

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 `NombreApellido_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 MPI que resuelve las ecuaciones diferenciales y produce datos.
- (10 puntos) Un código en Python que lee los datos producidos por el código en C y produce visualizaciones.
- (10 puntos) Un makefile que compila el código en C y produce visualizaciones en Python.
- (10 puntos) Un script para enviar el código al encolador del cluster con $n = 4$ procesadores.
- (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

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

Tomando condiciones de contorno fijas $x_0 = x_{N-1} = 0$, modele el comportamiento de este sólido unidimensional para $100N$ iteraciones de tiempo usando $\beta = 0,3$ y $N = 1024$. La condición inicial debe ser $x_n = \sin(2\pi n/(N-1))$. La integración temporal debe hacerse con un método leapfrog y $\Delta t = 10^{-3}$.

El código debe producir como resultado un archivo de las posiciones de cada uno de los átomos para N instantes equiespaciados temporalmente en las $100N$ iteraciones totales. 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_oscillations

<http://www.me.umn.edu/~dtraian/FPU.pdf>