.unrc.edu.ar

³ Departamento de Física. Universidad Nacional de Río Cuarto.
(X5804BYA) Río Cuarto, Córdoba, Argentina

eperez@exa.unrc.edu.ar

⁴ Departamento de Matemática. Universidad Nacional de San Luis,
(D5700HHW) San Luis, Argentina.

⁵ Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET)
jcesco@unsl.edu.ar

Resumen La aproximación del campo autoconsistente (SCF) es utilizada en Química Computacional para abordar problemas de Química Cuántica. Entre otros, la energía molecular y la geometría de equilibrio son elementos determinados al nivel SCF. El enfoque SCF-LCAO presenta complejidad computacional, pues requiere gran esfuerzo de cálculo. Hemos desarrollado un programa secuencial, que posee características interesantes desde el punto de vista numérico, pero con alto costo en tiempo computacional. Con el objetivo de reducir el mismo se propuso paralelizar el algoritmo; actualmente se cuenta con una primera propuesta paralela. En este trabajo se presenta una nueva versión paralela del algoritmo, utilizando el modelo de comunicación y programación basado en pasaje de mensajes, empleando una técnica de descomposición de datos que contempla una carga de trabajo ponderada según el costo computacional de cada función. Los resultados obtenidos con esta nueva versión resultan satisfactorios en cuanto a la reducción del tiempo de cómputo.

Keywords: Cálculo Molecular, Aproximación SCF-LCAO, Paralelización, Balance de Carga.

1. El Tema en Estudio

Para conocer la estructura y las propiedades de una molécula es necesario estudiar la solución de la ecuación de Schrödinger, independiente del tiempo:

$$H\Psi = E\Psi \quad (1)$$

donde H es el operador Hamiltoniano, Ψ es la función de onda que describe el estado del sistema y E es la energía molecular. Se está interesado en encontrar soluciones aproximadas para la ecuación de autovalores (1), ya que la misma no puede resolverse exactamente, salvo en casos simples [20]. Uno de los procedimientos que se utiliza para obtener soluciones aproximadas está basado en la teoría de Hartree-Fock-Roothaan. A este procedimiento por ser iterativo se lo denomina “campo autoconsistente” (Self Consistent Field), y por provenir de combinaciones lineales de orbitales atómicos (Linear Combination of Atomic Orbitals), se lo denota por las siglas en inglés SCF-LCAO.

La complejidad computacional del método se centra en el gran número de integrales bielectrónicas que se deben calcular, aún en modelos de relativamente bajo tamaño. Este número es del orden de n^4 , siendo n el número de orbitales que modelan la molécula.

Debido a su popularidad, SCF ha sido constantemente estudiado y optimizado para conseguir mejor desempeño computacional y hacer posible su uso en el estudio de sistemas de mayor tamaño. Los estudios realizados sobre el método SCF cubren, entre otros, cuatro aspectos importantes:

- Selección de una base de orbitales atómicos adecuada. Bases que han sido extensivamente estudiadas son las que incluyen orbitales atómicos tipo Slater (STO) [1], [2], orbitales Gaussianos (GTO)[3] y B-funciones [4], [5]. Una variante de los GTO la constituyen los orbitales Gaussianos flotantes (FGTO) [6],[7].
- Desarrollo de los cálculos relativos a la base introducida. Es un hecho ampliamente conocido que, cualquiera sea la base seleccionada, las integrales bielectrónicas resultantes, en la mayoría de los casos, no se pueden resolver en forma analítica. Por lo tanto, es necesario calcularlas numéricamente por métodos aproximados [8], [9], [10],[11], [12].
- Implementación de programas computacionales tendientes a obtener información sobre diferentes propiedades moleculares. En los últimos años se han desarrollado varios programas, algunos comerciales, otros desarrollados en centros científicos, los cuales realizan cálculos moleculares de distintos tipos. Sus implementaciones pueden ser seriales o en paralelo y sus capacidades de cálculo son diversas. *Gaussian* [25] es uno de los más difundidos. Otras alternativas se encuentran en [13], [14], [15].
- Aplicación de los programas para el estudio de sistemas concretos. Esta es un área muy activa de trabajo. Un punto importante en este campo es el desarrollo de heurísticas que sirvan de guía para la ubicación de los orbitales atómicos, tendientes a reproducir adecuadamente comportamientos que se conocen desde un punto de vista químico. No menos importante es el desarrollo de estrategias que permitan combinar estructuras simples resueltas para modelar sistemas más complejos [16], [17], [18], [19].

2. El Algoritmo de Cálculo SCF-LCAO (rasgos generales)

El algoritmo de cálculo que computa la aproximación SCF-LCAO permite utilizar distintos modelos de bases atómicas. A continuación se presenta de manera general, el esquema de procesamiento del algoritmo (para obtener un detalle completo del algoritmo y cada una de sus partes, ver [20]):

1. El programa requiere como dato de entrada una geometría inicial de la molécula a optimizar (coordenadas nucleares y el número de electrones).
2. Se calculan todas las integrales moleculares requeridas: $S_{\mu\nu}$, $H_{\mu\nu}$, $(\mu\nu|\sigma\lambda)$.
3. Diagonalizar la matriz de overlap \mathbf{S} y obtener la matriz de transformación \mathbf{X} .
4. Obtener la matriz de densidad \mathbf{P} .
5. Calcular la matriz \mathbf{G} , a partir de la matriz de densidad \mathbf{P} y de las integrales bielectrónicas $(\mu\nu|\sigma\lambda)$.
6. Obtener $\mathbf{F} = \mathbf{H} + \mathbf{G}$
7. Calcular $\mathbf{F}' = \mathbf{X}^* \mathbf{F} \mathbf{X}$
8. Diagonalizar \mathbf{F}' , para obtener \mathbf{C}' y ϵ , y calcular $\mathbf{C} = \mathbf{X} \mathbf{C}'$
9. Cuando se comprueba la convergencia, el proceso finaliza, caso contrario vuelve a 4.

Con este algoritmo se obtiene la geometría molecular óptima minimizando la energía. Para ello, se realiza el cálculo anterior en diferentes posiciones relativas de los átomos.

3. Desarrollo de la investigación

El grupo de investigación desarrolló en una primera etapa una propuesta secuencial del algoritmo mencionado, el cual logra la optimización de geometrías moleculares a través de la minimización de la energía. Uno de los problemas de esa versión algorítmica es el alto tiempo de cómputo insumido, razón por la cual se han intentado diferentes alternativas a fin de mejorar esta implementación.

Una línea de trabajo estudia, fundamentalmente, variantes en las técnicas de cálculo para el algoritmo que modela el problema [16],[17],[18],[19],[26], [27], [28]. Otra se enfoca en paralelizar el algoritmo secuencial. Se trabajó inicialmente en paralelizar una regla de cuadratura gaussiana [30]. Posteriormente, se paralelizó una parte del algoritmo secuencial en el cual se distribuyen los cálculos intermedios en diferentes unidades de procesamiento, con una distribución de carga fija [29]; obteniéndose mejoras respecto de los tiempos secuenciales y un buen balance de carga para el caso de prueba utilizado.

En este trabajo, se presenta una modificación de la última versión paralela, respecto del mecanismo de asignación de carga a cada unidad de procesamiento. Aquí, la distribución se realiza en función de un peso asociado al tipo de cálculo a realizar. A diferencia de la versión anterior, esta nueva propuesta considera las particularidades de la molécula. Con este esquema, se posee mayor control del costo computacional en relación al ejemplo en estudio.

A continuación daremos una descripción de la base de funciones utilizadas en la implementación, y posteriormente presentaremos la nueva versión paralela.

4. Funciones utilizadas en la modelización

Una buena base de orbitales atómicos debe satisfacer dos condiciones para dar soluciones apropiadas. Dichas condiciones vienen dadas por el “comportamiento cuspidal alrededor de los núcleos” y el “decaimiento exponencial” en el infinito [21].

En el desarrollo del programa secuencial se utilizó una base de funciones, con orbitales atómicos 1s de Slater (STO) y gaussianos (GTO). Dichos orbitales tienen las siguientes expresiones:

$$\Phi_{\mu}(\vec{r}) = C' e^{(-\alpha_{\mu}|\vec{r}-\vec{R}_{\mu}|)} \quad (\text{STO})$$

$$\Phi_{\mu}(\vec{r}) = C e^{(-\alpha_{\mu}|\vec{r}-\vec{R}_{\mu}|^2)} \quad (\text{GTO})$$

donde $C = (\frac{2\alpha_{\mu}}{\pi})^{3/4}$, $C' = (\frac{\alpha_{\mu}^3}{\pi})^{1/2}$, \vec{r} pertenece a \mathbb{R}^3 , el vector \vec{R}_{μ} se denomina centro del orbital y α_{μ} es el coeficiente orbital.

Las funciones GTO antes mencionadas, a pesar de no satisfacer la condición de comportamiento cuspidal alrededor de los núcleos, son las más utilizadas, puesto que las integraciones necesarias se realizan eficientemente. En contraste, las funciones STO satisfacen ambas condiciones, pero los cálculos de las integraciones son computacionalmente costosas.

En la implementación secuencial realizada, la mayor parte del tiempo de cálculo insumido lo requiere la evaluación del potencial promedio de Hartree-Fock, pues cuando se introduce la base atómica, hay que evaluar integrales bieletrónicas multicéntricas que tienen la siguiente expresión:

$$(\mu\nu|\sigma\lambda) = \int \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} \Phi_{\mu}(\vec{r}_1) \Phi_{\nu}(\vec{r}_1) \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \Phi_{\sigma}(\vec{r}_2) \Phi_{\lambda}(\vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (2)$$

donde los índices $a = \mu, \nu, \sigma$ y λ corresponden a las funciones $\Phi_a(\vec{r}_i)$ de la base dadas por los orbitales (STO) y (GTO). A la expresión $(\mu\nu|\sigma\lambda)$ la llamamos *cantidad de cuatro índices*.

Esta particularidad de utilizar una base formada por dos clases de funciones es lo que diferencia nuestra implementación de otras, como por ejemplo las que se utilizan en el programa de cómputo *Gaussian* [25].

En nuestra implementación, los orbitales STO se posicionan en los núcleos, para modelar el correcto comportamiento de la función de onda. Los orbitales GTO pueden ser colocados en los núcleos o en los enlaces que unen dos núcleos. Los resultados obtenidos mediante esta modelización han sido competitivos en cuanto a la geometría y a las cifras significativas.

En estos cálculos cuando $\Phi_{\mu}, \Phi_{\nu}, \Phi_{\sigma}$ y Φ_{λ} son de tipo GTO, la integral de la fórmula (2) posee una primitiva conocida, por lo que su cálculo es directo. En aquellos casos en los que la expresión (2) utiliza al menos una función del tipo STO, el cómputo requiere la aproximación numérica de las integrales, pues ellas no tienen expresión analítica [9]. Estas integrales pueden ser unidimensionales, bidimensionales o tridimensionales.

5. Modelo de Cómputo en Paralelo

5.1. El Programa

En nuestro programa secuencial, el cómputo de las integrales de cuatro índices de la fórmula (2) guía su procesamiento a través de un vector, en el cual se disponen todas las combinaciones de funciones a evaluar. Estas combinaciones de funciones son independientes unas de otras, por lo cual es posible aplicar un esquema de paralelización directo.

La primera versión de la implementación en paralelo consideraba, para la distribución de carga, sólo la cantidad de funciones involucradas en el cálculo, de manera de asignar cierto porcentaje de esas funciones a cada procesador. En nuestro problema las funciones no poseen la misma complejidad computacional, por lo cual, el tiempo que requiere su procesamiento es variable. Para compensar esta variabilidad, en esta primera versión paralela se consideraron porcentajes no equitativos en la distribución de carga. En una batería de pruebas se utilizaron diferentes valores para estos porcentajes de manera tal de analizar el comportamiento del algoritmo con este esquema de paralelización ad-hoc. Con esta distribución se obtuvieron resultados aceptables en cuanto a la reducción del tiempo de cómputo, manteniendo la calidad de la aproximación [29]. Sin embargo, esta distribución de carga resulta ser más adecuada cuando el costo computacional de cada una de las funciones es equitativo.

La nueva versión del programa paralelo, al igual que en la versión anterior, sigue un modelo algorítmico *master-worker* [22], en donde el proceso *master* es el encargado de inicializar los cálculos, generar las matrices iniciales y preparar los datos para distribuir el cómputo entre los procesadores *workers*. Luego de finalizar el procesamiento que les fue asignado, los *workers* retornan al proceso *master* sus resultados parciales, para que éste último obtenga la solución final.

En esta segunda versión se realiza la distribución de carga clasificando cada función según el costo computacional del trabajo matemático involucrado, parámetro que llamamos *peso*. A partir de esto se distribuyen los cálculos utilizando como criterio el balance de la suma de los pesos, en lugar de considerar solamente la cantidad de funciones.

Para la ponderación, el cálculo de coeficientes $(\mu\mu|\nu\nu)$ de las cantidades de cuatro índices que involucra solo funciones de tipo STO (en centros distintos o centros coincidentes), y todas las cantidades de cuatro índices donde solo intervienen funciones GTO, requieren operaciones de suma, multiplicación y evaluación de funciones simples, siendo estos los coeficientes de menor costo computacional. A los mismos les asignamos el menor peso.

El cálculo de coeficientes $(\mu\nu|\sigma\lambda)$, con todas funciones de tipo STO, donde todos los índices son distintos, involucra además de las operaciones elementales, la evaluación de una integral triple, que es aproximada usando la regla de cuadratura de Gauss-Legendre con 32 puntos en cada variable. A estos cálculos, que requieren el mayor costo computacional, le asignamos el mayor peso.

Como el *peso* de cada función dependen del tipo de cálculo a realizar y no de una molécula y/o función en particular, los mismos pueden establecerse en forma previa a la ejecución del programa.

Si bien se conoce la complejidad computacional de cada función, la cantidad y el tipo de funciones de la base que modelan una molécula varía de acuerdo al compuesto químico que se esté abordando. Por este motivo, se intenta obtener un esquema de mapeo dinámico, en el sentido de establecer que el proceso master determine, considerando el peso y la cantidad de funciones, cuál/les son las tareas asignadas a cada worker.

La versión paralela utiliza el lenguaje Octave [24], software libre de cálculos numéricos. Se decidió utilizar un modelo de comunicación y programación basado en pasaje de mensajes, bajo una organización de memoria distribuida [22]. Para su implementación se empleó la librería MPI [23], en conjunto con el lenguaje de programación C. Se utilizaron paquetes adicionales para invocar, desde el código escrito en el lenguaje C, rutinas escritas en Octave (mex-interface) [24].

5.2. Los Ensayos y Resultados

A continuación se muestra un ejemplo de una molécula donde se fijan sobre los núcleos las funciones STO y sólo se varía la cantidad de funciones GTO. Las funciones STO utilizadas en las pruebas se centraron en los siguientes núcleos:

$$\begin{aligned} \vec{R}_\mu &= (0, 1, 4296, 1, 1124), \\ \vec{R}_\nu &= (0, -1, 4296, 1, 1124), \\ \vec{R}_\sigma &= (0, 0, 0) \text{ con coeficientes orbitales } \alpha_\mu = 1, \alpha_\nu = 1, \alpha_\sigma = 8 \end{aligned}$$

Modelo	Total de Funciones	Tiempo Secuencial	Tiempo Paralelo
1	15 (3 STO, 12 GTO)	0m 9.07s	0m 7.85s
2	25 (3 STO, 22 GTO)	3m 55.62s	1m 41.68s
3	50 (3 STO, 47 GTO)	750m 20.34s	350m 49.79s

Cuadro 1. Tiempos de ejecución con las dos versiones algorítmicas.

El cuadro 1 muestra las aceleraciones obtenidas con la máxima capacidad de cálculo disponible. Se contrastan en la misma los tiempos obtenidos con el programa secuencial, incluyendo tres modelos distintos de la misma molécula. Se

puede observar, en todas las ejecuciones, que la versión paralela obtiene menores tiempos de cómputo.

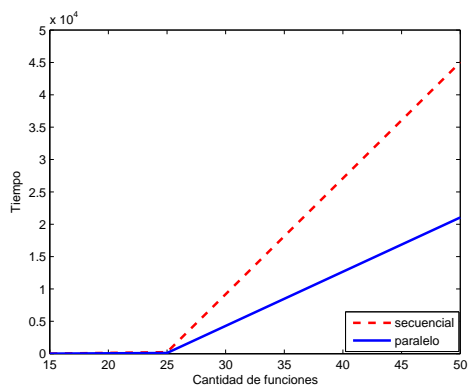


Figura 1. Tiempo de ejecución (en segundo) vs cantidad de funciones de la molécula. Se puede observar que el modelo secuencial insume más tiempo de cómputo que el modelo paralelo. La tendencia indicaría que al aumentar la cantidad de funciones que modelan la molécula, el modelo paralelo sigue teniendo mejor desempeño.

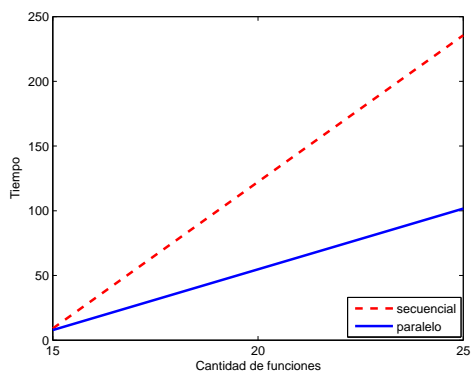


Figura 2. Tiempo de ejecución (en segundos) vs cantidad de funciones de la molécula. En esta figura se muestra en detalle el primer intervalo de la Figura 1, donde se puede constatar un comportamiento similar al descrito anteriormente para moléculas que utilizan entre 15 y 25 funciones en su modelado.

Las Figuras 1 y 2 grafican el comportamiento de los valores obtenidos en la tabla 1.

Las pruebas piloto fueron llevadas a cabo utilizando una computadora con procesador Intel(R) Core(TM) i7-2600, con 8 procesos workers más un proceso adicional asignado al master. Si bien el código está preparado para realizar

pruebas en un entorno real de memoria distribuida, como por ejemplo un cluster de computadores, al momento disponemos solamente del recurso mencionado.

6. Reflexiones Finales

En este trabajo se presenta una nueva versión paralela de un programa secuencial dedicado al cálculo molecular, para determinar la función de onda y la mínima energía en la aproximación SCF-LCAO. Esta versión considera, para la distribución del trabajo, la suma de los pesos relativos de cada función involucrada en el cálculo. Con ella se obtuvieron buenos resultados en cuanto a reducción del tiempo de cómputo, manteniendo la calidad de la aproximación.

Las pruebas realizadas aún no fueron escaladas a mayor cantidad de procesadores, por ejemplo, a través de la utilización de clusters. Como trabajo futuro se planea la ejecución del código desarrollado en un entorno con mayor cantidad de unidades de cómputo. A la vez se espera desarrollar una nueva versión paralela, considerando un modelo de asignación de tareas y balance de carga dinámico, en el cual los procesos worker tomen los trabajos a partir de un *pool* de tareas. Con este nuevo enfoque se intentará desarrollar un modelo que continúe considerando la carga de trabajo variable en cada unidad de cálculo.

Agradecimientos

A la Secretaría de Ciencia y Técnica de la Universidad Nacional de Río Cuarto, y al Ministerio de Ciencia y Tecnología de la Provincia de Córdoba, por los recursos puestos a nuestra disposición para llevar adelante esta investigación.

Referencias

1. Slater, J.C.: Atomic Shielding Constants, *Physical Review*, vol. 36, issue 1, pp. 57-64 (1930)
2. Roothaan, C.: *Reviews of Modern Physics*, vol. 23, issue 2, pp. 69-89 (1951)
3. Boys, S.: Electronic Wave Functions. I. A General Method of Calculation for the Stationary States of Any Molecular System. In: *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, vol. 200, pp.542-554 (1950)
4. Steinborn, E., Weniger, J.: Advantage of reduced bessel functions as atomic orbitals. An application to H+2. *International Journal of Quantum Chemistry*. In: *Quantum Chemistry Symposium*, vol. 11, pp. 509 (1977)
5. Steinborn, E., Weniger, J.: Reduced bessel functions as atomic orbitals: Some mathematical aspects and an LCAO-MO treatment of HeH⁺⁺. In: *International Journal of Quantum Chemistry: Quantum Chemistry Symposium*, vol. 12, pp. 103-108 (1978)
6. Maggiora, G., Christoffersen, J.: Ab initio calculations on large molecules using molecular fragments. Generalization and characteristics of floating spherical Gaussian basis sets. In: *Journal of the American Chemical Society*, vol. 98, issue 26. pp. 8325-8332 (1976)

7. Pérez, J., Cuenya, H., Contreras, R. Ortiz, F., Grinberg, H., Ruiz de Azua, M., Giribet, C.: Expansion of atomic orbital products in terms of a complete function set. In: *Theoretica Chimica Acta A Journal for Structure, Dynamics and Radiation*, vol.88, number 2, pp. 147-168 (1994)
8. Bouferguene, A., Fares, M., Rinaldi, D.: Integrals over B functions basis sets. I. Three-center molecular integrals, a numerical study. In: *Journal of Chemical Physics*, vol. 100, pp. 8156-8119 (1994)
9. Shavitt, I., Karplus, M.: Gaussian-Transform Method for Molecular Integrals. I. Formulation for Energy Integrals. In: *Journal of Chemical Physics*, vol 43, pp. 398-415 (1965)
10. Montagnani, R., Salvetti, O.: Computation of many-center exchange integrals over Slater orbitals up to 4d by means of optimized Gaussian expansions. In: *International Journal of Quantum Chemistry*, vol. 47, issue 3, pp.225-229 (1993)
11. Fernandez Rico, J., Lopez, R., Ramírez, G., Tablero, C.: Molecular integrals with Slater basis. V. Recurrence algorithm for the exchange integrals. In: *Journal of Chemical Physics*, vol. 101, pp. 9807-9817 (1994)
12. Safouhi, H., Hoggan, P.: Recent progress in the accurate and rapid evaluation of all Coulomb integrals over slater-type orbitals .In: *International Journal of Quantum Chemistry* , vol. 84, pp. 580-591 (2001)
13. Fernandez Rico, J., Lopez R., Ema, I., Ramírez, G.: Calculation of many-centre two-electron molecular integrals with STO. In: *Computer Physics Communications*, vol. 105, pp. 216-224 (1997)
14. Bouferguene, A., Fares, M., Hogan, P.: STOP: A slater-type orbital package for molecular electronic structure determination. In: *International Journal of Quantum Chemistry*, vol. 57, pp. 801-810 (1996)
15. Mantovani, M., Malagoli, M.: Highly Parallel SCF Calculation: the SYSMO Program. In: *Proceedings of the Parallel and Distributed Processing, CICAIA, Modena University, Italia*, pp. 502-507 (1995)
16. Pérez, J., Cesco, J., Taurian, O., Ortiz, F., Rosso, A., Denner, C., Giubergia, G.: A new algorithm to evaluate bielectronic integrals with 1s Slater type orbitals obtained by the integral transforms. In: *International Journal of Quantum Chemistry*, vol 99, pp.70-79, (2004)
17. Cesco, J., Pérez, J. , Denner, C., Giubergia, G., Rosso, A.: Rational approximants to evaluate four-center electron repulsion integrals for 1s hydrogen Slater type functions. In: *Applied Numerical Mathematics*, vol 55, pp. 173-190 (2005)
18. Pérez, J., Cesco, J., Taurian, O., Ortiz, F., Rosso, A., Denner, C., Giubergia, G.: Evaluation of Bielectronic Integrals 1s Slater Orbitals by using Averages. In: *International Journal of Quantum Chemistry*, vol 102, pp. 1056-1060 (2005)
19. Pérez, J., Taurian, O., Cesco, J., Ortiz, F.: A New Method for approximating the Coulomb Potential Generated by Product of two 1s Slater Orbitals. In: *Quantum Chemistry Research Trends*, pp 215-227, (2007)
20. Szabo,A., Ostlund, N.: *Modern quantum chemistry. Introduction to advanced Electronic Structure Theory*, Macmillan Publishing Co, Inc., New York (1982)
21. Kato, T.: On the eigenfunction of many-particle system in quantum mechanics. In: *Communication on Pure and Applied Mathematics*, vol. 10, issue 2, pp. 151-177 (1957)
22. Grama, A., Gupta, A., Karypis, G., Kumar, V.: *Intruduction to Parallel Computing*, Second Edition. Pearson Addison Wesley (2003)
23. Message Passing Interface, <http://www.open-mpi.org>
24. <http://www.gnu.org/software/octave>

25. Gaussian Software, <http://www.gaussian.com/>
26. Denner, C.: Una aplicacion de aceleradores de convergencia al calculo de integrales multicentricas en la teoria de Hartree-Fock. Biblioteca Juan Filloy. Universidad Nacional de Río Cuarto (2004).
27. Rosso, A.: Técnicas de desacople en el cálculo de integrales multicéntricas. Universidad Nacional de Río Cuarto (2004).
28. Giubergia, G.: Metodos alternativos para el calculo de integrales multicentricas de tres y cuatro centros en la teoria de Hartree - Fock. Universidad Nacional de Río Cuarto (2001).
29. Rosso, A., Denner, C., Fraschetti, G., Tardivo, L., Pérez, J., Cesco, J.: Paralelización del cálculo molecular de las integrales bielectrónicas en la aproximación SCF-LCAO. In: IV Congreso de Matemática Aplicada, Computacional e Industrial (MACI) (2013)
30. Rosso, A., Denner, C., Daniele, M., Fraschetti, G.: Implementación con MPI de reglas adaptivas de cuadratura. In: III European-Latin-American Workshop on Engineering Systems. III SELASI. Universidad de Talca, Curicó, Chile (2007)