

Propuesta del Programa Interdisciplinar En Ciencias Computacionales

L. A. Núñez*

Centro de Física Fundamental,

Departamento de Física, Facultad de Ciencias,

G. De Sarrazín

Departamento de Matemáticas, Facultad de Ciencias

BORRADOR Versión α 2.0 Noviembre 2005

Índice

1. Justificación y Antecedentes	2
1.1. Las Ciencias Computacionales	2
1.2. Antecedentes	2
1.3. Experiencia en Ciencias Computacionales	3
2. Resultados y Objetivos Esperados	3
2.1. Resultados Esperados	3
2.2. Objetivos	3
3. Plan de Estudios	4
3.1. Definición y Estructura	4
3.2. Programas Resumidos	5
3.2.1. Formación Básica en Computación	5
3.2.2. Aplicaciones en Ciencias Computacionales	7
3.3. Programas Detallados	10
3.3.1. CC211: Computación Avanzada 1	10
3.3.2. CC212: Computación de Avanzada 2	12
3.3.3. CC220: Técnicas Numéricas Computacionales	13
3.3.4. CC230: Técnicas y Métodos Computacionales	16
3.3.5. CC311: Física Computacional 1	18
3.3.6. CC321: Química Computacional 1	21
3.3.7. CC331: Matemática Computacional 1	23
3.3.8. CC341: Bioinformática 1	25

* e-mail: nunez@ula.ve

Web: <http://webdelprofesor.ula.ve/ciencias/nunez/>

1. Justificación y Antecedentes

1.1. Las Ciencias Computacionales

La utilización intensiva del computador ha transformado a la actividad científico-técnica y, en esencia, ha convertido a la computación para (y por) usuarios en una naciente disciplina que propone sus propios métodos y soluciones; explora conjeturas y plantea nuevas situaciones teóricas y experimentales. Estas Ciencias Computacionales, sin pretender competir con las Ciencia de la Computación, las complementan. A diferencia de las Ciencias de la Computación que tienen el computador como centro de su estudio (el desarrollo de nuevas arquitecturas, lenguajes, sistemas y protocolos de comunicación), las Ciencias Computacionales orientan sus esfuerzos hacia la creación y desarrollo de herramientas y técnicas que hacen uso intensivo del procesador y demás recursos del computador para resolver problemas y necesidades perentorias de estas disciplinas.

Esta propuesta apunta a formar un profesional, altamente capacitado en el uso del computador como herramienta, que pueda integrarse a grupos de investigación multidisciplinarios, ampliando así los horizontes de su mercado de trabajo.

1.2. Antecedentes

Existen una serie de antecedentes que muestran la factibilidad de programas de pre y postgrado transdisciplinarios en nuestra Facultad de Ciencias. Desde siempre personal de Ciencias ha participado y liderado algunas de las trascendentes hitos en teleinformática y teleinformación de la Universidad de Los Andes (ULA). Este conjunto de iniciativas impulsadas desde la ULA han creado las condiciones para generar un microclima organizacional, una ecología de empresas y proyectos en el área de las TIC para conformar un ambiente propicio para innovación que ha sido reconocido y reseñado por estudios recientes de organismos multilaterales ¹. Entre estos acontecimientos se pueden mencionar

- **Consejo de Computación Académica** Creado en 1987 con la activa participación del Jos'e G. Silva. Esta dependencia, adscrita al Vicerrectorado Académico, genera las políticas y los lineamientos para el fomento del uso de computador como herramienta en la docencia, investigación de la ULA.
- **La Red de Datos de la Universidad de Los Andes (*RedULA*)** En 1991, la Red de Datos de la Universidad de Los Andes (*RedULA*), si bien fue el primero de los proyectos de desarrollo institucional financiado por el CDCHT, presentado por E. Chacón, L.A. Núñez, J.G. Silva y E. Pietrosemolli, es actualmente el laboratorio de estrategias organizacionales y de desarrollo de servicios en Teleinformática y Teleinformación que cubre enteramente la ciudad y enlaza los importantes núcleos de la ULA en Táchira y Trujillo con Mérida.
- **El Centro Nacional de Cálculo Científico, CeCalCULA.** Es un proyecto de la Corporación Parque Tecnológico de Mérida (*CPTM*) que se constituye, en 1997, como un esfuerzo conjunto entre la Universidad de Los Andes y el Fondo Nacional de Investigaciones Científicas y Tecnológicas (*FONACIT*). Tiene por objeto servir de mecanismo para la transferencia tecnológica en el uso intensivo del computador como herramienta de experimentación en las Ciencias y las Ingenierías. Este CENTRO, de alcance nacional, en estos casi diez años, se ha convertido en uno de los servicios descentralizados de valor agregado a la Red Académica Nacional de Centros de Investigación y Universidades Nacionales (*REACCIUN*)

¹Informe sobre Desarrollo Humano y Tecnologías de Información. Programa de las Naciones Unidas para el Desarrollo (PNUD) Agosto 2002.

http://www.pnud.org.ve/idhn_2002/idhn_2002.htm

1.3. Experiencia en Ciencias Computacionales

Nuestra facultad concentra un importante número de profesionales quienes tienen amplia experiencia en la utilización del computador y el desarrollo de herramientas computacionales. Estos profesionales, altamente calificados, sin duda pueden apoyar la iniciativa de generar un plan de formación en Ciencias Computacionales en nuestra facultad.

Entre estos profesionales y sus áreas de competencias podemos mencionar

- **Física Computacional** Luis A. Núñez, Williams Barreto, Kay Tucci, Héctor Hernández
- **Matemáticas Computacionales** Cristina Trevisan, Víctor Padrón
- **Química Computacional** Wilmer Olivares, Luis Rincón, Pedro Colmenares
- **Tecnologías de Información y Computación de Alto Rendimiento** José G. Silva, Francisco Hidrobo

2. Resultados y Objetivos Esperados

2.1. Resultados Esperados

La creciente complejidad de las técnicas y los equipos indispensables para el desarrollo de las investigaciones científicas contemporáneas impone su interdisciplinariedad e impone con cada vez más fuerza la necesidad de incorporar un personal profesional, altamente capacitado en computación, que maneje el lenguaje y los métodos de las Ciencias a través de las herramientas e instrumentos computacionales. Este personal cumplirá una doble función. Por un lado, deberá constituirse en el vínculo entre las necesidades de los distintos grupos de investigación para medir, calcular e interpretar datos (experimentales o de simulaciones) de forma automática y las crecientes disponibilidades y potencialidades de la computación como herramienta. Por el otro, incorporará a su actividad profesional la utilización intensiva del computador como herramienta de productividad.

2.2. Objetivos

Los objetivos del programa son:

1. Formar un profesional altamente capacitado en el uso del computador como herramienta en un área de Ciencias y que pueda integrarse fácilmente a grupos de investigación multidisciplinarios.
2. Ampliar el mercado de trabajo de los egresados en ciencias básicas al proveerle de destrezas y técnicas en el campo de la computación de alto rendimiento que pueden aplicarse o ser transferidas para solucionar una variedad de problemas comúnmente encontrados en simulaciones de Ciencias e Ingeniería.

Adicionalmente, se espera que:

1. Una mayor vinculación entre los centros y grupos de investigación provenientes de las distintas disciplinas y que participen en este programa. Esto permitirá permear ideas y compartir experiencias en el uso de técnicas y herramientas computacionales entre los distintos grupos, potenciando así su productividad al asimilar la experiencia de otros sin tener que reproducirla.
2. Propulsar la integración horizontal entre los equipos de investigación transdisciplinarios formados puntualmente para resolver problemas de importancia nacional identificados como comunes.

3. Plan de Estudios

3.1. Definición y Estructura

El programa de estudios interdisciplinarios enfatiza tres elementos esenciales,

- **Formación Básica en Computación** en la cual consideramos que el aspirante debe adquirir un conjunto de destrezas a través de cursos en computación. Está representada por los cursos de *Computación de Avanzada 1 y 2* (CC211 y CC212)
- **Herramientas y Técnicas en Ciencias Computacionales** Proveer al estudiante de una visión panorámica y nociones operativas de las técnicas numéricas y de moldeado matemáticos de sistemas. Esta representada por los cursos de *Técnicas Numéricas Computacionales* y de *Técnicas y Métodos Computacionales* (CC220 y CC230)
- **Aplicaciones a Ciencias Computacionales** Apunta a mostrar el uso de las herramientas, técnicas y métodos en Física, Química, Matemáticas y Biología. Está representadas por los cursos de *Física Computacional 1*, *Química Computacional 1*, *Matemáticas Computacionales 1*, y *Bioinformática 1*

Todos estos cursos son teóricos prácticos y corresponden a cursos con 5 unidades créditos correspondientes a 4 horas de actividad teórica y 2 de práctica.

Se presupone conocimiento de elementos de la arquitectura de sistemas computacionales y destrezas en programación algorítmica en lenguajes de alto nivel. Vale decir, un curso introductorio de programación.

El cumplimiento de programa interdisciplinar supone la aprobación de un total 25 unidades créditos, divididas de la siguiente forma:

- 20 unidades obligatorias a través de cuatro cursos comunes a todas las áreas.
- 5 unidades créditos del área de especialización *Física Computacional*, *Química Computacional*, *Matemáticas Computacionales*, o *Bioinformática*

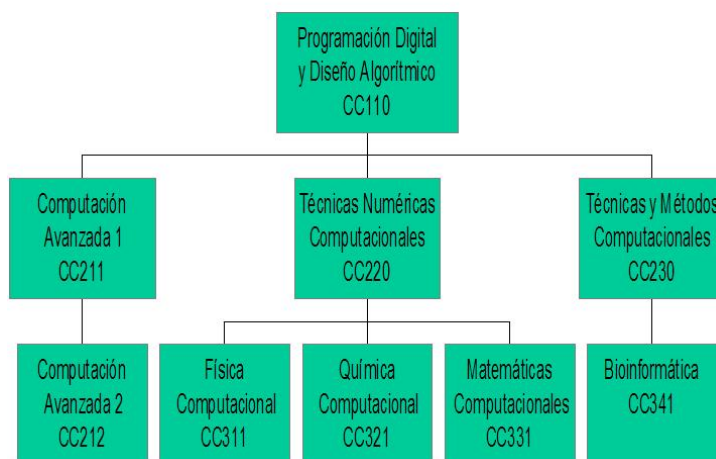
Este programa interdisciplinar tiene el siguiente régimen de prelación:

- CC211 y CC212 *Computación de Avanzada*: provee al estudiante de los elementos de arquitectura de computadores de alto rendimiento, sistemas de operación, estructura formal de lenguajes de programación y los elementos mínimos de desarrollo de aplicaciones. CC211 *Computación de Avanzada 1*, tiene como prelación *Programación y Diseño Algorítmico*. Por su parte *Computación de Avanzada 2*, CC212 es prelada por CC211.
- CC220 *Técnicas Numéricas Computacionales*: Tiene por objetivo proveer al estudiante de un conocimiento operativo de un conjunto de técnicas numéricas que le permitan resolver los problemas matemáticos que normalmente se encuentran en la descripción y simulación de los fenómenos físicos. Este curso tiene como prelación *Programación y Diseño Algorítmico*.
- CC230 *Técnicas y Métodos Computacionales*: El curso de *Técnicas y Métodos Computacionales* también tiene como prelación *Programación y Diseño Algorítmico*
- Los cursos correspondientes al área de **Aplicaciones a Ciencias Computacionales**, vale decir *Física Computacional 1*, CC311, *Química Computacional 1*, CC321, *Matemáticas Computacionales 1*, CC331, y *Bioinformática 1*, CC341, están preladados por los cursos CC220 *Técnicas Numéricas Computacionales* y CC230 *Técnicas y Métodos Computacionales*

Código	Curso	Unidades
CC110	Programación y Diseño Algorítmico	NA
CC211	Computación de Avanzada 1	5
CC212	Computación de Avanzada 2	5
CC220	Técnicas Numéricas Computacionales	5
CC230	Técnicas y Métodos Computacionales	5
CC311	Física Computacional	5
CC321	Química Computacional	5
CC331	Matemáticas Computacionales	5
CC341	Bioinformática	5

La siguiente figura intenta representar el flujo de los cursos dentro del programa

Flujograma del Programa Interdisciplinar en Ciencias Computacionales



3.2. Programas Resumidos

3.2.1. Formación Básica en Computación

CC211 Computación de Avanzada 1

Objetivo: Introducir al estudiante en la computación de avanzada y proveerlo de conocimientos fundamentales sobre arquitecturas de computadores y sistemas operativos, principalmente distribuidos, de forma que pueda entender y atacar con eficacia los aspectos y problemas relacionados con la computación de avanzada.

Contenido: ¿ Qué es computación de avanzada ? . ¿ Por que la computación de avanzada ? . Alcance de la computación de avanzada. Contribuciones a la sociedad de la computación de avanzada. Tipos de sistemas. Tipos de kernel. Programación (*Scheduling*) de procesos. Comunicación entre procesos. Memoria: tipos y Tecnologías. Administración de la Memoria. Microprocesadores de alto rendimiento. Sistemas de archivos distribuidos. Organización de procesadores. Modelos de computación paralela.

Bibliografía selecta:

- Buyya, R (1999) **High Performance Cluster Computing** Vol 1 (Prentice Hall, Upper Saddle River, New Jersey)
- Dowd, K. y Severance, C. (1998) **High Performance Computing**, 2nd Edition, (O'Reilly & Associates, Inc., Cambridge, Massachusets).
- Quinn, M. (1994) **Parallel Computing: Theory and Practice** (McGraw-Hill, New York).

CIC212 Computación de Avanzada 2

Objetivo: Dotar al estudiante con conceptos, teoría y práctica de forma que sea capaz de aumentar el rendimiento de aplicaciones bien sea en máquinas con un procesador o en máquinas con múltiples procesadores. Las máquinas con múltiples procesadores pueden tener los procesadores dentro de una misma armazón, es decir, una máquina paralela o distribuidos como en clusters de PCs o estaciones de trabajo.

Contenido: Compiladores y depuradores. Lenguajes optimizables. Optimización en compiladores. Niveles de Optimización. Cronometraje y profiling. Eliminación de congestiones. Ramificaciones. Optimización de lazos. Patrones de acceso a memoria. Entendiendo paralelismo. Ley de Amdahl. Eficiencia, granularidad y costo de comunicación. Descomposición de problemas. Multiprocesadores de memoria compartida. Asistiendo a los compiladores. Computación usando pase de mensajes. Parallel Virtual Machine (PVM). Message Passing Interface (MPI). Diseño de algoritmos paralelos. Cómputos sincronizados. Balanceo de carga y detección de terminación.

Bibliografía selecta:

- Buyya, R (1999) **High Performance Cluster Computing** Vol 2 (Prentice Hall, Upper Saddle River, New Jersey)
- Dowd, K. y Severance, C. (1998) **High Performance Computing**, 2nd Edition (O'Reilly & Associates, Inc., Cambridge, Massachusets).
- Foster, I. (1995) **Designing and Building Parallel Programs: Concepts and Tools for Parallel Software Engineering**, (Addison-Wesley, New York).
- Snir, M., Dongarra, J., y otros (1988). **MPI: The Complete Reference**. (Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey).

CC220 Técnicas Numéricas Computacionales

Objetivo: Proveer al estudiante de una visión panorámica y nociones operativas de las técnicas numéricas más comúnmente utilizadas para resolver problemas en Ciencias e Ingeniería.

Contenido: Integración Numérica; Errores en el Cómputo Científico; Interpolación y Aproximación de Funciones; Diferenciación Numérica; Ceros o raíces de una Función; Tratamiento Estadístico de Datos: Transformada Rápida de Fourier; Sistemas de Ecuaciones Lineales Algebraicas y Elementos de Algebra Matricial Numérica; Autovalores y Autovectores. Bibliotecas de Algebra Lineal, sus Usos y Ventajas; Valores Iniciales y las Ecuaciones Diferenciales Ordinarias; Valores de Contorno y las Ecuaciones Diferenciales Ordinarias; Diferencias Finitas y Ecuaciones Diferenciales Parciales. Aproximación por elementos finitos. Cálculos de Monte Carlo. Nociones de Computación Inteligente. Series de Tiempo y su importancia.

Bibliografía selecta:

- Acton, F. (1996) **Real Computing Made Real. Preventing Errors in Scientific and Engineering Calculations** (New Jersey. Priceton University Press).

- Landau, R. H. y Paez M. J. (1997) **Computational Physics** (New York: Wiley Interscience Publication).
- Meyer, S. L. (1975) **Data Analysis for Scientists and Engineers** (New York: John Wiley Publication)
- Press, W. H., Flannery B. P., Teukolsky. S. A. y Vetterling W. T. (1992) **Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing**. 2da Edición (Cam bridge: Cambridge Univ. Press).

CC230 Técnicas y Métodos Computacionales

Objetivo: Introducir al estudiante en las técnicas de modelado matemático a través de los nuevos métodos computacionales. En particular, se hará un estudio detallado de las técnicas clásicas de Computación Inteligente: Redes Neuronales Artificiales, Computación Evolutiva y Lógica Difusa. Además, se hará una breve introducción a otras técnicas de más reciente data.

Contenido: ¿ Que es Computación Emergente?. Propiedades Biológicas a Explotar. Vida Artificial e Inteligencia Artificial. Características de la Computación Emergente. Alcance de la Computación Emergente. Redes Neuronales Artificiales. Modelo de la Red Neuronal de Hopfield y el de Kohonen. Otras Redes Neuronales. Computación Evolutiva. Algoritmos Genéticos. Lógica Difusa. Lógica Difusa Temporal y Dinámica. Nuevos Paradigmas. Sistemas Artificiales de Hormigas. Sistemas Artificiales Inmunológicos. Algoritmos Culturales. Enjambre de Partículas, Computación ADN, Metodología de Hibridación de Técnicas Inteligentes. Sistemas Multiagentes.

Bibliografía selecta:

- E. Bonabeau, M. Dorigo, G. Theraulaz, (1999) **From Natural to Artificial Swarm Intelligence**, (Oxford University Press)
- D. Goldberg. (1990) **Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning**, (New York: Addison Wesley)
- S. Kartalopoulos, (1996) **Understanding Neural Networks and Fuzzy Logic: Based concepts and Fuzzy Logic**, (Los Alamitos: IEEE Press).
- R. Albrecht, C. Reeves, N. Steele, (1993) **Artificial neural nets and genetic algorithms**, (New York; Springer-Verlag).

3.2.2. Aplicaciones en Ciencias Computacionales

CC311 Física Computacional 1

Objetivo: Introducir al estudiante un basamento extensivo en las técnicas computacionales modernas que son comúnmente usadas para modelar fenómenos físicos usando el computador como herramienta fundamental. El estudiante **aprenderá haciendo**, por lo que el curso está diseñado en forma tal que el estudiante pase la mayor parte del tiempo programando, calculando y analizando los resultados obtenidos vía el computador.

Contenido: Métodos Numéricos. Importancia de la precisión numérica. Elementos de Unix. Utilidad del *Makefile*. Introducción al álgebra simbólica en el computador (Mathematica y Maple). Nociones del graficador Gnuplot y mgrace. Estudio de Sistemas Dinámicos. Elementos de la Teoría del Caos. Sistemas no lineales. Elementos de la teoría de Fractales. Introducción a fenómenos críticos y a la teoría de renormalización. Método de Simulación Monte Carlo. Elementos de la teoría de números aleatorios. Generación de números aleatorios en el computador. Análisis del error en cómputos vía Monte Carlo. La técnica Bootstrapping. Movimientos aleatorios (1D y 2D). Movimiento Browniano. El problema del vendedor. Algoritmo de Metropolis. Introducción a la teoría de percolación. El

autómata celular. El juego de la vida. El modelo ferromagnético de Ising (1D y 2D). Simulación de potenciales tipo Lenard-Jones.

Bibliografía selecta:

- DeVries, P. L. (1994), **A First Course in Computational Physics**, Wiley.
- Gould, H., Spornick, L., and Tobochnik, J. (1995) **Thermal and Statistical Physics Simulations**, Wiley.
- Gaylord, R.J., and Wellin, P. R. (1994). **Computer Simulations with Mathematica: Explorations in Complex Physical and Biological Systems**. Springer Verlag.
- Hall, N. (editor) (1993) **Exploring Chaos**. W. W. Norton & Company.
- Hermann, D.W. (1990). **Computer Simulation Methods in Theoretical Physics**, second edition. Springer Verlag.
- Hilborn, R. C. (1994) **Chaos and Nonlinear Dynamics** Oxford University Press.

CIC321 Química Computacional 1

Objetivo: Dotar al estudiante con conceptos, teoría y práctica de los métodos ab-initio de cálculo de estructura electrónica en sistemas moleculares. Igualmente, se introducirán los fundamentos teóricos de los métodos y las herramientas computacionales basadas en la teoría del funcional de la densidad.

Contenido: Métodos Ab-Initio. La Aproximación de Born-Oppenheimer. El principio de exclusión de Pauli. Productos de Hartree. Determinantes de Slater. La forma exacta de la función de onda. Integrales de 1- y 2-electrones. Segunda cuantización. Operadores de espín. Funciones de onda adaptadas por el espín. Determinantes no-restringidos. La Aproximación de Hartree-Fock. El teorema de Koopman y el teorema de Brillouin. Las ecuaciones de Roothaan. Interacción de configuraciones (CI). Teoría de perturbaciones de Moller-Plesset (MP). Teoría Funcional de la Densidad. Teoría de la Matriz Densidad. La densidad electrónica. El funcional de Thomas-Fermi. Herramientas de Química Computacional. Optimización de geometrías. Cálculos de frecuencia. Estudio de estados excitados. Inclusión del solvente.

Bibliografía selecta:

- A. Szabo y N. S. Oslund. (1989) **Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory**. (New York: Dover).
- W. J. Hehre, L. Radom, P. v. R. Schleyer y J. A. Pople (1986). **Ab Initio Molecular Orbital Theory**. (New York: Wiley).
- R. G. Parr y W. Yang. (1989) **Density functional theory of atoms and molecule**. (Oxford : Oxford University Press)
- E. S. Kryachko y E. V. Ludeña. (1990) **Energy density functional theory of many-electron systems**. (Dordrech: Kluber)
- R. F. W. Bader. (1990) **Atoms in Molecule: A quantum theory**. (Oxford : Oxford University Press).

CC331 Matemática Computacional 1

Objetivo: Proveer al estudiante de los principales conceptos e ideas modernas que le permitirán entender, usar y desarrollar algoritmos conducentes a la formulación y solución de problemas de las matemáticas aplicadas a grandes escalas que requieren del computador como herramienta indispensable de cómputo.

Contenido: Soluciones de ecuaciones algebraicas no lineales. Convergencia Y estabilidad. Método Levenberg-Marquardt. Solución de problemas de valor inicial. El método implícito vs. el método explícito. Método One-step y método Predictor-Corrector. Solución de problemas con valor en la frontera. Diferencias finita vs. Elementos finitos. Mallas adaptivas en 2D. Problemas parabólicos, elípticos e hiperbólicos. Dinámica de problemas bidimensionales.

Bibliografía selecta:

- Oran, E.S and Boris, J. P. (1987). **Numerical Simulation of Reactive Flow**. Elsevier.
- Finlayson, B.A. (1980). **Nonlinear Analysis in Chemical Engineering**. McGraw-Hill.
- Finlayson, B.A. (1972). **The Method of Weighted Residuals and Variational Principles** Academic Press.
- Kubicek, M. and Hlavacek, V. (1983). **Numerical Solution of Non-linear BVP with Applications** Prentice-hall.
- Kelley, C. T. (1995). **Iterative Methods for Linear and Nonlinear Equations**, SIAM.
- Rheinboldt, W. (1974). **Methods for Solving Systems of Nonlinear Equations**. SIAM.

CC341 Bioinformática 1

Objetivo: Introducir al estudiante un basamento extensivo en las técnicas computacionales modernas que son comúnmente usadas para modelar fenómenos biológicos, que incluyen métodos para almacenar, analizar, clasificar y hacer predicciones de datos biológicos tal como secuencias de proteínas y ácidos nucleicos, así como también la gerencia y comparaciones de genomas.

Contenido: Internet, Bases de Datos y Python. Tipos de datos y Manejo de Archivos. Biopython. “Descifrando” el NCBI. BioSeq-Sets: Colección de Secuencias. Alineación de Secuencias. FASTA. Predicción a partir de secuencias de ADN. Análisis Filogenético. Programas de Filogenia. Análisis de Genomas Comparativos. Reconstrucción de Rutas Metabólicas.

Bibliografía selecta:

- Ascher, D. M. L. (1999). **Learning Python**. O’Reilly & Associate.
- Baxevanis, A. D. & Ouellette, B. F. F. (2001). **Bioinformatics. A practical Guide to the Analysis of Genes and Proteins**. Wiley, John and Sons, Incorporated.
- Gibas, C. & Jambeck, P. (2001). **Developing Bioinformatics Computer Skills**. O’Reilly & Associate.
- Webster, D. (2000). **Protein Structure Prediction. Methods & Protocols** Humana Press.

3.3. Programas Detallados

3.3.1. CC211: Computación Avanzada 1

Objetivo: Introducir al estudiante en la computación avanzada y proveerlo de conocimientos fundamentales sobre arquitecturas de computadores y sistemas operativos, principalmente distribuidos, de forma que pueda entender y atacar con eficacia los aspectos y problemas relacionados con la computación más actualizada.

Programa Detallado

1. **¿ Qué es computación Avanzada ?:** ¿ Por qué la Avanzada ? Alcance de la computación avanzada. Contribuciones a la sociedad de la computación avanzada.
2. **Tipos de sistemas:** ¿ Qué es un sistema operativo? ¿ Qué es un sistema distribuido? ¿ Qué son sistemas de tiempo real? ¿ Qué son sistemas paralelos? Ejemplos.
3. **El kernel:** Tipos de kernel; Procesos y hebras (*Threads*); Administración de procesos; Programación (*Scheduling*) de procesos.
4. **Comunicación entre procesos:** Factores; Pase de mensajes; *Pipes*; *Sockets*; *Remote procedure calls*
5. **Memoria:**
 - a) Tipos y Tecnologías
Registros, Cache y su organización, Memoria virtual;
 - b) Administración de la Memoria;
Manejo centralizado, Modelo de memoria simple, Modelo de memoria compartida, Modelo de memoria distribuida, Migración de memoria
6. **Microprocesadores de alto rendimiento:** Procesadores *CISC*; Procesadores *RISC*; Ejecución de instrucciones fuera de orden; Tendencias.
7. **Sistemas de archivos distribuidos:** Servicios de archivos distribuidos; Servicios de directorios distribuidos; *NFS*; X.500.
8. **Organización de procesadores:** Bus y *Ethernet*; Mallas; Mariposa (*Butterfly*); Árboles binarios; Pirámides; Hipercubo; Omega; Fibras de interconexión; Evaluación de organizaciones de procesadores.
9. **Modelos de computación paralela;**
 - a) Arreglos de procesadores:.
Procesador Vectorial *Pipelined*, Arreglos de Procesadores;
 - b) Multiprocesadores:
UMA: Uniform Memory Access, *NUMA: Non-Uniform Memory Access*
 - c) Multicomputadores
 - d) Taxonomía de *Flynn*
Single instruction stream, single data stream (SISD), *Single instruction stream, multiple data stream (SIMD)*, *Multiple instruction stream, single data stream (MISD)*; *Multiple instruction stream, multiple data stream (MIMD)*; *Single program, multiple data (SPMD)*

Textos Recomendados

- Baron, R., y Higbie, L. (1992) **Computer Architecture**, (Addison-Wesley, New York).
- Buyya, R (1999) **High Performance Cluster Computing** Vol 1 (Prentice Hall, Upper Saddle River, New Jersey)
- Dowd, K. y Severance, C. (1998) **High Performance Computing**, 2nd Edition, (O'Reilly & Associates, Inc., Cambridge, Massachusetts).
- Galli, D. (1999) **Distributed Operating Systems: Concepts and Practice** (Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey).
- Quinn, M. (1994) **Parallel Computing: Theory and Practice** (McGraw-Hill, New York).
- Redelfs, A.(1998) (Editor) **High Performance Computing Contributions to Society** (Tabor Griffin Communications, San Diego, California).

3.3.2. CC212: Computación de Avanzada 2

Objetivo: Dotar al estudiante con conceptos, teoría y práctica de forma que sea capaz de aumentar el rendimiento de aplicaciones bien sea en máquinas con un procesador o en máquinas con múltiples procesadores. Las máquinas con múltiples procesadores pueden tener los procesadores dentro de una misma armazón, es decir, una máquina paralela o distribuidos como en clusters de PCs o estaciones de trabajo.

Programa Detallado

1. **Compiladores y depuradores:** Historia; Lenguajes optimizables; Optimización en compiladores; Niveles de Optimización; Optimizaciones clásicas; Depuradores; Elementos del Make de UNIX.
2. **Cronometraje y profiling:** Cronometraje de aplicaciones; *Profiling* de aplicaciones;
3. **Eliminación de congestiones:** Llamadas a subrutinas; Ramificaciones; Ramificaciones con lazos.
4. **Optimización de lazos:** Conteo de operaciones; Desenrollando lazos; Lazos anidados; Intercambio de lazos; Patrones de acceso a memoria.
5. **Entendiendo paralelismo:** Dependencias; Lazos; Referencias ambiguas; Ley de Amdahl; Aceleración superlineal; Eficiencia; Granularidad y costo de comunicación; Descomposición de problemas.
6. **Multiprocesadores de memoria compartida:** El *hardware*; El *software*; Técnicas para programar con múltiples hebras (*Threads*); Paralelización automática; Asistiendo a los compiladores; Ejemplos.
7. **Computación usando pase de mensajes:** *Parallel Virtual Machine (PVM)*; *Message Passing Interface (MPI)*; Ejemplos.
8. **Diseño de algoritmos paralelos:** Algoritmos embarzosamente paralelos; Estrategias de partición y dividir-y-recolectar; Cómputos *pipelined*; Cómputos sincronizados; Balanceo de carga y detección de terminación.
9. **Ejemplos:** Algoritmos de ordenamiento; Algoritmos numéricos; Algoritmos de búsqueda y optimización.; Procesamiento de imágenes.

Textos recomendados:

- Buyya, R (1999) **High Performance Cluster Computing** Vol 2 (Prentice Hall, Upper Saddle River, New Jersey)
- Dowd, K. y Severance, C. (1998) **High Performance Computing**, 2nd Edition (O'Reilly & Associates, Inc., Cambridge, Massachusetts).
- Foster, I. (1995) **Designing and Building Parallel Programs: Concepts and Tools for Parallel Software Engineering**, (Addison-Wesley, New York).
- Geist, A., Suderam, V., y otros (1994). **PVM: Parallel Virtual Machine. A User's Guide and Tutorial for Networked Parallel Computing**, (MIT Press, Massachusetts).
- Quinn, M. (1994) **Parallel Computing: Theory and Practice** (McGraw-Hill, New York).
- Snir, M., Dongarra, J., y otros (1988). **MPI: The Complete Reference**. (Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey).
- Wilkinson, B. y Allen, (1999) **C. Parallel Programming: Techniques and Applications Using Networked Workstations and Parallel Computers** (Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey).

3.3.3. CC220: Técnicas Numéricas Computacionales

Objetivo: Proveer al estudiante de una visión panorámica y nociones operativas de las técnicas numéricas más comúnmente utilizadas para resolver problemas en Ciencias e Ingeniería.

Programa Detallado:

1. **Operaciones Fundamentales.** *Integración Numérica:* Trapecios; Regla de *Simpson*; Cuadratura Gaussiana en bases de polinomios ortogonales; Integración por el Método de Monte Carlo. *Errores en el Cómputo Científico:* Precisión de la máquina; Números enteros y puntos flotantes; Errores en la adición y multiplicación. Errores algorítmicos y Errores Relativos; Estimación de la propagación de Error
2. **Interpolación y Aproximación de Funciones:** *Interpolación y Aproximación:* Interpolación de Lagrange, Método de *Aitken*, Interpolación por *Splines* Cúbicos, Ajuste de Curvas por Mínimos Cuadrados lineales y no lineales. Series y su convergencia, Evaluación de Funciones Polinómicas y Racionales, Ecuaciones Cuadráticas y Cúbicas, Aproximaciones de *Chebyshev* y *Padé*.
3. **Diferenciación y Raíces de Funciones:** *Diferenciación Numérica:* Diferencias Finitas, Diferencia adelantada, centrada y extrapolada; Segundas derivadas; Método de Newton II y segundas derivadas numéricas. *Ceros de una Función:* Ecuaciones algebraicas no lineales y sus soluciones. Métodos de Bisección, Regula Falsi Métodos de Van Wijngaarden-Dekker-Brent y de Newton Rapson. Sistemas de Ecuaciones No lineales y sus Raíces.
4. **Los Datos y su Tratamiento.** *Tratamiento Estadístico de Datos:* Distribuciones, Promedios y Desviaciones, Distribuciones Teóricas más populares, Funciones Probabilistas, El Experimento Estadístico, La Estadística y la Propagación de errores, La Función más Probable, Método de Mínimos Cuadrados. Correlaciones Lineales y no-paramétricas.
5. **Transformada de Fourier.** *Transformada Rápida de Fourier:* Transformada de Fourier Discreta. Transformada Rápida de Fourier de Funciones, en 2D. *Análisis Espectral:* Convolución y Deconvolución. Correlación y Autocorrelación. Filtrado Otras Transformadas: *Wavelets*.
6. **Sistemas de Ecuaciones Lineales Algebraicas:** *Elementos de Algebra Matricial Numérica:* Eliminación de Gauss-Jordan. Descomposición LU. Sistemas de Ecuaciones Tridiagonales y en Bandas. Soluciones Iterativas para Mejorar los Resultados. Matrices Esparcidas, *Casos de Estudio:* Matrices de Vandermonde y Toeplitz. Descomposición de Cholesky y QR.
7. **Autovalores y Autovectores.** *Matrices Simétricas:* Transformaciones de Jacobi. Matrices Simétricas a Tridiagonales. Autovalores y Autovectores. Matrices Hermíticas. *Métodos Avanzados:* La forma de Hessenberg y los algoritmos para tratar matrices genéricas.
8. **Bibliotecas de Algebra Lineal, sus Usos y Ventajas** *Bibliotecas Científicas en la Red:* Criterios de Selección de una subrutina. Uso de las bibliotecas *Basic Linera Algebra Subroutines* BLAS, PBLAS, LAPACK. *Bibliotecas Comerciales:* Bibliotecas *Engineering and Scientific Subroutine Library* y la *International Mathematical and Statistical Library* (IMSL).
9. **Valores Iniciales y las Ecuaciones Diferenciales Ordinarias.** *Modelando con Ecuaciones:* Las Ecuaciones, el Vocabulario y los Fenómenos que Describen. Ordinarias y Parciales. Valores Iniciales y Valores de contorno. La idea de Integración y el Método de Euler. Familia de Métodos Runge-Kutta. Familia de Métodos Predictor Corrector. Control mecanismos y criterios para el control de paso. Ecuaciones *Stiff*.

10. **Valores de Contorno y las Ecuaciones Diferenciales Ordinarias** *Los Métodos de Disparo y de Relajación. Manejo adaptativo del paso y de singularidades.*
11. **Diferencias Finitas y Ecuaciones Diferenciales Parciales.** *Ecuaciones en Derivadas Parciales: Generalidades y Clasificación de las Ecuaciones en derivadas Parciales. Problema de Valores Iniciales y Métodos de Runge Kutta. Problemas de Valores de Contorno y Métodos de Relajación. Ecuaciones Parabólicas e Hiperbólicas. Métodos De Conservación de Flujo. Métodos de Relajación y de malla variable.*
12. **Elementos Finitos.** *Aproximación por elementos y el método de Galerkin: Diferencias Finitas y Elementos Finitos; Solución por Series y Determinación de los Parámetros. La forma de la funciones y la contribución de los elementos. Los Métodos Variacionales y su aplicación.*

Textos Recomendados

- Acton, F. (1996) **Real Computing Made Real. Preventing Errors in Scientific and Engineering Calculations** (New Jersey. Priceton University Press)
- Carnahan, B., Luther, H.A. y Wilkes, J.O. (1969) **Applied Numerical Methods** (New York: John Wiley Publication)
- Gershenfeld, N. (1999) **The Nature of Mathematical Modeling** (Cambridge: Cambridge Universty Press)
- Landau, R. H y Fink, P.J. (1993) **A Scientist and Engineer's Guide to Workstation and Supercomputers** (New York: Wiley Interscience Publication).
- Landau, R. H. y Paez M. J. (1997) **Computational Physics** (New York: Wiley Interscience Publication).
- Meyer, S. L. (1975) **Data Analysis for Scientists and Engineers** (New York: John Wiley Publication)
- Press, W. H., Flannery B. P., Teukolsky. S. A. y Vetterling W. T. (1992) **Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing.** 2da Edición (Cam bridge: Cambridge Univ. Press).
- Press, W. H., Flannery B. P., Teukolsky. S. A. y Vetterling W. T. (1996) **Numerical Recipes in Fortran 90: The Art of Parallel Scientific Computing** (Cambridge: Cambridge Univ. Press).
- Tao Pang, **An Introduction to Computational Physics**,(1997). (Cambridge: Cambridge Univ. Press).
- Thompson, W. J. (1992) **Computing for Scientists and Engineers** (New York: Wiley Interscience Publication).
- Wong, S.S.M. (1997) **Computational Methods in Physics and Engineering** 2da Edición (Singapur: World Scientific).

Referencias Electrónicas

- <http://www.nr.com/>
- <http://www.physics.orst.edu/~rubin/rubin/CPview.html>

- <http://www.physics.unlv.edu/~pang/cp.html>
- <http://math.nist.gov/gams/>
- <http://www.netlib.org/>

3.3.4. CC230: Técnicas y Métodos Computacionales

Objetivo: Introducir al estudiante en las técnicas de modelado matemático a través de los nuevos métodos computacionales. En particular, se hará un estudio detallado de las técnicas clásicas de Computación Inteligente: Redes Neuronales Artificiales, Computación Evolutiva y Lógica Difusa. Además, se hará una breve introducción a otras técnicas de más reciente data.

Programa Detallado

1. **¿ Que es Computación Emergente?:** Propiedades Biológicas a Explotar. Vida Artificial e Inteligencia Artificial. Características de la Computación Emergente. Elementos Básicos. Alcance de la Computación Emergente.
2. **Redes Neuronales Artificiales:** Principio del Funcionamiento del Sistema Neuronal; Caracterización de una Red de Neuronas Artificial; Aprendizaje; Clasificación de las Redes Neuronales; Modelos de Neuronas Artificiales (Redes Neuronales tipo Perceptrón y *Backpropagation*; Modelo de la Red Neuronal de Hopfield y el de Kohonen; Otras Redes Neuronales: ART, Adaline; Redes Estocásticas y de Boltzman) Ejemplos.
3. **Computación Evolutiva:** Generalidades; Algoritmos Genéticos; Otras Técnicas Evolutivas (Programación Genética, Programación Evolutiva, Estrategias Evolutivas) Ejemplos.
4. **Lógica Difusa:** Introducción a la Lógica Difusa; Fundamentos Matemáticos; Componentes básicos de un Sistema Difuso; Lógica Difusa Temporal y Dinámica; Ejemplos.
5. **Nuevos Paradigmas:** Sistemas Artificiales de Hormigas (Generalidades, Algoritmos, Enfoque general de resolución de problemas, Ejemplos); Sistemas Artificiales Inmunológicos: (Sistema Inmunológico Humano, Modelado del problema del Virus, Ejemplos); Ideas Emergentes: (Algoritmos Culturales, Enjambre de Partículas, Computación ADN)
6. **Metodología de Hibridación de Técnicas Inteligentes:** Introducción al problema de integración de técnicas inteligentes; Aspectos cognitivos a considerar; Clasificación de los sistemas híbridos inteligentes; Sistemas Multiagentes; Ejemplos de Sistemas Híbridos

Textos Recomendados

- E. Bonabeau, M. Dorigo, G. Theraulaz, (1999) **From Natural to Artificial Swarm Intelligence**, (Oxford University Press)
- D. Corne, M. Dorigo, F. Glover, (1999) **New ideas in Optimization**, (McGraw Hill).
- D. Goldberg. (1990) **Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning**, (New York: Addison Wesley)
- J. Hilera, V. Martínez, (1995) **Redes Neuronales Artificiales: Fundamentos, Modelos y aplicaciones**, (Madrid; Addison Wesley).
- S. Kartalopoulos, (1996) **Understanding Neural Networks and Fuzzy Logic: Based concepts and Fuzzy Logic**, (Los Alamitos: IEEE Press).
- R. Albrecht, C. Reeves, N. Steele, (1993) **Artificial neural nets and genetic algorithms**, (New York; Springer-Verlag).

- J. Anderson, (1994) **Introduction to practical neural modeling** (Cambridge: MIT Press).
- B. Buckles, F. Petty, (1992) **Genetic algorithms**, (Los Alamitos: IEEE Press).
- M. Caudill, C. Buttler, (1992) **Understanding neural networks: Computer explorations**, (Cambridge: MIT Press).
- D. Fogel, (1995) **Evolutionary Computation**, (Los Alamitos: IEEE Press).
- S. Gottwald, (1993) **Fuzzy Sets and Fuzzy Logic: Foundations of applications from a mathematical point of view**, (Berlin: Vieweg).
- M. Hassoun, (1993) **Associative neural memories**, (Oxford: Oxford University Press).
- S. Haykin, (1994) **Neural networks, a comprehensive foundation**, (Los Alamitos: IEEE Press).
- J. Koza, (1992) **Genetic programming: on the programming of computers by means of natural selection**, (Cambridge: MIT Press).
- K. Kinnear, (1994) **Advances in genetic programming**, (Cambridge: MIT Press)
- R. Rojas (1996), **Neural networks: a systematic introduction**, (New York: Springer Verlag) .

3.3.5. CC311: Física Computacional 1

Objetivo:

- Introducir al estudiante un basamento extensivo en las técnicas computacionales modernas que son comúnmente usadas para modelar fenómenos físicos usando el computador como herramienta fundamental. El estudiante **aprenderá haciendo**, por lo que el curso está diseñado en forma tal que el estudiante pase la mayor parte del tiempo programando, calculando y analizando los resultados obtenidos vía el computador.
- Que el estudiante haga uso intensivo de las técnicas y destrezas aprendidas en los cursos de Formación Básica. Se pretende reforzar el aprendizaje de las mismas mediante su aplicación en la elaboración de asignaciones relacionadas con el estudio de fenómenos físicos.

Programa Detallado

1. Métodos Numéricos

- Generalidades.
- Uso del computador como herramienta indispensable para obtener respuestas a problemas físicos-matemáticos en la actualidad.
- Importancia de la precisión numérica.
- Elementos de Unix, lenguajes de programación, compiladores disponibles y su invocación, y utilidad del *Makefile*.
- Introducción de algoritmos numéricos relacionados con Interpolación, integración, diferenciación, álgebra lineal numérica, y ecuaciones diferenciales ordinarias y parciales.
- Introducción al software (de distribución libre; de costo moderado; comerciales especializados) disponible en CeCalCULA para la resolución numérica de problemas físicos-matemáticos en forma eficiente.
- Introducción al álgebra simbólica en el computador: Mathematica y Maple. Su utilidad para obtener ecuaciones algebraicas (por ejemplo cómputo analítico del tensor de Riemann) Su uso en la visualización de datos. Nociones del graficador Gnuplot y mgrace.
- Tópico libre.
- Ejemplos ilustrativos.
- Proyecto.

2. Estudio de Sistemas Dinámicos

- Generalidades.
- Elementos de la Teoría del Caos.
- Sistemas no lineales: el péndulo, movimiento planetas, circuitos eléctricos y crecimiento de poblaciones.
- Elementos de la teoría de Fractales.
- Introducción a fenómenos críticos y a la teoría de renormalización.
- Tópico libre.
- Ejemplos ilustrativos.

- Proyecto.

3. Método de Simulación Monte Carlo

- Generalidades.
- Conceptos de Simulación y Modelaje. Métodos de simulación en el computador.
- Elementos de la teoría de números aleatorios. Generación de números aleatorios en el computador.
- Integración numérica simple y multidimensional.
- Análisis del error en cómputos vía Monte Carlo. Importancia de las técnicas de muestreo. La técnica Bootstrapping.
- Solución de ecuaciones diferenciales.
- Distribución de probabilidades.
- Movimientos aleatorios (1D y 2D), movimiento Browniano, el problema del vendedor, y el algoritmo de Metropolis.
- Tópico libre.
- Ejemplos ilustrativos.
- Proyecto.

4. Simulaciones Monte Carlo en la Física Estadística

- Introducción a la teoría de percolación, el autómata celular y el juego de la vida.
- Descripción y análisis del modelo ferromagnético de Ising (1D y 2D).
- Ecuación y distribución de Boltzman-Maxwell.
- Cómputo de los diferentes promedios de conjuntos de colectivos (microcanónico, canónico, y gran canónico).
- Potenciales termodinámicos.
- Gases ideales y reales.
- Simulación de potenciales tipo Lenard-Jones.
- Tópico libre.
- Ejemplos ilustrativos.
- Proyecto.

Textos Recomendados

- DeVries, P. L. (1994), **A First Course in Computational Physics**, Wiley.
- DeVries, P. L., and Stuewer, R. H. (editor) (1996), **Resource Letter CP-1: Computational Physics**, Am. J. Phys., **64** (4), pg. 364-368.
- Gould, H., Berrisford, J. (Editor), and Tobochnik, J. (1996) **An Introduction to Computer Simulation Methods. Applications to Physical Systems**, second edition, Addison-Wesley Publishing Co..
- Gould, H., Spornick, L., and Tobochnik, J. (1995) **Thermal and Statistical Physics Simulations**, Wiley.

- Gaylord, R.J., and Wellin, P. R. (1994). **Computer Simulations with Mathematica: Explorations in Complex Physical and Biological Systems**. Springer Verlag.
- Hall, N. (editor) (1993) **Exploring Chaos**. W. W. Norton & Company.
- Hermann, D.W. (1990). **Computer Simulation Methods in Theoretical Physics**, second edition. Springer Verlag.
- Hilborn, R. C. (1994) **Chaos and Nonlinear Dynamics** Oxford University Press.
- Kinzel, W., and Reents, G. (1998) **Physics by Computer**. Springer Verlag.
- Lifshitz, E. M. (1977), **L. D. Landau's plain talk to students of physics**, Am. J. Phys., **45** (5), pg. 415-422.
- Newman, M.E.J. and Barkema, G.T. (1999). **Monte Carlo Methods in Statistical Physics**. Clarendon Press.
- Stauffer, D., and Stanley, H.E. (1996) **From Newton to Mandelbrot**. Springer Verlag.
- Stauffer, D. *et al.* (1993) **Computer Simulation and Computer Algebra**, third edition. Springer Verlag.
- Takayasu, H. (1992) **Fractals in the Physical Sciences**. John Wiley & Sons. Inc.
- Tsonis, A. A. (1992) **Chaos: from theory to applications**. Plenum Press.
- Wilson, K. G. (1979), **Problems in Physics with Many Scales of Length**, Scientific American, **241**, pg. 158-179.

3.3.6. CC321: Química Computacional 1

Objetivo: Dotar al estudiante con conceptos, teoría y práctica de los métodos ab-initio de cálculo de estructura electrónica en sistemas moleculares. Igualmente, se introducirán los fundamentos teóricos de los métodos y las herramientas computacionales basadas en la teoría del funcional de la densidad..

Programa Detallado

1. Métodos Ab-Initio

- a) **Introducción a los métodos *ab-initio*:**
 - 1) La Aproximación de Born-Oppenheimer. El principio de exclusión de Pauli. Productos de Hartree. Determinantes de Slater. La aproximación de Hartree-Fock. La forma exacta de la función de onda. Integrales de 1- y 2-electrones.
 - 2) Elementos de matriz entre determinantes de Slater. Significado de las integrales coulómbicas y de intercambio. Introducción a la segunda cuantización. Elementos de matriz en segunda cuantización.
 - 3) Operadores de espín. Funciones de onda adaptadas por el espín.. Determinantes no-restringidos.
- b) **La Aproximación de Hartree-Fock.** Derivación de las ecuaciones canónicas de Hartree-Fock. Interpretación de las ecuaciones de Hartree-Fock: El teorema de Koopman y el teorema de Brillouin. Introducción de la base: Las ecuaciones de Roothan. El método autoconsistente SCF. Análisis de poblaciones. Conjuntos de bases gaussianos. Ecuaciones de Hartree-Fock para capa abierta: Las ecuaciones de Pople-Nesbet.
- c) **Interacción de configuraciones (CI).** La energía de correlación y el método de CI. CI con dobles excitaciones. Orbitales naturales. El método multiconfiguracional MCSCF. El método multiconfiguracional GVB. El problema de la consistencia en tamaño de la función de onda CI.
- d) **Teoría de perturbaciones de Moller-Plesset (MP).** Teoría de perturbaciones de Rayleigh-Schrodinger. Representación diagramática de la teoría de perturbaciones de Rayleigh-Schrodinger. Teoría de perturbación de Moller-Plesset. La energía de correlación en la teoría de perturbaciones. Representación diagramática de la energía de correlación.
- e) **El método de Coupled-Cluster (CC).** La aproximación de CC. La Expansión de CC de la función de onda. El método lineal de CC.

2. Introducción a la Teoría Funcional de la Densidad.

- a) **Teoría de la Matriz Densidad.** Definición de matriz densidad reducida. Valores esperados de operadores. Propiedades de la matriz densidad reducida. El problema de la N-representabilidad. El caso de un determinante de Slater.
- b) **La densidad electrónica.** La interpretación de la densidad electrónica en un sistema molecular. Propiedades de la densidad electrónica. La teoría de “átomos en moléculas” de Bader.
- c) **El funcional de Thomas-Fermi.** Formulación del funcional de Thomas-Fermi para átomos. El modelo de Thomas-Fermi-Dirac-von Weizaker. Desarrollos recientes del modelo de Thomas-Fermi.
- d) **Los fundamentos de la teoría funcional de la densidad.** Los teoremas de Hohenberg-Kohn. El problema de la N- y la v-representabilidad del funcional de la densidad. Las ecuaciones de Kohn-Sham. El funcional de intercambio-correlación. Funcionales aproximados de intercambio-correlación.

3. Herramientas de Química Computacional.

- a) **Selección del método de cálculo.** Inclusión de la correlación electrónica. Métodos basados en la teoría funcional de la densidad. Selección de la base.
- b) **Optimización de geometrías.** Localización del estado de transición en una superficie de energía potencial. Cálculo de la coordenada de reacción (IRC).
- c) **Cálculos de frecuencia.** Predicción del espectro IR y Raman. Caracterización de puntos críticos en las superficie de energía potencial.
- d) **Cálculo de las propiedades topológicas de la densidad electrónica.**
- e) **Estudio de estados excitados. Inclusión del solvente.**

Textos Recomendados

- A. Szabo y N. S. Oslund. (1989) **Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory.** (New York: Dover).
- W. J. Hehre, L. Radom, P. v. R. Schleyer y J. A. Pople (1986). **Ab Initio Molecular Orbital Theory.** (New York: Wiley).
- R. G. Parr y W. Yang. (1989) **Density functional theory of atoms and molecule.** (Oxford : Oxford University Press)
- E. S. Kryachko y E. V. Ludeña. (1990) **Energy density functional theory of many-electron systems.**(Dordrech: Kluber)
- R. F. W. Bader. (1990) **Atoms in Molecule: A quantum theory.** (Oxford : Oxford University Press).

3.3.7. CC331: Matemática Computacional 1

Objetivo: Proveer al estudiante de los principales conceptos e ideas modernas que le permitirán entender, usar y desarrollar algoritmos conducentes a la formulación y solución de problemas de las matemáticas aplicadas a grandes escalas que requieren del computador como herramienta indispensable de cómputo.

Programa Detallado

1. Soluciones de ecuaciones algebraicas no lineales.

- Generalidades.
- Convergencia Y estabilidad.
- Sustituciones sucesivas vs. Newton-Raphson.
- Steepest Descent.
- Método Levenberg-Marquardt.
- Experimentos computacionales.

2. Solución de problemas de valor inicial.

- Generalidades.
- El método implícito vs. el método explícito.
- Método One-step y método Predictor-Corrector.
- Convergencia, estabilidad y extrapolación.
- Problemas con condiciones de borde mixtas.
- El método del disparo vs. métodos de discretización.
- Mallas adaptivas.
- Experimentos computacionales.

3. Solución de problemas con valor en la frontera.

- Generalidades.
- Diferencias finita vs. Elementos finitos.
- Formulación de volúmenes de control.
- Método de residuales pesados.
- Ejemplos: ecuaciones elípticas, parabólicas e hiperbólicas.
- Mallas adaptivas en 2D.
- Experimentos computacionales.

4. problemas parabólicos, elípticos e hiperbólicos.

- Generalidades.
- Problemas parabólicos.
- Problemas alípticos.
- Problemas hiperbólicos.

- CVP, formulación Upstream, and mallas que se mueven.
- Método de líneas.
- Dinámica de problemas bidimensionales.
- Experimentos computacionales.

Textos Recomendados

- Oran, E.S and Boris, J. P. (1987). **Numerical Simulation of Reactive Flow**. Elsevier.
- Finlayson, B.A. (1980). **Nonlinear Analysis in Chemical Engineering**. McGraw-Hill.
- Keller, J.B. and Altman, S. (1969). **Bifurcation Theory and Non-linear Eigenvalue Problems**. W.A. Benjamin, Inc.
- Anderson, D.A. (1984). **Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer** McGraw-Hill.
- Finlayson, B.A. (1972). **The Method of Weighted Residuals and Variational Principles** Academic Press.
- Kubicek, M. and Hlavacek, V. (1983). **Numerical Solution of Non-linear BVP with Applications** Prentice-hall.
- Villadsen, J. and Michelsen, M. L. (1978) **Solution of Differential Equation Models by Polynomial Approximations**. Prentice-hall.
- Kelley, C. T. (1995). **Iterative Methods for Linear and Nonlinear Equations**, SIAM.
- Schnabel, R. B. and Dennis, J. E. (1996). **Numerical Methods for Unconstrained Optimization and Nonlinear Equations**, SIAM.
- William, L. B. *et al* (2000). **A Multigrid Tutorial**. Second Edition, SIAM.
- Rheinboldt, W. (1974). **Methods for Solving Systems of Nonlinear Equations**. SIAM.
- Saad, Y. (1996). **Iterative Methods for Sparse Linear Systems**. PWS Publishing Company.
Note: This book is out of print. It can be downloaded from www-users.cs.umn.edu/~saad/books.html

3.3.8. CC341: Bioinformática 1

Objetivo:

- Introducir al estudiante un basamento extensivo en las técnicas computacionales modernas que son comúnmente usadas para modelar fenómenos biológicos, que incluyen métodos para almacenar, analizar, clasificar y hacer predicciones de datos biológicos tal como secuencias de proteínas y ácidos nucleicos, así como también la gerencia y comparaciones de genomas.
- Familiarizar al estudiante con la aplicabilidad de los métodos de la computación de alto rendimiento para ejecutar cálculos de cómputo intensivo comúnmente requeridos para analizar datos biológicos, como los datos genéticos.

Programa Detallado

1. Internet, Bases de Datos y Python.

- Acceso a Internet. Correo Electrónico. Transferencia de Datos Internet: ¿Qué es y hacia donde va?.
- Bases de Datos en Bioinformática
- Introducción a Python
- Tipos de datos y Manejo de Archivos.
- Ventajas y Desventajas
- Biopython

2. Base de Datos del GenBank (NCBI).

- ¿Qué es la NCBI?
- “Descifrando” el NCBI
- BioSeqs: Búsqueda de Secuencias
- BioSeq-Sets: Colección de Secuencias
- Seq-Annot: Anotación de Secuencias
- Seq-Descr: Descripción de Secuencias

3. Alineación de Secuencias y Búsqueda en Base de Datos.

- Introducción
- Alineación de Secuencias
- Métodos de alineamiento
- Alineación con Penalidades (Gap)
- FASTA
- BLAST

4. Predicción a partir de secuencias de ADN.

- RAIL
- FGENES/FGENEH

- MZEF
- GENSCAN
- PROCUTES

5. Análisis Filogenético.

- ¿Qué es Filogenia?
- Fundamentos esenciales de Filogenia
- Árboles Filogenéticos: ¿Qué son y cómo se interpretan?
- Programas de Filogenia

6. Análisis de Genomas Comparativos.

- Introducción
- Análisis de Genomas Comparativos: ¿Qué son y para que sirven?
- Reconstrucción de Rutas Metabólicas

Bibliografía

- Ascher, D. M. L. (1999). **Learning Python**. O'Reilly & Associate.
- Baxevanis, A. D. & Ouellette, B. F. F. (2001). **Bioinformatics. A practical Guide to the Analysis of Genes and Proteins**. Wiley, John and Sons, Incorporated.
- Gauld, A. (2000). **Learn to Program Using Python**. Addison-Wesley Longman, Incorporated.
- Gibas, C. & Jambeck, P. (2001). **Developing Bioinformatics Computer Skills**. O'Reilly & Associate.
- Webster, D. (2000). **Protein Structure Prediction. Methods & Protocols** Humana Press.
- Brueck, K. T. (2001). **Python 2.1 Bible**. Wiley, John and Sons, Incorporated.