Референс-код для Зимней Школы 2016 в Нальчике
Задача предлагается довольно трудная для решения.

1. **Постановка задачи в общем виде**. Рассматривается двухкомпонентная система уравнений типа «реакция-диффузия» (без конвекции). В ОБШЕМ ВИДЕ СИСТЕМА ЗАПИШЕТСЯ КАК

$$\frac{\partial u}{\partial t} = d\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(u,v),$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} = D\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + g(u,v),$$

где коэффициенты диффузии – постоянные (они будут заданы), правые части – функции реакций f и g вместе со входящими в них параметрами тоже будут заданы. Часть параметров для каждого варианта мы «заморозим», а часть будет меняться. Для каждой задачи будет решаться смешанная (начально-краевая) задача со следующими начальными условиями

$$u(x,0) = u_0(x), \quad u(x,0) = u_0(x), \quad x \in [0, A]$$

Длина отрезка, на котором ищется решение, может меняться.
Граничные условия фиксированы:

$$\frac{\partial u(0,t)}{\partial x} = 0, \frac{\partial u(A,t)}{\partial x} = 0, \frac{\partial v(0,t)}{\partial x} = 0, \frac{\partial v(A,t)}{\partial x} = 0.$$

Эти условия означают отсутствие потоков через границы области.
В качестве метода решения возьмем метод, относящийся к семейству методов конечных разностей.
2**. Разностная схема.**
2.1 **Аппроксимация системы уравнений во внутренних точках.** Заменим производные конечными разностями. Используем шаблон неявной схемы. Получим систему разностных уравнений

$$\frac{\hat{u}_m - u_m}{\tau} = d\left(\frac{\hat{u}_{m+1} - 2\hat{u}_m + \hat{u}_{m-1}}{h^2}\right) + f(\hat{u}_m, \hat{v}_m)$$

$$\frac{\hat{v}_m - v_m}{\tau} = D\left(\frac{\hat{v}_{m+1} - 2\hat{v}_m + \hat{v}_{m-1}}{h^2}\right) + g(\hat{u}_m, \hat{v}_m)$$

В выписанных выше равенствах все величины «с крышками» относятся к новому временному слою.
Нетрудно убедиться, что построенная разностная схема имеет второй порядок аппроксимации по пространственной переменной и первый– по времени.

2.2 **Аппроксимация краевых условий.** При реализации схемы необходимо учесть и граничные условия, добиться аппроксимации с тем же порядком по пространству.
Без ограничения общности рассмотрим только граничное условие на левой границе. На правой границе все выкладки и сами результаты будут практически полностью аналогичны. Если использовать одностороннюю разность вида

$$\frac{\hat{u}_1 - \hat{u}_0}{h} = 0$$

То порядок разностной схемы понизится до первого. Если использовать центральную разность со введенной в рассмотрение фиктивной ячейкой, то можно записать

$$\frac{\hat{u}_1 - \hat{u}_{-1}}{2h} = 0$$

Откуда следует $\hat{u}_1 - \hat{u}_{-1} = O(h^2)$ .. Тогда с учетом этого в граничных узлах сетки получаем схему

$$\frac{\hat{u}_0 - u_0}{\tau} = d\left(\frac{\hat{u}_1 - \hat{u}_0}{h^2}\right) + f(\hat{u}_0, \hat{v}_0),$$

$$\frac{\hat{v}_0 - v_0}{\tau} = D\left(\frac{\hat{v}_1 - \hat{v}_0}{h^2}\right) + g(\hat{u}_0, \hat{v}_0).$$

У нас возникает связь меду двумя точками на верхнем временном слое.
Точно такие же (с точностью до индексов) разностные уравнения получаются и на правой границе отрезка.
2.3. **Итерации по нелинейности.** На верхнем временном слое мы имеем систему нелинейных уравнений относительно сеточных неизвестных. Для ее решения используем метод Ньютона.

Будем вводить новые итерации по нелинейности. Предположим, что величины $\overset{k+1}{\hat{u}}_m$ и $\overset{k}{\hat{u}}_m$ связаны по формуле $\overset{k+1}{\hat{u}}_m = \overset{k}{\hat{u}}_m + \delta \overset{k+1}{\hat{u}}_m$. Считаем значения на предыдущей итерации известными. Для нулевой итерации берется значение с нижнего временного слоя. Тогда для приращений получим систему уравнений вида

$$\frac{\overset{k}{\hat{u}}_m + \delta \overset{k+1}{\hat{u}}_m - u_m}{\tau} = d\,\frac{\overset{k}{\hat{u}}_{m+1} + \delta \overset{k+1}{\hat{u}}_{m+1} - 2(\overset{k}{\hat{u}}_m + \delta \overset{k+1}{\hat{u}}_m) + \overset{k}{\hat{u}}_{m-1} + \delta \overset{k+1}{\hat{u}}_{m-1}}{h^2} + f(\overset{k}{\hat{u}}_m, \overset{k}{\hat{v}}_m) + \frac{\partial f}{\partial u}(\overset{k}{\hat{u}}_{m-1}, \overset{k}{\hat{v}}_{m-1})\delta \overset{k+1}{\hat{u}}_{m-1} + \frac{\partial f}{\partial v}(\overset{k}{\hat{u}}_m, \overset{k}{\hat{v}}_m)\delta \overset{k+1}{\hat{v}}_m,$$

$$\frac{\hat{v}_m - v_m + \delta\hat{v}_m}{\tau} = D\,\frac{\hat{v}_{m+1} + \delta\hat{v}_{m+1} - 2(\hat{v}_m + \delta\hat{v}_m) + \hat{v}_{m-1} + \delta\hat{v}_{m-1}}{h^2} + g(\overset{k}{\hat{u}}_m, \overset{k}{\hat{v}}_m) + \frac{\partial g}{\partial u}(\overset{k}{\hat{u}}_m, \overset{k}{\hat{v}}_m)\delta \overset{k+1}{\hat{u}}_{m1} + \frac{\partial g}{\partial v}(\overset{k}{\hat{u}}_m, \overset{k}{\hat{v}}_m)\delta \overset{k+1}{\hat{v}}_m,$$

В результате получается система линейных алгебраических уравнений для определения приращения на очередной итерации по Ньютону.
2.4 **Решение систем линейных алгебраических уравнений с матрицей специального вида. Матричная прогонка.**
Полученная система линейных уравнений на приращения в ходе ньютоновских итераций может записана в следующем виде

$$\mathbf{A}_m \mathbf{U}_{m-1} + \mathbf{B}_m \mathbf{U}_m + \mathbf{C}_m \mathbf{U}_{m+1} = \mathbf{F}_m$$

Где

$$\mathbf{U}_m = \begin{pmatrix} \delta \overset{k+1}{\hat{u}}_m \\ \delta \overset{k+1}{\hat{v}}_m \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{A}_m = \begin{pmatrix} -\dfrac{\tau d}{h^2} & 0 \\ 0 & -\dfrac{\tau D}{h^2} \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{B}_m = \begin{pmatrix} 1 + 2\dfrac{\tau d}{h^2} - \tau \dfrac{\partial f}{\partial u}(\overset{k}{\hat{u}}_m, \overset{k}{\hat{v}}_m) & -\tau \dfrac{\partial f}{\partial v}(\overset{k}{\hat{u}}_m, \overset{k}{\hat{v}}_m) \\ -\tau \dfrac{\partial g}{\partial u}(\overset{k}{\hat{u}}_m, \overset{k}{\hat{v}}_m) & 1 + 2\dfrac{\tau D}{h^2} - \tau(\overset{k}{\hat{u}}_m, \overset{k}{\hat{v}}_m) \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{C}_m = \begin{pmatrix} -\dfrac{\tau d}{h^2} & 0 \\ 0 & -\dfrac{\tau D}{h^2} \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{F}_m = \begin{pmatrix} \tilde{f}_u \\ \tilde{f}_v \end{pmatrix}$$

Где

$$\tilde{f}_u = -(\overset{k}{\hat{u}}_m - u_m) +$$

$$+ d\tau \frac{\overset{k}{\hat{u}}_{m+1} - 2\overset{k}{\hat{u}}_m + \overset{k}{\hat{u}}_{m-1}}{h^2} + \tau f(\overset{k}{\hat{u}}_m, \overset{k}{\hat{v}}_m),$$

$$\tilde{f}_v = -(\hat{v}_{m-1}{}^k - v_{m-1}) + D\tau \frac{\hat{v}_{m+1}{}^k - 2\hat{v}_m{}^k + \hat{v}_{m-1}{}^k}{h^2} + \tau g(\overset{k}{\hat{u}}_m, \overset{k}{\hat{v}}_m)$$

При этом аналогичные, но чуть отличные выражения получаются для матричных коэффициентов в окрестности границы.

Данная система решается методом матричной прогонки. Запишем прогоночное соотношение в виде

$$\mathbf{U}_m = \mathbf{P}_m \mathbf{U}_{m+1} + \mathbf{Q}_m$$

Из левого граничного условия имеем

$$\mathbf{B}_0 \mathbf{U}_0 + \mathbf{C}_0 \mathbf{U}_1 = \mathbf{F}_0,$$

Откуда сразу следет

$$\mathbf{P}_0 = -\mathbf{B}_0^{-1} \mathbf{C}_0, \ \mathbf{Q}_0 = \mathbf{B}_0^{-1} \mathbf{F}_0$$

Матрица размером 2 на 2. естественно, легко обращается.

Рассматривая уравнения системы, получим

$$\mathbf{A}_m \mathbf{U}_{m-1} + \mathbf{B}_m \mathbf{U}_m + \mathbf{C}_m \mathbf{U}_{m+1} = \mathbf{F}_m$$

$$\mathbf{A}_m (\mathbf{P}_{m-1} \mathbf{U}_m + \mathbf{Q}_{m-1}) + \mathbf{B}_m \mathbf{U}_m + \mathbf{C}_m \mathbf{U}_{m+1} = \mathbf{F}_m$$

$$(\mathbf{A}_m \mathbf{P}_{m-1} + \mathbf{B}_m) \mathbf{U}_m + \mathbf{C}_m \mathbf{U}_{m+1} = \mathbf{F}_m - \mathbf{A}_m \mathbf{Q}_{m-1},$$

Откуда получаем рекуррентные соотношения

$$\mathbf{P}_m = -(\mathbf{A}_m \mathbf{P}_{m-1} + \mathbf{B}_m)^{-1} \mathbf{C}_m, \ \mathbf{Q}_m = (\mathbf{A}_m \mathbf{P}_{m-1} + \mathbf{B}_m)^{-1} (\mathbf{F}_m - \mathbf{A}_m \mathbf{Q}_{m-1})$$

Проводя прямой ход прогонки, для последнего уравнения системы имеем

$$\mathbf{U}_M = \mathbf{Q}_M.$$

Затем с помощью прогоночного соотношения $\mathbf{U}_m = \mathbf{P}_m \mathbf{U}_{m+1} + \mathbf{Q}_m$ восстанавливаем все остальные приращения.

2.5 Значения параметров и вид функций для описания реакций в конкретных задачах.

Для исследования предлагается математическая модель популяционной динамики с функциями

$$f(u,v) = \varepsilon_1 u(1-u) - \frac{u^2 v}{1+\beta u},$$

$$g(u,v) = -\varepsilon_2 v + \frac{ku^2 v}{1+\beta u},$$

Значения параметров математической модели следующие.
d = 1, D << d,

3. Требования к написанию программы
Программа написана на языке С. В программе реализовано вычисление функций правой части и соответствующие им функции вычисления частных производных. Главный модуль осуществляет послойный переход и итерации по нелинейности. Из этого модуля вызывается функция матричной прогонки. Отдельные функции – вычисление матричных коэффициентов для системы линейных уравнений.
4. Требования к модификации слушателями референс-кода
Слушателям Школы предлагается заменить этап матричной прогонки реализацией матричного варианта редукционного алгоритма решения задачи. Опишем редукционный алгоритм в скалярном варианте.

Продолжим анализ алгоритмов для решения краевой задачи для обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка

$$y'' + \varphi(x)y' + \psi(x)y = f(x)$$

с условиями первого рода $y(0) = \xi,\ y(X) = \eta.$

Одним из самых распространенных методов решения данной краевой задачи является следующий вариант метода конечных разностей. На отрезке $[0, X]$ вводим равномерную сетку с шагом *h*. Пронумеруем введенные узлы целыми числами от 0 до N, при этом $x_j = jh, h = X/J$. Для всех внутренних точек сетки заменим производные разностными отношениями. Получим разностное уравнение

$$\frac{y_{j+1} - 2y_j + y_{j-1}}{h^2} + \varphi_j \frac{y_{j+1} - y_{j-1}}{2h} + \psi_j y_j = f_j$$

с граничными условиями

$$y_0 = \xi,\ y_J = \eta.$$

Эта система во всех внутренних узлах сетки может быть записана в виде

$$a_j y_{j-1} + b_j y_{j+1} + c_j y_{j+1} = g_j,$$

где $a_j = 1 - 0,5h\varphi_j,\quad b_j = -2 + h^2\psi_j,\quad c_j = 1 + 0,5h\varphi_j.$

Мы пришли к необходимости для получения приближенного решения краевой задачи на введенной сетке решать систему линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) специального вида с трехдиагональной матрицей. Для решения таких систем на компьютерах с последовательной архитектурой разработан специальный экономичный алгоритм – метод прогонки. Напомним условия устойчивости прогонки – матрица системы должна иметь диагональное преобладание $|b_j| \ge |a_j| + |c_j|.$ Если выполняется строгое неравенство, то говорят о строгом диагональном преобладании. Для рассматриваемой дискретной краевой задачи условие диагонального преобладания выполнены в случае если все $\psi_j < 0$. Кроме того, потребуем, что бы во всех узлах сетки выполнялось бы $a_j c_j > 0,$ что выполняется в случае достаточно маленьких шагов (это – ограничение на сеточный шаг сверху, величина этого шага зависит от свойств дифференциальной задачи). Каждый из сомножителей при этом будет положительным.

Анализ графа алгоритма прогонки показывает, что он не может быть эффективно распараллелен.

Опишем теперь другой алгоритм решения систем уравнений с трехдиагональной матрицей. Рассмотрим три последовательных уравнения системы

$$a_{j-1}y_{j-2} + b_{j-1}y_{j-1} + c_{j-1}y_j = g_{j-1},$$

$$a_j y_{j-1} + b_j y_{j+1} + c_j y_{j+1} = g_j$$

$$a_{j+1}y_j + b_{j+1}y_{j+1} + c_{j+1}y_{j+2} = g_{j+1}$$

Как известно, система линейных уравнений сохраняет равносильность, если одно уравнение системы заменить линейной комбинацией данного уравнения и других уравнений системы. Умножим первое из этой тройки уравнений на $-\frac{a_j}{b_{j-1}},$ а третье — на $-\frac{c_j}{b_{j+1}},$ после чего сложим со вторым. Вместо второго уравнения из приведенной выше тройки мы получим

$$-\frac{a_j a_{j-1}}{b_{j-1}}y_{j-2} + \left(b_j - \frac{a_j c_{j-1}}{b_{j-1}} - \frac{c_j a_{j+1}}{b_{j+1}}\right)y_j - \frac{c_j c_{j+1}}{b_{j+1}}y_{j+2} = g_j - \frac{a_j}{b_{j-1}}g_{j-1} - \frac{c_j}{b_{j+1}}g_{j+1}$$

Это уравнение снова имеет подобную структуру, но связывает только значения y_{j-2}, y_j, y_{j+2}.

Подобный алгоритм можно обобщить и на случай более сложных систем уравнений, решаемых с помощью матричной прогонки.

5. Сроки выполнения работ. Критерии успеха

Прилагаются исходные тексты программ. Описание и характеристики ускорения. Работа считается выполненой успешно при реализации на 1-16 исполнителях с достигнутым ускорением по сравнению со случаем 1 исполнителя.