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 Jaime Forero_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 4, 8 y 16 procesadore 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 $x_n = \sin(2\pi n/(N-1))$. 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 las posiciones de cada uno de los átomos para 1000 instantes equiespaciados temporalmente. Luego un archivo de python debe leer este archivo de salida para producir una gráfica de x en función del tiempo (i.e. una imagen de tamaño $N \times N$).

Referencias sobre este problema

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