Universidad de los Andes - Métodos Computacionales Avanzados Tarea 1 - MPI 24-02-2017

La solución a este ejercicio debe subirse por SICUA antes de las 6:00PM del viernes 10 de marzo del 2017. Los códigos deben encontrarse en un unico repositorio de github con el nombre Nombre Apellido_Tarea1. Por ejemplo yo debería subir crear un repositorio con el nombre JaimeForero_Tarea1. En el repositorio deben estar los siguientes elementos.

- (60 puntos) Un código fuente en C paralelizado en OPENMP que resuelve las ecuaciones diferenciales y produce datos.
- (20 puntos) Un código en Python que lee los datos producidos por el código en C y produce visualizaciones.
- (20 puntos) Un código en Python que grafica el tiempo en que corre el código como función del numéro de procesadores.
- (10 puntos) Un makefile que: 1) compila el código en C 2) ejecuta el programa con 1, 2 y 4 procesadores y 3) produce graficas en Python.
- (10 puntos) Un archivo de texto (README) con nombres completos y códigos de los integrantes (máximo dos personas).

1. Problema Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou

Considere un sólido unidimensional con N átomos. Vamos a pensar que los átomos están unidos por acoplamientos no lineales de resortes, de tal manera que los desplazamientos con respecto a su posición de equilibrio están descritos por

$$\ddot{x}_n = (x_{n+1} - 2x_n + x_{n-1}) + \beta[(x_{n+1} - x_n)^3 - (x_n - x_{n-1})^3]$$
(1)

Tomando condiciones de contorno fijas $x_0 = x_{N-1} = 0$, modele el comportamiento de este sólido unidimensional un tiempo total de evolución $T = 5,0N^{2,2}$ usando $\beta = 1,0$ y N = 64. La condición inicial debe ser $x_n = \sin(\pi n/(N-1))$. La integración temporal debe hacerse con un método leapfrog y $\Delta t = 5 \times 10^{-3}$.

El código debe producir como resultado un archivo de la energía en los modos k = 1, 2, 3 de toda la cadena para 1000 instantes equiespaciados temporalmente (ver las referencias para tener la expresión explícita de E_k).

Luego un archivo de python debe leer este archivo de salida para producir una gráfica de E_k en función del tiempo para estos primeros tres modos.

Referencias sobre este problema

http://www.scholarpedia.org/article/Fermi-Pasta-Ulam_nonlinear_lattice_oscillationshttp://www.me.umn.edu/~dtraian/FPU.pdf