

LA FISICA COMPUTACIONAL

T. A. Brody

Instituto de Física, UNAM, Apdo. Postal 20-364,
01000 México, D.F., México

RESUMEN

Tradicionalmente la física se divide en dos: la física teórica y la física experimental. En los últimos años esta tradición ha recibido un reto, en la forma de la llamada física computacional. En este trabajo se discuten tres temas: Primero, se describen someramente los usos ya establecidos de la computadora en física, para ver hasta donde se justifica hablar de una nueva subdivisión de la física, la computacional. Segundo, se intenta caracterizar esta física computacional, para ver cómo se relaciona con las otras dos ramas. Tercero, se examinan los problemas que ya empiezan a surgir de estos desarrollos y se mencionan algunas soluciones posibles.

ABSTRACT

Physics is traditionally split into the theoretical and the experimental areas. In recent years this tradition has been challenged by so-called computational physics. In this paper we discuss three aspects: firstly, the established uses of computers in physics are briefly described, and the question is posed how far talk of a new subdivision of the field of physics is justified. Secondly, an attempt is made to characterize computational physics so as to clarify its relationship with

the other two branches. Thirdly, the problems that are already springing up in this field are examined and some possible solutions indicated.

I

Las computadoras que se emplean en la física van desde microprocesadores sin ningún periférico, con un costo de unos cuantos dólares, hasta las máquinas más grandes del mundo. Correspondientemente, sus aplicaciones cubren una gama muy extensa; pero en una primera aproximación, y enfatizando ligeramente lo que es factible en México, podemos clasificarlas más o menos como sigue:

1. Recolección de datos, conectando el equipo experimental directamente a una computadora. Este es un uso relativamente reciente, pero que se ha desarrollado rápidamente, a medida que la electrónica ha ido bajando de costo. Es útil, evidentemente, para volúmenes grandes de datos, sobre todo cuando llegan a alta velocidad; en este caso puede ser necesario construir equipo especial para manejar el flujo: el diseño "tubular" (pipe-line processors , en los cuales una secuencia de unidades efectúan sucesivamente las diferentes operaciones de un programa, de modo que cuando la última unidad suelta el dato procesado las anteriores contienen datos en varias etapas intermedias) permite alcanzar velocidades altas con electrónica convencional. Pero también se usan computadoras para recibir datos poco frecuentes, porque la máquina tiene más paciencia que el observador humano. Y desde luego es más confiable; si es importante reducir a un mínimo los errores en los datos registrados, entonces conviene usar una computadora directamente conectada al equipo medidor. Por supuesto, varias de estas razones suelen ser válidas a la vez.
2. Muchas veces se combina la recolección de datos experimentales con el control del dispositivo experimental. Si éste es complejo, su control vía computadora casi se impone. Un solo ejemplo: controlar los aceleradores de partículas a través de una computadora permite no solamente cambiar de un experimento al siguiente en cosa de minutos (en vez de las horas que requiere el cambio manual), sino sobre todo mantener la energía y el enfoque del haz dentro de límites mucho más estre-

chos de lo que logra el mejor operador humano. Se consigue así un factor de 10 a 15 en la resolución de las funciones de excitación; comparado con el costo de un acelerador que tuviera tal resolución, lo que cuesta la computadora y sus conexiones es trivial.

3. La computadora no sólo recaba los datos del experimento, casi siempre también los somete a un tratamiento (parcial o exhaustivo) antes de entregarlos al experimentador. Para los tratamientos sencillos como restar un fondo a los conteos hechos con centelleadores etc., aplicar un factor de escala o pasar a una escala logarítmica, basta un microprocesador. Transformaciones más complejas pueden necesitar computadoras muy grandes; un ejemplo de ello es la determinación de las trayectorias fotografiadas en cámaras de burbujas o medidas en cámaras de chispas. Un aspecto particularmente significativo, como veremos abajo, de muchos tratamientos de datos es que incluyen una cierta selección de los mismos: según criterios preestablecidos, se rechaza parte de los datos recabados como "malos", con errores excesivos o por otras razones. En la física de partículas elementales la proporción de datos rechazados es muy alta, los criterios son muy complejos y las exigencias debido al alto flujo de información son severas: de allí el empleo de procesadores tubulares de diseño especial también para este propósito. Podemos incluir en este capítulo una técnica de gran utilidad: la presentación de los datos, seleccionados y debidamente transformados, en gráficas interactivas, por ejemplo en forma de proyecciones de figuras tridimensionales que podemos girar en la pantalla y comparar con otras figuras, ya sea obtenidas en otros experimentos o basadas en alguna teoría.
4. Al lado de los usos experimentales de las computadoras hay desde luego gran variedad de aplicaciones en la teoría. En primer lugar vienen los miles y millones de cálculos que evalúan algunas funciones, diagonalizan algunas matrices, resuelven una que otra ecuación diferencial con el fin de obtener resultados numéricos a partir de teorías ya bastante bien establecidas. A veces el objeto es la aplicación a un caso concreto, a veces es la estimación de algún parámetro. Es con este tipo de cálculos que empezó el empleo de las computadoras en la física, durante la década de los 50's, ya que es la directa extrapolación de lo que se podía lograr con las calculadoras electromecánicas (o hasta manua-

les) de escritorio. Este uso es el que mejor conocen la mayoría de los físicos, y es para el que se desarrollaron lenguajes como el Fortran y sus similares. Sin embargo, aunque nunca va a desaparecer, su importancia relativa está disminuyendo.

5. Otra forma de hacer teoría mediante la computadora la constituye la simulación. En vez de atacar un problema muy específico, se construye un sistema de programas y subprogramas que incorpora toda una teoría completa; y en vez de darle datos determinados de antemano, se emplea este sistema para explorar numéricamente el comportamiento de la teoría en tal o cual circunstancia. Podemos, para tomar un ejemplo, integrar las ecuaciones de movimiento de los planetas a partir de un juego completo de condiciones iniciales, y así determinar bajo qué condiciones puede evolucionar el sistema solar primitivo para acabar en su forma actual. Podemos integrar las ecuaciones de Maxwell con contornos casi arbitrarios, para ver si logramos configurar una combinación de campos magnéticos y eléctricos que confinan y enfocan un haz de protones. En estos dos casos tratamos sistemas deterministas. Más frecuentemente se hacen simulaciones probabilísticas -cálculos de Monte Carlo- ya que con estos métodos se pueden atacar problemas en donde no sabemos resolver las ecuaciones de la teoría, o en donde ni siquiera hemos sabido formularlas (un buen ejemplo es la magnetohidrodinámica⁽¹⁾). Ambos tipos de simulación suelen exigir la colaboración de muchas gentes para escribir los extensos y complejos programas; los cálculos de Monte Carlo, sobre todo, pueden requerir centenares de hora-máquina para acumular una estadística suficiente. En consecuencia se usan computadoras de cierta capacidad para las simulaciones, y en los últimos años se han empezado a construir computadoras especiales dedicadas a ciertos cálculos de Monte Carlo: aplicarlas a otro problema significa reconstruirlas.
6. La última aplicación teórica de las computadoras es una que puede sorprender a los que piensan en estas máquinas como simples procesadores de masas de numeritos: pero en realidad la computadora efectúa transformaciones de configuraciones de "bits" según reglas -arbitrarias desde el punto de vista de la máquina- que el usuario establece, y es el usuario quien interpreta tal grupo de "bits" como 37 y tal otro como -1.0993. Nada impide, por lo menos en principio, que en vez de las re

glas de la aritmética introduzcamos las del álgebra. Hoy en día ya existe una serie de sistemas programáticos que nos permiten manipular expresiones algebraicas, integrarlas en forma simbólica (y no solamente descubrir que la integral de $\cos x$ es $\sin x$, sino también manejar integrales de considerable complejidad), sumar series infinitas, etc⁽²⁾. El uso de tales sistemas ya es práctico y ha encontrado varias aplicaciones en la física (por ejemplo, los extensos cálculos algebraicos de la relatividad general⁽³⁾). Para la manipulación algebraica es conveniente emplear máquinas relativamente grandes, en parte por razones de técnica computacional, pero en parte porque los mejores de estos sistemas aprenden poco a poco del trabajo que se les pide, y su uso en computadoras de tiempo compartido entre muchos usuarios físicos permite acumular una útil experiencia en poco tiempo.

- . Un empleo de las computadoras que, estrictamente hablando, cae fuera de la física, debe sin embargo mencionarse porque afecta a la comunidad de los físicos en forma muy directa. Me refiero a la enseñanza por computadora. Las técnicas computacionales relevantes han visto un desarrollo importante en las décadas pasadas, y hoy en día hay programas "educacionales" bastante bien hechos en computadoras de todos los tamaños. No así los principios pedagógicos: la mayor parte de estos desarrollos se deben a grupos en Estados Unidos, muchas veces a gente con poca experiencia en la enseñanza (con ciertas honrosas excepciones, como por ejemplo el sistema PLATO⁽⁴⁾). En consecuencia, en los Estados Unidos mismos la enseñanza por computadora ha tenido cierto auge, por ser más cómoda y más barata que la tradicional, pero no tanto éxito como se esperaba; sin embargo, la disminución en el costo de las máquinas y la creciente falta de maestros bien formados le están abriendo un mercado importante. Pero -y éste es el problema que nos toca enfrentar- en México tampoco tenemos suficientes maestros y profesores para satisfacer siquiera las necesidades más urgentes; y ya algunas compañías norteamericanas se están preparando para penetrar el mercado mexicano. No creo que tenga yo que subrayar el peligro que esto representa para nuestro futuro cultural. La única salida posible es hacerlo nosotros, antes de que vengan a vendernos -a precios altos- lo que sí sería una ideología extranjerizante.

El problema general excede el marco de lo que me toca discutir aquí. Es obvio, sin embargo, que el empleo extenso de las computadoras en la enseñanza secundaria y universitaria tendrá efectos significativos sobre lo que será la siguiente generación de físicos.

8 y 9. Finalmente, cabe mencionar dos usos de la computadora que no son del terreno de la física, pero que la pueden ayudar (si se hacen bien) y obstaculizar (si se hacen mal). Poder buscar información, por ejemplo bibliográfica, por medio de una computadora puede ahorrar mucho tiempo; me acuerdo que de estudiante un profesor mío nos insistía que tomaba me nos tiempo repetir un experimento para, digamos, determinar el valor de alguna constante que buscar el reporte de una determinación anterior en la literatura. Hoy este cuadro empieza a cambiar; pero el costo de una búsqueda exhaustiva por computadora puede ser aún demasiado elevado para un país del tercer mundo en plena crisis económica. En cambio, usar las computadoras para pasar en limpio manuscritos, informes, "preprints", etc. se justifica plenamente; para ello casi siempre basta con el equipo que ya tenemos, o tal vez se necesita agregar algún periférico de costo módico; el problema es principalmente uno de organización y formación de personal. Por último hay que notar que incluso las instituciones de investigación en física necesitan una administración, la cual puede verse beneficiada por el uso inteligente de una computadora; pero también pue de resultar totalmente entorpecida por un uso mal concebido.

En la Tabla I he tratado de resumir esta discusión; indico también para los diferentes usos cuáles son las configuraciones dominantes de computadoras que se emplean.

Veamos lo que muestra esta tabla.

Se observa que los microprocesadores juegan un papel muy significativo. No es tan común que por ellos solos den la solución óptima para un tipo de problema; pero cuando funcionan como primera instancia en un proceso largo que se lleva a cabo en una o incluso varias computadoras más grandes y turna sus resultados a este mismo o a otro microprocesador, entonces permiten mucha flexibilidad en la configuración del sistema, en su programación, en los servicios que puede dar al usuario, y muy a menudo reducen el costo.

Luego se nota el papel predominante de las minicomputadoras. Ca

si no hay función que no puedan cumplir, aunque frecuentemente se necesita la colaboración de otras computadoras. La "mini" se ha vuelto, en consecuencia, el caballo de batalla de los físicos.

En tercer lugar cabe subrayar un fenómeno relativamente nuevo: la aparición de computadoras de diseño especial. Esta categoría es bastante amplia. Aparte de los procesadores tubulares cabe mencionar aquí los procesadores generales en paralelo, los procesadores de arreglos (que ya son comerciales), y los procesadores simbólicos (máquinas de LISP y sus análogos, una de las cuales se construye en México). Hemos excluido de la tabla los microprocesadores dedicados con un programa fijo, tales como ya se encuentran incorporados en muchos instrumentos científicos.

Hay, sin embargo, ciertos puntos que no aparecen en esta tabla.

Primeramente, la mayor parte de las aplicaciones combinan dos o tres de los usos que hemos separado en la Tabla I. Esto es significativo, porque de ello resulta uno de los problemas serios que habrá que encarar y que discutiremos más adelante.

Segundo, no hemos mencionado en la tabla ciertos desarrollos de la computación que tienen su efecto en la física. De ellos probablemente el de mayor importancia es la llamada "inteligencia artificial"⁽⁵⁾. No quiero entrar aquí en la discusión sobre lo que significa esta denominación: la inteligencia artificial. Basta que varias de las técnicas que de ella se derivan encuentran aplicaciones fértiles en la investigación física. El reconocimiento de configuraciones sirve para detectar trayectorias de partículas elementales en cámaras de burbujas o de chispas; conceptos análogos se emplean en el manejo de expresiones algebraicas, en particular cuando se trata de simplificarlas, y otros métodos se usan para dirigir el proceso de manejo simbólico; otros conceptos "inteligentes" se emplean en los sistemas de programas que empiezan a utilizarse para analizar espectros complicados y para modelar estructuras de moléculas orgánicas grandes. Uno de estos conceptos es el aprendizaje; varios sistemas de álgebra simbólica en la computadora necesitan que se les "eduque", y hay otras aplicaciones que están a punto de tomar forma.

Tercero, no se ha dicho nada sobre cómo crear los programas que corren en todas estas computadoras, las cuales no sirven para nada sin el "software". Frecuentemente se necesitan construir sistemas monstruosamente

TABLA I

Tipo de Aplicación	u	m	M	E
1. Recolectar datos				
a) velocidad - muy alta	x	x	(x)	
muy baja	x			
b) volumen grande		x-----		x
c) confiabilidad	x-----	x.....	x	
2. Controlar equipo experimental				
a) operación sistemática		x	x	
b) retroalimentaciones				
(i) mediciones ad hoc	x,x-----	x-----	x	
(ii) los datos mismos	x,x-----	x-----	x-----	x
(iii) interacción de varias retroalim.	x-----	x-----	x	
3. Transformación de datos				
a) procesado individual - fondo, escalas, etc.	x	x	x	
b) procesado estadístico - momentos, correlaciones, etc.	x.....	x.....	x	
c) procesado complejo	x-----	x-----	x	
d) selección: rechazar datos "malos"	x,x-----	x-----	x	
e) presentación - gráficas interactivas, etc.	(x-----)	x-----	x	
4. Cálculos teóricos parciales y/o pequeños	(x)	x	x	
5. Simulaciones (cálculos teóricos completos)				
a) deterministas - solución de sistemas de ecuaciones diferenciales, etc.		x	x	
b) Monte Carlo - ecuaciones insolubles o teoría no formulable		x	x	x
6. Algebra en computadora		(x)	x	[x]
7. Enseñanza por computadora	x	x	x	
8. Búsqueda de información, procesado de palabras y textos	(x).....	x.....	x,x	
	x	x.....	x	
9. Usos administrativos y misceláneos		x	x	

Indicamos con una x el uso más o menos rutinario de un tipo (o tamaño) de computadora, con (x) una aplicación posible solamente en algunos mo delos, y con [x] un uso todavía no bien desarrollado. Una línea de guiones, -----, indica una conexión directa ("on-line"), una de puntos,, indica información transmitida en cinta magnética. Las cuatro columnas corresponden al tipo de computadora, en la forma siguiente:

u microcomputadora, a veces sin periféricos
m minicomputadora
M computadora grande
E sistema dedicado, de diseño especial

Tabla I. Aplicaciones de las Computadoras en la Física.

grandes: 100,000 renglones y más son la regla. Tales esfuerzos exceden lo que puede hacer un solo investigador: se requiere un grupo, y su colaboración requiere una máquina de tiempo compartido que ofrezca ciertos servicios, p. ej., creación de bibliotecas, control y protección de archivos, etc. La "micro", utilizada por una o dos personas, constituye una limitación aquí, ya que no se pueden incorporar estos servicios en ella. Más aún, se está generalizando la idea de que para estos esfuerzos los lenguajes habituales, Fortran, Basic, Algol y aun Ada o C, involucran serias restricciones⁽⁶⁾; pero nuevos lenguajes quedan aún por inventar.

Cuarto, hemos hablado de los usos de las computadoras en la física. Pero, ¿cuántos físicos tienen los conocimientos para realizarlos? La mayoría ha recibido una formación totalmente insuficiente para ello. Han pasado por un cursillo de algunas semanas, al final del cual, mal que bien, saben construir un programa trivial en Fortran; de los escollos del análisis numérico generalmente no han oído hablar, y a menudo se imaginan que si su programa corre e imprime algunos resultados, entonces ha de ser correcto, "porque la computadora no se equivoca". La computadora puede que no se equivoque, pero el programador se equivoca a menudo: se podrá proteger contra errores garrafales solamente si domina las técnicas numéricas nada triviales que emplea. Tampoco suele saber el físico de los métodos para crear programas limpios, comprensibles y flexibles. Alegremente escribe programas mal estructurados y con comentarios confusos e insuficientes, bajo el argumento que el programa "sólo se va a usar un par de veces" (ver en la Ref. 7 lo que constituye una buena documentación); luego algunos colegas se lo piden, y el programa se agrega a la inmensa colección de programas inadecuados que dificultan el trabajo de los demás y de ellos mismos. Estos programas constituyen lo esencial del rubro "cálculos teóricos pequeños" en la Tabla I. Por lo demás, el físico generalmente ni tiene conciencia de la existencia de los otros rubros en la tabla.

He aquí un problema de formación profesional que es serio en los países desarrollados y aún más grave en nuestro México. No es tanto la falta de máquinas grandes y excesivamente caras lo que ahonda el abismo del atraso; son más bien nuestras ignorancias, nuestra autosuficiencia, lo que impide el avance.

Quinto y último punto aquí: Se nota en la tabla la frecuencia con

que se transmiten datos de una máquina a otra; pero no se ve que esto ocasiona un sinfín de problemitas prácticos, simplemente porque muchas veces las dos máquinas provienen de fabricantes diferentes. En consecuencia, sus circuitos no se dejan fácilmente acoplar, hay problemas de compatibilidad entre las representaciones de datos, es complejo y tardado trasladar un programa de una a la otra; y esto a pesar de la famosa "transportabilidad" de que supuestamente gozan lenguajes como el Fortran. Resolver estas dificultades requiere tiempo, paciencia, personal entrenado y a veces implica gastos significativos.

En esta discusión he dejado de lado los detalles técnicos. No es posible citar aquí todas las referencias relevantes, pero una buena introducción a una parte, por lo menos, de esta problemática se encuentra en la Ref. 8.

II

La imagen que se desprende de toda esta descripción es la de una muy profunda penetración de la computación electrónica en todas las partes de la física. Pero sus aplicaciones son muy diferentes entre sí, se adaptan, desde luego, a la necesidad particular de cada caso, y no parecen constituir una subdisciplina que tenga alguna unidad más allá de la implícita en el uso del mismo instrumento. "Física computacional" parecería no distinguirse, por ejemplo, de la física matemática en este aspecto.

De hecho esta comparación es ilustrativa. Las técnicas matemáticas son indispensables en toda la física, y lo que se llama "física matemática" es sobre todo el desarrollo de las técnicas relevantes. La física computacional empezó a considerarse una especialización del mismo tipo durante la década de los sesentas; fue entonces que se crearon las primeras revistas dedicadas a ella, y un poco más tarde se publicó el primer libro bajo el título de *Computational Physics*⁽⁹⁾. La situación en aquel momento se trata en forma muy clara en una recopilación de artículos publicada en 1970⁽¹⁰⁾.

Esta primera física computacional se presentaba principalmente como un complemento del análisis matemático en sus aplicaciones a la física. Un problema se deja tratar analíticamente si posee por lo menos una de tres

cualidades: simetría, linealidad y expresión en pocas variables. El problema que posee las tres en sumo grado forma el caso preferido de todo físico teórico: el oscilador armónico. En cambio, algo que para su descripción requiere ecuaciones diferenciales no lineales en muchas variables, con condiciones de contorno muy complicadas, no se resuelve mediante los métodos tradicionales. Es allí donde entra la computadora. Puede manejar muchas variables, en algunos casos especiales hasta del orden de millones; la no-linealidad no presenta ningún problema, excepto gran cuidado para detectar singularidades o soluciones múltiples; y las condiciones en la frontera pueden ser cualesquiera. Por supuesto, los problemas simétricos, lineales y de pocas variables también se pueden resolver en la máquina; son éstos los problemas que se usan para comprobar los métodos numéricos y verificar los programas, ya que conocemos las soluciones analíticas. Cuando hay muchas variables, incluso los problemas lineales pueden exigir la computadora, situación que ha generado considerables adelantos en el análisis numérico; entre estos destaca el método "rápido" para transformadas de Fourier que apareció en 1965⁽¹¹⁾.

Pero la finitud de la computadora nos impone una limitación. No se pueden manejar sino problemas discretos en ella. Si comparamos con el tratamiento analítico de una ecuación diferencial, digamos, se nota que hay tres diferentes aspectos en que la descripción se tiene que discretizar al pasar a la computadora:

- (i) Un valor numérico no puede variar en forma continua, sino debe ser uno de un conjunto finito de enteros o de fracciones. En el primer caso el intervalo entre valores vecinos es constante e igual a 1, en el segundo es constante sólo mientras no cambie el exponente; el efecto de esta imprecisión variable no ha recibido la atención que merece y frecuentemente es ignorado por el usuario físico que no está al tanto de ciertos "refinamientos" del análisis numérico los cuales, sin embargo, pueden tener consecuencias prácticas.
- (ii) No puede haber un número infinito de datos, que sean variables o subdivisiones de una variable (p. ej., una malla para integrar una ecuación diferencial parcial) o la definición tabular de una función. En algunos casos se puede demostrar que el resultado tiende a la solución analítica cuando el número de datos va al infinito,

pero no en todos. Y en pocos casos tenemos una estimación adecuada de la diferencia entre la solución finitaria y la analítica, a pesar de considerables esfuerzos teóricos.

- (iii) El número de pasos que ejecuta el programa tiene que ser finito. Este hecho ha inspirado una teoría matemática muy interesante, la de la computabilidad. Pero sus resultados hasta ahora no son muy relevantes para la física, tal vez porque el número de pasos posible en la práctica se queda muy por debajo de lo que exigen las aproximaciones que esta teoría permite desarrollar.

Esta limitación de la computadora significa que los resultados de los cálculos numéricos hechos en ella necesitan acompañarse de una estimación de sus límites de error; en la física experimental esto ya es parte de una sólida tradición, pero en la física computacional demasiadas veces no se hace. Y sin embargo:

When a problem in pure or in applied mathematics is "solved" by numerical computation, errors, that is, deviations of the numerical "solution" obtained from the true, rigorous one, are unavoidable. Such a "solution" is therefore meaningless, unless there is an estimate of the total error in the above sense⁽¹²⁾.

El análisis numérico subyacente a los programas de la física computacional comporta una buena parte de simple experiencia, junto con el riesgo de que el principiante produzca resultados con márgenes exagerados de error, sin que se dé cuenta. Métodos sofisticados para estimar los errores se describen en los textos de análisis numérico (ver p. ej., Refs. 13, 14 y 15), aunque quedan muchas dificultades por resolver; pero pocos físicos parecen conocer siquiera la magnitud del problema (algunos comentarios muy relevantes se encuentran en la Ref. 16).

En los últimos quince años este tipo de física computacional ha crecido mucho en importancia, en parte porque se ha acumulado mucha experiencia y algo de conocimientos teóricos, en parte porque el crecimiento en "potencia computacional" (velocidad de las máquinas, tamaño de las memorias centrales y de discos, etc.) ha permitido efectuar más pasos de cálculo sobre un mayor número de datos. Sin embargo, es otro desarrollo el que ha hecho de la física computacional algo muy distinto de la física matemática.

Mencionamos que muy frecuentemente varias de las aplicaciones en

la Tabla I se combinan. Los físicos experimentales combinan casi siempre la captación de datos con su tratamiento, sobre todo con la selección de los datos "buenos", y con el control de equipo experimental. El resultado de ello es que ahora el experimentador ya no ve los datos tal y como salen de la medición, incluyendo todas sus manchas y defectos; los obtiene ya depurados e interpretados: la física computacional se ha metido entre él y la materia prima de su trabajo.

Algo similar sucede con las simulaciones teóricas grandes. Se suelen hacer cuando no podemos dar un tratamiento analítico de nuestra teoría, o cuando de plano ni hemos podido formular la teoría. Esto ocurre muy a menudo cuando un fenómeno es la resultante de la interacción de muchos procesos detallados que individualmente podemos describir pero cuya combinación resulta imposible; un ejemplo sería el comportamiento de un sólido simple pero con interacciones entre primeros y segundos vecinos. Tales simulaciones se presentan como formas "computacionales" de la teoría; pero al encontrar luego modelos analíticamente accesibles de los fenómenos, se suelen comparar sus predicciones con los resultados de las simulaciones como si estos últimos fueran datos experimentales. Y tal vez al mismo tiempo un experimentador está usando el programa para obtener predicciones teóricas que irá comparando con sus mediciones en el laboratorio. Otra vez la física computacional se halla intercalada entre lo que antes estaba unido, esta vez la teoría y el experimento. En ocasiones el modelo computacional se entremezcla con los datos, usando éstos cuando se puede tener confianza en ellos, y los valores computados cuando no (un buen ejemplo en el campo meteorológico se discute en la Ref. 17).

El tercer proceso de esta índole se observa cuando el teórico utiliza la computadora para resolver sus problemas analíticos en forma simbólica. Este tipo de aplicación no está aún tan desarrollado como los otros dos que hemos mencionado; pero se puede prever que aquí, al igual que en los otros casos, la computación se intercala entre el investigador humano y lo que está trabajando.

Son estas funciones de intermediario que constituyen el elemento nuevo y que justifican que hablemos de "física computacional" en otro sentido. Las ventajas de estas formas novedosas del trabajo del físico son inmensas. Con la computadora el experimentador puede recabar millones y millo-

nes de datos, mientras manualmente tenía acceso a algunas decenas; puede someter estos datos a tratamientos extraordinariamente sofisticados que hechos a mano necesitarían algunos siglos; puede comparar varios tratamientos alternativos. Al mismo tiempo la calidad del control que la computadora ejerce sobre sus aparatos experimentales es notablemente mejor. El teórico, por su lado, puede resolver mediante la computadora problemas que no hubiera ni soñado antes; recuérdese, por ejemplo, que en el siglo pasado invertir una matriz de dimensión 5 era una tarea que no se emprendía a la ligera: hoy invertimos matrices de dimensión 200 en cosa de segundos y nos permitimos el lujo de invertir miles de ellas para acumular estadística...

III

¿Qué nos traerán los próximos años?

Antes de vaticinar sobre el futuro, importa aclarar un punto que crea mucha confusión. Debido, tal vez, al enorme aparato de publicidad de los vendedores de máquinas o de "software", se ha generado una idea muy difundida de que los diferentes tipos de computadoras estarían en competencia entre sí; se habla de la "batalla" entre microprocesadores y máquinas grandes, se publican artículos en la prensa especializada que adjudican la victoria a un lado o al otro, y se olvida siempre que esta manera de ver las cosas deforma la situación real. De hecho hay, al lado de un traslape apreciable en las funciones de los diferentes tipos de computadoras, una creciente tendencia a la colaboración. La Tabla I nota no solamente usos en la física que se pueden implementar en varias alternativas, sino también toda una serie de aplicaciones que requieren de más de una máquina; aplicaciones que se inician en una máquina, que luego corren en otra, que finalmente regresan a la primera o a veces pasan a una tercera. El concepto de la red, del procesado distribuido, está poco a poco ganando peso. Hasta hacen unos años, la única forma de red concebible era la de una máquina gigante que procesa en paralelo lo que entra de una multitud de terminales simples; de ahí vamos a la red de muchos procesadores, con terminales inteligentes que efectúan muchas operaciones locales pero se refieren a sistemas mayores, ya sea para consultar archivos comunes de datos y/o programas, ya sea para procesar problemas que exceden su capacidad, ya sea para usar

equipo periférico especializado, ya sea solamente para comunicarse en forma simple con un colaborador. Pero el cambio es lento, entre otras razones porque acoplar flexiblemente equipos fabricados por diferentes compañías no cuenta con el apoyo firme de ninguna de ellas...

Habiendo esbozado un probable marco general, hagamos algunas predicciones más detalladas, con las debidas reservas sobre nuestras limitaciones como adivinos.

En cuanto al "hardware", no cabe duda de que van a continuar las actuales tendencias en el sentido de la disminución del tamaño físico de las computadoras, de la reducción en su costo, y de usar cada vez más "hardware" en vez de "software". Pero fuera de que habrá un número mucho mayor de máquinas dedicadas y construidas para su fin especial, no se puede prever para antes del siglo XXI un cambio muy profundo en el "hardware". Incluso no se prevé mucho desarrollo de nuevas especies de periféricos, aunque tendremos terminales más flexibles (hechas "inteligentes" por las micros que incorporan), y posiblemente la aparición comercial de memorias de burbujas magnéticas. Esto último significará sin duda la desaparición de los "floppies", que ya ahora crean problemas por su poca confiabilidad y la inflexibilidad de su estructura.

En cambio, la arquitectura de las máquinas puede sufrir cambios considerables. Dos tendencias se perciben en la actualidad. Una va hacia un mayor grado de paralelismo en el procesado, la otra (que ya señalamos arriba) hacia el desarrollo de redes de computadoras en forma mucho más alcanzable. Las redes locales en este momento se han diseñado principalmente para usos comerciales, y sus características las hacen poco útiles en la investigación científica; pero redes de otra índole, por ejemplo las que se basan en el sistema CAMAC y sus sucesores, están empezando a aparecer en los laboratorios y no tardarán en generalizarse, aunque por el momento siguen siendo de origen "casero" -lo que es más barato pero requiere un personal de mayor nivel en electrónica y ciencias de la computación. También se comenzarán a usar redes entre diferentes centros, puede que incluso redes internacionales.

Pero en donde sin lugar a duda habrá los mayores desarrollos es en el área del "software"⁽¹⁸⁾. Cuatro direcciones son visibles desde ya: primero, el software que hará utilizables las redes y las hará "transparentes

tes" al usuario (es decir, que serán los sistemas que escogen en cuál máquina de la red -o en cuáles- se va a procesar nuestro problema), de tal modo que la capacidad total de la red estará a la disposición del usuario; segundo, el desarrollo de nuevos lenguajes, más apropiados para los problemas del físico, punto que discutiremos más abajo; tercero, la aparición de algoritmos notablemente más poderosos para varios de los problemas ya tradicionales (ecuaciones diferenciales parciales, inversión de matrices, etc.), lo que permitirá incrementar la dimensión de lo que se puede resolver por un orden de magnitud; cuarto, el empleo general y rutinario de técnicas de la inteligencia artificial. En mi juicio son estas cuatro direcciones de desarrollo que tendrán el efecto más profundo sobre la física computacional, si bien otras cosas puede que sean más visibles, como por ejemplo las nuevas flexibilidades en las terminales (diversos tipos de caracteres, incluyendo símbolos matemáticos, graficación semi-automática y local, etc.).

La combinación de estos elementos hará posible ciertas formas de trabajar que por ahora suenan a ciencia-ficción. Por ejemplo el traslado de nuestro problema a una computadora en la cual existen dispositivos especiales (digamos un procesador de arreglos) o subrutinas más eficaces, sin que el usuario lo haya tenido que pedir; o la intervención de una fase de análisis automatizada porque el programa tal y como lo escribe el usuario tiene ciertos defectos lógicos; o la implementación -igualmente automática- de un tratamiento numérico ya que el sistema "se dio cuenta" de que el análisis algebraico no resuelve el problema; o que la máquina aprenda mediante ejercicios sabiamente graduados a resolver cierto tipo de problemas⁽¹⁹⁾. (Reconozco que es casi imposible hablar de lo que puede lograr la inteligencia artificial sin usar un lenguaje que sólo se aplica a la natural). Muy posiblemente no podemos ni siquiera prever ahora lo que nos traerán los próximos años...

Importa subrayar que probablemente seguirá la tendencia a bajar del costo del "hardware", mientras subirá el del "software". La consecuencia de ello será sin duda que en las instituciones de investigación deberán ser cada vez más los propios investigadores quienes se encargen de la programación; y a medida que crezcan en flexibilidad y poder las herramientas a su disposición necesitarán mayores conocimientos en ciencias de la computación.

El mayor impacto de estos desarrollos puede preverse en los tres procesos mencionados, en donde la computadora se intercala entre el físico y su material. No solamente cada uno de estos procesos ofrecerá mayores posibilidades; no solamente se usarán mucho más a menudo que ahora; sino se conectarán entre sí en creciente grado, hasta que el físico verá transformarse su profesión: de ejecutante de un instrumento en el proceso de la investigación se convertirá poco a poco en director de toda la orquesta.

Esta tendencia tiene, por supuesto, muchos atractivos. Ser investigador involucra mucha talacha, mucha preocupación con un sinfín de detalles nimios. La computadora nos puede ser -y en muchas direcciones ya es de inmensa utilidad; en ciertas áreas de la física la actual investigación se vería completamente paralizada si no pudieran usarse las computadoras, y la casi totalidad de las investigaciones se verían perjudicadas. La computadora nos da acceso a fenómenos (reales y experimentales en unos casos, simulados y posiblemente imaginarios en otros) que sin ella quedan fuera de nuestro alcance.

Pero el uso irrestricto de la computadora también genera ciertos peligros que se empiezan a manifestar en la actualidad y que los desarrollos que hemos indicado pueden exacerbar al punto de destruir la física como disciplina científica si no tomamos las debidas precauciones. En la siguiente sección discutiremos aquellos problemas que ya ahora son visibles, junto con ciertas posibilidades para resolverlos.

IV

El más obvio de los peligros a que hemos aludido proviene del simple tamaño de los programas. No es raro hoy en día encontrar programas fuente (o sistemas de programas) con 100,000 renglones en Fortran, e incluso 250,000 renglones. El problema está en cómo cerciorarse de que tamaños programas son correctos. Si solamente uno en cada 100 renglones corresponde a alguna decisión binaria (p. ej., un IF en Fortran), habrá 2^{1000} o sea unos 10^{300} diferentes caminos a través del programa, cada uno de los cuales debería en principio comprobarse: una tarea imposible. Desde luego en la práctica el programa se divide en subrutinas o bloques, cada uno de los cuales se prueba por separado; si en nuestro caso tenemos 10 bloques con

100 decisiones en cada uno, el número de caminos para atravesar el programa se reduce a 10×2^{100} , o sea unos 10^{31} . Pero esta reducción la podemos lograr solamente si efectivamente las decisiones en un bloque son independientes de las de otro. Esta es la meta que se persigue al crear los llamados programas estructurados. Ciertos lenguajes, Algol y Pascal, por ejemplo, nos ofrecen mucho más ayuda en este sentido que Fortran o Basic; pero ningún lenguaje de los actuales facilita realmente la tarea extraordinariamente enredada del análisis lógico de un programa grande. El problema radica en el hecho de que con la mejor estructura la interacción de los bloques no va a ser en general lineal; los llamados "efectos laterales" (tan temidos porque causan errores casi imposibles casi imposibles de desentrañar si los olvidamos) no pueden, como se ha propuesto, prohibir, ya que cada entrada o salida de datos intermedios es un efecto lateral; y es común que se ejecuta o no un bloque, según una decisión exterior a él. Estos problemas se agudizan mucho si varias gentes colaboran en un mismo programa, al punto en donde casi toda la disciplina de la ingeniería de "software" se puede resumir como los diversos modos de organizar esta colaboración.

La consecuencia de esta situación es que casi no hay programa de mayor envergadura en física en el cual los usuarios no hayan detectado uno que otro error. Muchos de estos errores conocidos son triviales y a menudo sólo afectan la presentación de los resultados; pero... ¿siempre? ¿Y los errores que no se han detectado?

Cabre preguntar si no se pueden desarrollar lenguajes mejor adaptados a resolver estas dificultades. Creo que la respuesta es que sí; pero los solos lenguajes no las eliminarán. También es necesario idear métodos de comprobación externa. Por lo menos una posibilidad es que un grupo de personas escriba el programa y otro grupo independiente lo someta a pruebas; tales procedimientos ya se usan para la producción de "software" de sistemas (p. ej., paquetes matemáticos), pero aún no penetran plenamente en el campo de las aplicaciones en física. La razón es simplemente la complejidad del problema: un paquete matemático lo forman unas 30 a 100 subrutinas razonablemente independientes, en cambio los bloques y subrutinas de un programa grande en física son mucho más numerosos y no son nada independientes.

Un segundo problema concierne la confiabilidad de los resultados; no en el sentido de posibles errores de programación, sino en el sentido de

su precisión, en el sentido de poder determinar un intervalo de confianza para cada uno. Como ya se comentó arriba, no tenemos todavía métodos adecuados para todos los casos, y mientras más grande el programa, mayor la dificultad. Sin embargo, por regla general los originadores de programas grandes suelen dar indicaciones sobre lo que se puede esperar. Naturalmente estas indicaciones valen para ciertas gamas de los valores de entrada, y pierden su valor a medida que uno se aleja de estas gamas. Pero no es raro que otro grupo de investigadores pida copia del programa precisamente con el objeto de explorar una región limítrofe de su validez, o incluso para extrapolar más allá de estos límites. Un caso típico son los programas para calcular estructuras nucleares en la región de la capa s-d; algunos físicos los han usado, haciéndoles algunos cambios ligeros, para cálculos de núcleos medianos y hasta pesados; es muy difícil estimar hasta qué punto pueden tomarse en serio los resultados obtenidos. Aun más problemático que el uso de programas completos sin tener en cuenta las restricciones de validez es el uso demasiado general de algoritmos que se sabe que funcionan bien en ciertos casos: la selección de un algoritmo requiere un cuidado que generalmente no recibe (una buena discusión en el caso de las ecuaciones diferenciales parciales se puede ver en Ref. 20).

Un tercer problema es característico de las aplicaciones de la computadora en los experimentos. Es ya casi rutina en estas aplicaciones que la computadora haga -según criterios preestablecidos- una selección de los datos, reteniendo a veces solamente una mínima fracción del total de datos observados. Después, los datos se someten a un tratamiento a veces complejo y se presentan al experimentador en forma resumida, depurada y a menudo por lo menos parcialmente interpretada. El problema proviene de que el proceso de selección produce un conjunto de datos con propiedades diferentes del conjunto original, no depurado; si no fuera así, la selección sería inútil. Pero el tratamiento e interpretación posteriores nos esconden estas diferencias. Si la teoría subyacente que se usa para construir los criterios de selección y los procedimientos de interpretación es adecuada, el problema probablemente no se presenta; pero si esta teoría no es tan adecuada como creemos, puede haber una distorsión indeseable en los datos seleccionados, sin que nos demos cuenta. En algunos casos bien conocidos, una distorsión de esta índole logró simular fenómenos que una inves-

tigación posterior reveló que eran inexistentes. ¿Estamos seguros de que en todos los casos habrá tal investigación posterior?

El mismo proceso de selección de datos según criterios preestablecidos genera un problema de otra naturaleza. Es excepcional que un experimento produzca resultados que concuerden exactamente con el modelo teórico; cuando se trata de un modelo basado en teorías ya bien comprobadas, las diferencias suelen deberse a defectos en el diseño experimental o en las mediciones, o también a factores secundarios que se despreciaron en el modelo; pero al trabajar con teorías menos bien aseguradas (y a veces incluso con teorías sólidamente establecidas) los datos discrepantes pueden sugerir nuevas líneas de investigación -pueden contener "buena física", como dice la jerga profesional- y en ocasiones pueden resultar de mucho mayor importancia que el objetivo original del experimento. Naturalmente no se descubren estos resultados de gran importancia si el físico no tiene la inteligencia y la intuición para reconocerlos como tales: piénsese en el caso de Roentgen quien descubrió los rayos X en base a observaciones que muchos otros habían hecho también pero que sólo él supo interpretar. Sin embargo, si la computadora, siguiendo lineamientos que evidentemente no pudieron prever estas situaciones, elimina todos los datos discrepantes, nos privamos de toda posibilidad de hacer tales descubrimientos. En consecuencia el desarrollo de la física como ciencia viva podría verse seriamente frenado.

Una forma de paliar este efecto negativo parece obvia: registrar todos los datos brutos antes de aplicar cualquier procedimiento de selección, con el objeto de que posteriormente se puedan examinar los datos completos desde otros puntos de vista, se puedan incluso suministrar a otros grupos de investigadores. Lo que hace imposible esta salida es simplemente el volumen de datos que en muchos casos se tendría que acumular. Por ejemplo, en los experimentos de altas energías, el número de eventos en principio registrable excede 10^{12} , y como cada evento representa algo como 1 kbyte de información detallada que se recibe de los detectores de partículas, necesitaríamos más de diez millones de cintas magnéticas para almacenar todos estos datos. Lo que sí parece factible es la acumulación de, digamos, la diezmilésima parte en algo como mil cintas; esto implica, evidentemente, una selección, la cual podría obedecer a criterios diferentes o hacerse al azar si es que no disponemos de criterios alternativos. El cos

to adicional involucrado es alto en términos absolutos, pero muy reducido en comparación con el costo global del experimento. Lo que no sería trivial, sin embargo, son los problemas organizacionales para el grupo experimental, ya que deben incluir en su planeación el acceso a sus resultados -desde antes de obtenerlos, de hecho para otros grupos; datos escogidos al azar deberían probablemente almacenarse en un centro accesible a cualquier físico del mundo durante algunos años. Pero cómo financiar el tiempo máquina necesario para analizar exhaustivamente mil cintas de datos sin más que una cierta esperanza de encontrar algo interesante, este es un problema para el cual me declaro incompetente.

Las simulaciones teóricas, particularmente las de tipo Monte Carlo, generan un problema distinto pero no menos preocupante. Como se ha mencionado, se usa una simulación allí donde hay dificultades para construir un modelo teórico completo y obtener predicciones explícitas de él; pero dado que esto es algo que el físico teórico necesita tanto como el experimental, ambos usan el modelo numérico. Para el uno representa la formulación teórica, para el otro un sustituto de la realidad experimental. Que en esta forma la computadora en la cual corre la simulación se intercala entre teoría y laboratorio es lo que genera el problema: la física se mantiene como ciencia sana en la medida que hay una interacción fluida y eficaz entre sus lados experimental y teórico. La separación organizacional que existe desde varias décadas entre estos dos aspectos no ha sido nada positiva; la introducción de otro eslabón intermediario tiende a entorpecer aún más la comunicación entre ellos. Además, este eslabón puede introducir sus propias tendencias indeseables: el sistema de programas que realiza la simulación fue escrito por un grupo de investigadores sobre la base de ciertas concepciones (o hasta preconcepciones) teóricas; un error o simplemente un sesgo conceptual en estas bases, o el uso del sistema por grupos que tienen preconcepciones diferentes, puede crear situaciones en que tales sesgos se imponen tanto a los experimentales como a los teóricos entre quienes el sistema va mediando. En teoría cinética o en la hidrodinámica turbulenta ya se han presentado tales casos, y en estos campos la batalla alrededor del valor que hay que atribuirles a las simulaciones está todavía librándose. Otra forma de este problema aparece allí donde se usan datos observacionales como valores iniciales para un cálculo teórico extendido; en los modelos computacionales atmosféricos, por ejemplo, esto puede generar

perturbaciones ondulatorias totalmente espurias que provienen de la amplificación del ruido en los datos originales⁽²¹⁾. En estos dos campos hemos reconocido el problema. Pero ¿en cuántos campos aún no nos damos cuenta?

V

Mucho en estas dificultades proviene de que generalmente el programa (o el sistema de programas) se comporta como una caja negra. Una vez construido el programa ya no lo cambiamos hasta saber que en algún sentido no funciona bien (produce resultados erróneos, tarda demasiado tiempo, ocupa mucha memoria,...); solamente le metemos datos y recogemos los resultados. El principio de esta estructura lo hemos heredado de las primeras computadoras que en la edad heroica se armaron en los laboratorios universitarios, bajo el impulso de las ideas geniales de von Neumann. Pero en la era de las terminales llamadas interactivas el programa de tipo caja negra es inapropiado. Un lenguaje de programación, deliberadamente concebido para explotar a fondo las posibilidades de constante interacción entre computadora y usuario, podría contribuir mucho para cambiar ciertas actitudes que todavía nos mantienen el espíritu de la caja negra. He aquí un área importante de investigación, en la cual es indispensable que intervengan los físicos, ya que son ellos quienes saben dónde les aprieta el zapato. Algunas ideas sobre nuevos lenguajes, sobre nuevas arquitecturas de máquinas, ya es tán empezando a aflorar (ver p. ej. la Ref. 15); pero queda mucho por hacer.

Al mismo tiempo es evidente que sólo una parte de los problemas que hemos esbozado son tales que métodos puramente computacionales los re solverían. Si bien la creación de lenguajes más apropiados para la física (y para los físicos) ayudaría mucho, quedarían otros aspectos más. El hecho es que una herramienta tan poderosa como lo es la computadora no puede sino dejar profundamente marcado el campo al que se aplica. Por lo tanto tenemos que reconocer la necesidad de grandes cambios en nuestros métodos de trabajo; de no ajustarnos a las nuevas condiciones, podríamos comprometer la seriedad científica de lo que hacemos. Un aspecto particular merece atención aquí: nuestros procedimientos de publicar los resultados de las investigaciones que realizamos. Hasta ahora se pudo mantener el nivel cien

tífico de las revistas mediante el sistema de arbitraje aplicado a los manuscritos terminados; en las condiciones que he descrito eso ya no es realmente posible. No solamente cualquier crítica del árbitro, aplicada a investigaciones realizadas en el curso de varios años por grupos grandes de científicos, vendría a destiempo; lo grave es que el árbitro normalmente no está en condiciones de averiguar lo que necesita saber para emitir un juicio balanceado. Una posible solución sería hacerlo intervenir durante la planeación y ejecución del experimento; pero esto implicaría formas nuevas de organizar la publicación de los resultados, el abandono del anonimato, y tal vez incluso el arbitraje pagado.

Espero que la discusión anterior habrá convencido al lector de que cualquier uso demasiado rutinario, insuficientemente pensado, de la computación electrónica crea el peligro de cambiar el criterio humano del investigador por la ilusión creada mediante juicios previamente formulados e incorporados en nuestros programas: "pre" juicios en el pleno sentido de la palabra. Pero si somos conscientes de tales peligros, si organizamos nuestro trabajo y nuestras formas de operar en consecuencia, entonces podemos utilizar la misma computadora para evitarlos.

REFERENCIAS

1. K.V. Roberts (ed.), "MHD Modelling of Magnetically Confined Plasmas", *Comp. Phys. Comm.* 24 (1981) 235-476, y las referencias incluidas.
2. E.W. Ng (ed.), "Symbolic and Algebraic Computation", *Lecture Notes in Computer Science* 72, Springer, Berlin (1979).
3. J.P. Fitch y H.I. Cohen, *Gen. Rel. and Grav.* 11 (1979) 411.
4. A. Bork, *Learning with Computers*, Digital Press, Bedford, Mass. (1981)
5. R.M. Glorioso y F.C. Colón O., *Engineering Intelligent Systems*, Digital Press, Bedford, MA (1980).
6. K. Wilson, CERN Courier, Junio 1983, p. 172.
7. J. McB. Wilson, I.C. Percival y D. Banks, *Comp. Phys. Comm.* 3 (1972) 180.
8. G.H.F. Diercksen y W.P. Kraemer, "Fundamentals of Computer Hard- and Software in Relation to Quantum-Chemical Calculations", in Diercksen et al. (eds.), *Computational Techniques in Quantum Chemistry and Molecular Physics*, D. Reidel, Dordrecht (1975) p. 107.
9. D. Potter, *Computational Physics*, John Wiley, Londres (1972).
10. S. Fernbach y A. Taub, *Computers and Their Role in the Physical Sciences*, Gordon & Breach, New York, N.Y. (1970).
11. J.W. Cooley y J.W. Tukey, *Math. Comp.* 19 (1965) 297.
12. J.v. Neumann y H.H. Goldstine, *Bull. Am. Math. Soc.* 53 (1947) 1021.

13. L. Fox y D.F. Mayers, *Computing Methods for Scientist and Engineers*, Oxford University Press, Oxford (1968).
14. A.S. Householder, *Principles of Numerical Analysis*, McGraw-Hill, New York, N.Y. (1953).
15. J.H. Wilkinson, *Rounding Errors in Algebraic Processes*, Her Majestg Stationery Office, Londres (1963).
16. N. Metropolis, en Ref. 19, p. 189.
17. L. Bengtsson, GARP Publ. 15, WMO-ICSU Joint Org. Committee, Ginebra (1975).
18. G.S. Patterson, Jr., *Comp. Phys. Comm.* 26 (1982) 217.
19. Y.M. El-Fattah y C. Foulard, "Learning Systems", *Lecture Notes in Control and Information Sciences*, Vol. 9, Springer, Berlin (1978).
20. J.P. Boris y D.L. Book, in Alder, Fernbach y Rotenberg (eds.), "Methods in Computational Physics", Vol. 16, Academic Press, New York, N.Y. (1976) p. 85.
21. R.D. McPherson, *Bull. Am. Meteor. Soc.* 56 (1975) 1154.