



Matematický ústav  
AV ČR, v.v.i.

PANM 15

PROGRAMY A ALGORITMY  
NUMERICKÉ MATEMATIKY 15

6.–11. června 2010, Dolní Maxov

<http://www.math.cas.cz/panm>

panm@math.cas.cz



Výzkumné centrum:  
Pokročilé sanační  
technologie a procesy

# ABSTRAKTY

## Vectorization of bitmaps based on the LSQ method

Stanislav Bartoň

**Abstract:** The paper presents the software procedure (using MAPLE 11) intended for considerable reduction of digital image data set to more easily treatable extent. The photos taken in high resolution (and corresponding data sets) contain coordinates of thousands of pixels, polygons, vertexes. Presented approach substitutes this polygon by the new one, where smaller number of vertexes is used. The task is solved by use of adapted least squares method. The presented algorithm enables reduction of number of vertexes to 10% of its original extent with acceptable accuracy +/- one pixel (distance between initial and final polygon). The procedure can be used for processing of similar types of 2D images and acceleration of following computations.

## Subspace approximated matrices in numerical linear algebra

Jan Brandts, Ricardo da Silva

**Abstract:** For  $n \times n$  matrices  $A$  and  $A_0$  and a sequence of subspaces  $\{0\} = \mathcal{V}_0 \subset \dots \mathcal{V}_n = \mathbb{R}^n$  with  $\dim(\mathcal{V}_k) = k$ , the  $k$ -th subspace approximated matrix  $A_k$  is defined as

$$A_k = A + \Pi_k(A_0 - A)\Pi_k,$$

where  $\Pi_k$  is the orthogonal projection on  $\mathcal{V}_k^\perp$ . As a consequence, both  $A_k v = Av$  and  $v^* A_k = v^* A$  for all  $v \in \mathcal{V}_k$ , and thus  $A_k$  gradually changes from  $A_0$  into  $A$ . Moreover, in practice,  $\mathcal{V}_{k+1}$  may depend on  $A_k$ , in order to enforce  $A_{k+1}$  to be closer to  $A$  in some sense. By choosing  $A_0$  as a simple approximation of  $A$ , this turns the subspace approximated matrices into interesting preconditioners for linear algebra problems involving  $A$ .

In this presentation we will discuss the use of subspace approximated matrices in eigen value computations, and in solving linear systems of equations.

## Mixed-hybrid discretization of water flow using DEAL II library

Jan Březina

**Abstract:** We shall present a solver for non-linear Richards equation based on mixed-hybrid formulation implemented with help of DEAL II library. Great adaptivity capabilities of this library are used to track the wetting front. We will also analyze strengths and weaknesses of the used library.

## Poznámky k různým volbám průměrování v metodě BDDC

Marta Čertíková, Pavel Burda, Jaroslav Novotný, Jakub Šístek

**Abstrakt:** Metoda BDDC společně s metodou FETI-DP patří k moderním metodám rozkladu oblasti (domain decomposition). Na rychlosť konvergencie obou týchto metod má značný vliv volba operátora průměrování (averaging). Ve svom pribľzvku analyzujeme jeden ze standardných používaných prístupov a navrhujeme alternatívnu založenou na podobnom základe, ktorá sa však snáze spočítá.

# Interaction of compressible flow with an airfoil

Jan Česenek, Miloslav Feistauer

**Abstract:** In this paper we deal with numerical simulation of the interaction of two-dimensional compressible viscous flow and a vibrating airfoil. The motion of the airfoil, which can rotate around the elastic axis and oscillate in the vertical direction, is described with the aid of a system of ordinary differential equations. The mathematical model of flow is represented by the system of non-stationary compressible Navier-Stokes equations. We use the ALE method for the treatment of a time dependent computational domain. The Navier-Stokes system is written in the ALE form and discretized by the discontinuous Galerkin finite element method in space and by the Euler backward formula in time. The structural ODE system is solved by the Runge-Kutta method. In order to demonstrate the applicability of the developed method, we shall present the results of the simulation of flow induced vibrations of the NACA 0012 profile.

# Aproximace parciálních derivací ve vrcholech simpliciálních triangulací

Josef Dalík

**Abstrakt:** Předpokládejme, že  $T_h$  je konformní regulární triangulace bez tupých úhlů ohraničené polygonální oblasti  $\Omega$ ,  $z = x$  nebo  $z = y$ , a je vnitřní případně tzv. polo-vnitřní vrchol triangulace  $T_h$  a  $T_1 = \overline{ab^1b^2}, \dots, T_n = \overline{ab^nb^1}$  jsou stejně orientované trojúhelníky z  $T_h$ . V příspěvku budou odvozeny dvě varianty metody pro řešení úlohy najít koeficienty  $f_1, \dots, f_n$  tak, aby lineární kombinace  $f_1\partial\Pi_h(u)|_{T_1}/\partial z + \dots + f_n\partial\Pi_h(u)|_{T_n}$  konstantních parciálních derivací hodnoty  $\Pi_h(u)$  operátora interpolace spojitých funkcí do prostoru lineárních Lagrangeových konečných prvků příslušného triangulaci  $T_h$  approximovala hodnotu  $\partial u/\partial z(a)$  s chybou  $O(h^2)$ . Odvozená metoda bude zobecněna pro approximaci parciálních derivací funkcí dvou nebo tří proměnných libovolně vysokých řádů pomocí jejich interpolantů v prostorech polynomiálních Lagrangeových konečných prvků odpovídajícího stupně. Budou stručně popsány jiné známé metody lokální approximace hodnot parciálních derivací hladkých funkcí a bude provedeno numerické porovnání kvality (přesnosti případně stability) uvedených metod s kvalitou odvozené metody. V závěru budou zmíněny některé aplikace odvozené metody s důrazem na aktuální možnost jejího využití při konstrukci aposteriorních odhadů chyb numerických řešení diferenciálních okrajových úloh.

## High resolution schemes for open channel flow

Jiří Egermaier, Marek Brandner, Hana Kopincová

**Abstract:** One of the commonly used model for river flow modelling is based on the Saint-Venant equations - system of hyperbolic equations with spatially varying flux function and the source terms. We introduce conservative finite volume methods that solve this type of balanced laws efficiently and at the same time satisfy some important properties. The properties like consistency, stability and convergence are necessary for the mathematically correct solution. But the schemes should be also positive semidefinite and preserve steady states to obtain more physically relevant solution of the flow problems. These schemes can be also modified to the high order or for solving flow problems with friction source terms.

## Usage of modular scissors in the implementation of FEM

Dalibor Frydrych

**Abstract:** Finite Element Method (FEM) is often perceived as one unique and compact programming subject. Despite the fact that Many FEM implementations mention the object oriented approach (OOA), this approach is in reality used completely only in minority of cases. For example the Interface-Based Polymorphism is used only rarely.

This article is focused on Design Reuse and it is an complex view on FEM. Article defines Basic principles of OOA and their use in FEM implementation. FEM project is split in many smaller sub-projects which are interlinked together. Links between sub-projects are one way only and non circular. Such a setting gives opportunity to use modular scissors. In addition, these individual sub-projects can be used directly, without additional adjustments, in other different projects.

## Efektivní numerické metody pro výpočet toku neutronů v jaderném reaktoru

Milan Hanuš

**Abstrakt:** Základním nástrojem pro počítačovou analýzu jaderných reaktorů jsou numerické metody založené na mnohagrupové difúzní approximaci transportu neutronů. Pro svoji efektivitu je v současné době oblíbená tzv. nodální metoda, která i při výpočtu na hrubé diskretizační sítě poskytuje řešení s přesností, jež je obvykle srovnatelná s metodami používajícími mnohem jemnější síť. Nižší výpočetní nároky jsou však vyváženy obtížným použitím metody pro výpočet heterogenních aktivních zón. Alternativní metodou, poskytující větší volnost ve specifikaci tvaru i složení reaktoru, je metoda konečných prvků (FEM). Zejména ve spojení s moderními adaptivními algoritmy představuje pro nodální metodu vážného konkurenta i z hlediska efektivity výpočtu. V příspěvku bude představen výpočetní kód, využívající hp-adaptivní algoritmy z FEM balíku Hermes, a na typických úlohách reaktorové analýzy bude porovnán s nodálním kódem.

## On the worst scenario method: Application to uncertain nonlinear differential equations with numerical examples

Petr Harasim

**Abstract:** The worst scenario problem is characterized by a state equation dependent on an input parameter belonging to an admissible set. Consequently, the solution of state equation depends on the input parameter. Furthermore, the state solution is evaluated by a criterion functional. The goal is to find a maximum of the criterion functional over admissible set.

The general abstract framework of the worst scenario method is applied to problems described by nonlinear differential equations with uncertain coefficients. Nevertheless, the numerical aspects will be emphasized. Some illustrative numerical examples concerning a one-dimensional problem will be presented.

## **Presentation of current state and progress in development of multidimensional fluid flow and solute transport simulation code**

Milan Hokr

**Abstract:** The talk is planned to be composed of two parts: the first one corresponding to the given title is rather informative, intended to introduction of the numerical simulation code FLOW123D developed at Technical University of Liberec as part of the Advanced Remedial Technologies and Processes (ARTEC) project (research centre), will also serve as introduction for the talks of the next speakers. The second part will be a more compact talk dealing with particular problem of comparison of FLOW123D with commercial code NAPSAC on a problem with specific input data. This is the material considered for the conference proceedings paper.

We present the concept of modelling fluid flow and solute transport in fractured rock as combination of discrete fracture network and equivalent continuum. The possible situations how to represent the physics and how to organize the discrete unknowns of the mixed-hybrid finite element method in case of 1D-2D-3D combination will be discussed. Features of the implementation and user interface will be presented (reference to the talk of Jan Brezina).

Two projects of code verification, in particular comparison with other codes for the same equation and data but different numerical scheme, will be presented. Then examples of solved field-scale problems, with real data from geological exploration, will be shown. Also we mention possibilities of own in-situ measurements in the near future for model verification and improvements.

In the second part presented in more details, we compare NAPSAC and FLOW123D. The benchmark problem consists of system of 1D fractures in 2D plane with conductivities varying over several orders of magnitude. Together with presence of very small segments between fracture intersections it leads to numerically unstable problem. The main result of the comparison of codes and methods is the relative error of mass balance which is about  $10^{-1}$  for NAPSAC and  $10^{-5}$  for FLOW123D which confirms the expected property of the mixed-hybrid method.

## **Consistent nonlocal tangent operator for damage-plasticity model**

**Martin Horák, Mathieu Charlebois, Milan Jirásek, Philippe Zysset**

**Abstract:** Realistic description of the mechanical behavior of quasibrittle materials requires constitutive laws with softening. However, standard models cannot be used after loss of ellipticity, which leads to an ill-posed mathematical problem. From the numerical point of view, ill-posedness is manifested by pathological sensitivity of the results to the size of finite elements. One of possible remedies is regularization by a nonlocal formulation based on a spatial averaging procedure. In this contribution, a model combining anisotropic elasticity and anisotropic plasticity with isotropic damage is presented and regularized by the over-nonlocal formulation. Computational advantages of this approach are discussed and a fully consistent nonlocal tangent operator, which is needed to achieve quadratic rate of convergence of the Newton-Raphson method, is derived

## **A shock-capturing discontinuous Galerkin method for the numerical solution of inviscid compressible flow**

Jiří Hozman

**Abstract:** The numerical solution of the compressible Euler equations obtained by discontinuous Galerkin method suffers from the Gibbs-type oscillations in the vicinage of discontinuities. These non-physical overshoots and undershoots of the discrete solution corrupt the solution and have to be suppressed. In order to avoid this phenomenon the shock-capturing approach is proposed. The main idea is based on adding the artificial diffusion term to the original system in the form which corresponds to the viscous part of the compressible Navier-Stokes equations but with the variable viscosity. This viscosity is proportional to the entropy residual of the system and thus the accuracy of the method is preserved. Numerical experiments reflecting the potency of this approach are presented.

## Elements of uncertainty modeling

Jan Chleboun

**Abstract:** Thanks to progress in solving (at least numerically) many practice-driven problems, a new stage of modeling can be approached – uncertainty modeling. Although considering some amount of uncertainty in model inputs is not a new idea and some sort of uncertainty analysis has been an established part of engineering designs or financial modeling, for instance, a rigorous uncertainty analysis coupled with demanding state problems is a rather new and momentum gaining field of research. Approaches to uncertainty modeling span from stochastic methods based on input data weighted by its probability to deterministic methods where nonstochastic or even no weights of inputs are considered. In the lecture, different approaches to uncertainty analysis and uncertainty propagation modeling will be presented. Particular attention will be paid to differential equations depending on uncertain functions.

## A nonlinear system of differential equations with distributed delays

Pavol Chocholatý

**Abstract:** It is well-known that the environments of most natural populations change with time and that such changes induce variation in the growth characteristics of population which is often modelled by delay differential equations, usually with time-varying delay. The purpose of this article is to derive a numerical solution of the delay differential system with continuously distributed delays based on  $k$ -step methods ( $k = 1, 2, 3, 4$ ) and quadrature formulas. Some numerical results are presented compared to the known ones.

## Numerické modelování newtonských a ne-newtonských tekutin ve větveném kanále metodou konečných objemů

Radka Keslerová

**Abstrakt:** Práce se zabývá numerickým řešením Navier-Stokesových rovnic pro newtonskou a ne-newtonskou tekutinu ve větveném kanále pro 2D a 3D proudění. Metoda konečných objemů je použita pro prostorovou diskretizaci a Runge-Kuttova vícestupňová metoda je použita pro časovou diskretizaci. V práci jsou uvedeny numerické výsledky pro 2D a 3D stacionární a 2D nestacionární proudění. Pro nestacionární proudění je užitá metoda duálního času.

## Analýza necitlivosti markovských řetězců

Martin Kocurek

**Abstrakt:** Citlivostní analýza nerozložitelných markovských řetězců se zabývá vztahem mezi původním řetězcem s maticí pravděpodobností přechodu  $P$  a pozměněným řetězcem s maticí  $\tilde{P}$ . Pro jejich vektory stacionárních pravděpodobností  $\pi$ , respektive  $\tilde{\pi}$ , se obvykle zkoumají velikosti  $\|\pi - \tilde{\pi}\|_p$  pro asymptotickou stabilitu,  $|\pi_i - \tilde{\pi}_i|$ ,  $|\pi_i - \tilde{\pi}_i|/\pi_i$  pro stabilitu nebo citlivost po složkách. Pokud pravděpodobnosti přechodu závisejí na proměnné  $t$ , pak  $P = P(t)$  a stacionární vektor  $\pi(t)$  a citlivost vzhledem k parametru  $t$  se zkoumá pomocí derivace vektoru  $\pi$  v nějaké normě.

Ve speciálních případech některé změny v pravděpodobnostech neovlivní stacionární pravděpodobnosti některých stavů. Článek popisuje některé z těchto řetězců pomocí pojmu teorie markovských řetězců.

## Určení Youngova modulu $E$ a Poissonova čísla $\nu$ geokompozitu pomocí matematického modelování

Roman Kohut

**Abstrakt:** Geokompozit je materiál složený z různých materiálů. Použitím počítačové tomografie můžeme postupně určit rozložení materiálu v jednotlivých vrstvách. Cílem je nahradit geokompozit homogenním izotropním lineárně pružným materiálem a určit odpovídající pružnostní konstanty. Problém je řešen metodou konečných prvků.

## Úvod do algoritmů pro molekulové simulace

Martin Kramář

**Abstrakt:** Algoritmy pro modelování molekulárních systémů mohou najít uplatnění v řadě aplikací. Ať už jde o úlohy v medicíně, kde můžeme například modelovat kontakt léčiv s okolím a jeho reakce, nebo aplikace v průmyslu, kde můžeme například modelovat stavbu slitin a zkoumat její vlastnosti nebo se zabývat šířením trhlin v různých materiálech. V prezentaci ukážeme jednoduchý algoritmus částicové modelu, simulaci kolize dvou těles a jednoduché analytické modely kvantové statistiky.

## Parallel SVD computation and information retrieval applications

Petr Kotas

**Abstract:** In this work an algorithm for the sparse SVD problem is presented and it's implementation to distributed computer system is shown. The implementation is optimized for latent semantic indexing (LSI) so that only a few largest singular numbers and associated singular vectors are computed. Algorithm presented here is based on the Lancosz method and it's modified for fast convergence with sufficient accuracy. We will present examples of multimedia information retrieval applications (LSI).

## A new reconstruction-enhanced discontinuous Galerkin method for time-dependent PDEs

Václav Kučera

**Abstract:** In this work a new numerical method for time-dependent PDEs is introduced, numerically tested and the first steps toward an error analysis are undertaken. In the finite volume method, which uses piecewise constant approximate solutions, higher order approximations are obtained by a reconstruction procedure. This constructs a higher order piecewise polynomial solution from the piecewise constant data on appropriate neighborhoods (so-called stencils) of individual elements. The disadvantage of this procedure is that for higher orders, the reconstruction stencil for each element is prohibitively large and the method is very memory and time consuming. On the other hand, the discontinuous Galerkin (DG) method handles piecewise polynomials of arbitrary order in a natural way. We propose to incorporate a similar reconstruction procedure into DG schemes. This allows us to substantially increase the accuracy of the underlying scheme, while only a minimal reconstruction stencil is used. For example, a DG solution of order  $N$  on simplicial meshes allows us to reconstruct a solution of order  $2N + 1$  in 2D and  $3N + 2$  in 1D, using only the von Neumann neighborhood of each element as a stencil. The accuracy and effectiveness of the new method is demonstrated on a convection-diffusion problem. Approximation properties of the reconstruction operator and the relation to standard DG schemes are analyzed.

## Integration in higher-order finite element method in 3D

Pavel Kůš

**Abstract:** In the finite element method, numerical integration is a substantial part of the computing process. In most cases, the integration is simple and fast and there is no need to optimize it. This changes, however, when we are using polynomials of higher order as basis functions for 3D problems. In such case, the standard approach may lead to use of quadrature rules with hundreds of points to evaluate integrals needed to assemble the stiffness matrix. The CPU time needed for this part of the calculation than can be comparable to the time needed to solve the resulting linear system. Therefore it is reasonable to optimize not only the solve time, which most people do, but also the assembly time. In this contribution we want to show several approaches towards this optimizations, compare their performance and discuss the difficulties arising in their usage in the computer code.

## Nestlačitelné ne-newtonovské tekutiny: Modelování, matematická konzistence, aplikace.

Martin Lanzendörfer

**Abstrakt:** Pokusíme se shrnout některé poznatky a otevřené otázky o nestlačitelných tekutinách, jejichž viskozita se mění např. s rychlosťí smyku a s tlakem. Zmíníme jejich popis, otázky existence a jednoznačnosti příslušných rovnic, potíže s jejich numerickým řešením, aplikace poptávané v praxi (v teorii mazání). Někdy půjde o subjektivní výběr dílčích témat, který se ale dotkne řady otevřených otázek.

## New robust preconditioners for the matrix free truncated Newton method

Ladislav Lukšan, Ctirad Matonoha, Jan Vlček

**Abstract:** New positive definite preconditioners for the matrix free truncated Newton method are given. Corresponding algorithms are described in detail. Results of numerical experiments that confirm the efficiency and robustness of the preconditioned truncated Newton method are reported.

## Analysis of geosynthetic tubes filled with several liquids with different densities

Josef Malík

**Abstract:** A two dimensional model of geosynthetic tubes sitting on a rigid horizontal foundation and filled with several separated liquids with different densities is proposed. The material from which tubes are made is a special synthetic fabric which is inextensible, perfectly flexible, and leakproof. Basic equations describing the equilibrium of tube are formulated. A numerical procedure for solving the equations is proposed and implemented in the code MATLAB. Some model problems for geosynthetic tubes filled with two, three, and four liquids with different densities are solved. Such values like the pressure on the top and bottom of the tube, the tension in the geosynthetic fabric, the length of the contact zone between the tube and rigid foundation are studied.

## Matematické problémy kolem internetového vyhledávače Google

Ivo Marek

**Abstrakt:** Ukazuje se, že úspěšnost internetového vyhledávače Google je způsobena tím, že činnost tohoto webovského nástroje k vyhledávání informací je založena na exaktních matematických modelech a matematických, zejména pak numerických metodách. Přednáška bude věnována popisu některých zajímavých matematicko-informatických problémů a jejich „Googleovským“ řešením

## AMPL - A modeling language for mathematical programming

Ctirad Matonoha

**Abstract:** AMPL is a language for large-scale optimization and mathematical programming problems arising in many applications. Based on familiar algebraic notation, AMPL makes it easy to create models, use a wide variety of solvers, and examine solutions. We will present its features and include some exercises. In order to use test problems as tools suitable for testing optimization methods in the UFO system, we will focus our attention to translate test problems into well-defined Fortran 77 files.

## Realizace Dirichletovy podmínky v RKPM

Vratislava Mošová

**Abstrakt:** Reproducing kernel particle method (RKPM) patří mezi nesítové metody. Vedle předností, které tyto metody vykazují (na počátku výpočtu není třeba konstruovat síť, vysoká rychlosť konvergence), má RKPM také určité problematické stránky. Jednou z nich je skutečnost, že tvarové funkce, pomocí kterých se generuje approximace řešení úlohy, nemusejí v některých uzlových bodech splňovat podmínku. To vede k problémům s realizací Dirichletovy podmínky při řešení okrajových úloh. V tomto příspěvku se budeme zabývat, jak lze tuto nepříjemnost odstranit.

## Lokální approximace funkce dvou proměnných

Oto Přibyl

**Abstrakt:** V příspěvku jsou zkoumány approximace funkcí dvou proměnných vyššího řádu přesnosti a možné způsoby, jak tyto výsledky aplikovat pro řešení problémů z oblasti numerického řešení okrajových úloh pro PDR s postprocesingem.

## Diskrétní model druhého řádu pro modelování dopravy v městské dopravní síti

Jan Přikryl, Václav Šmíd

**Abstrakt:** S rostoucí intenzitou silniční dopravy se stále silněji ukazuje potřeba modelovat co nejvěrněji chování dopravního proudu vozidel jednak v dálničním (lehčí varianta) a jednak v městském provozu (složitější varianta). V našem příspěvku ukážeme základní varianty modelů dopravního proudu prvního a druhého řádu a na zvoleném příkladě modelu druhého řádu ukážeme, jak je tento model po diskretizaci schopen modelovat chování automobilové dopravy v městské dopravní síti.

## Stručný úvod do problematiky algoritmu metody více pólů

Petr Příkryl

**Abstrakt:** Hned na začátku roku 2000 uveřejnili Jack Dongarra a Francis Sullivan v časopise *Computing in Science and Engineering* svůj seznam deseti nejvýznamnějších algoritmů minulého století. V květnu téhož roku pak v časopise *SIAM News* vyšel článek „The Best of the 20th Century: Editors Name Top 10 Algorithms“. Výběr algoritmů v obou článcích se přirozeně do značné míry překrývá, pro nás je zajímavé, že v obou vystupuje algoritmus metody více pólů (FMM, Fast Multipole Method), který je, zdá se, v české matematické veřejnosti méně znám. Zdá se proto užitečné prezentovat na PANM 15 alespoň rámcovou informaci o principech a algoritmu této metody.

Metoda více pólů je matematický postup, který byl vyvinut s cílem urychlit výpočet sil dalekého dosahu v úloze  $N$  těles. Dosahuje toho tak, že rozvine Greenovu funkci daného systému do tzv. multipólového rozvoje, což pak umožní seskupit zdroje ležící blízko sebe a pracovat s nimi jako se zdrojem jediným. Dále se používá hierarchická dekompozice prostoru, což umožňuje s rostoucí vzdáleností zavádět do výpočtu stále větší skupiny těles či částic. Uvážíme-li, že přesný výpočet pochyb  $N$  částic interagujících prostřednictvím gravitačních nebo elektrostatických sil (hvězdy v galaxii či třeba atomy v proteinu) by vyžadoval  $O(N^2)$  výpočtů, pak FMM umožňuje totéž provést s požadovanou přesností pomocí  $O(N)$  výpočtů (ovšem konstanta obsažená v tomto  $O(N)$  je velká). Jednou ze zřetelných předností algoritmu FMM je skutečnost, že přichází vybaven rigorózními odhady chyb, což je rys, který leckteré jiné metody postrádají.

Metoda v současné době nachází řadu aplikací, například při modelování nanokompozitních materiálů, biomateriálů, palivových článků, akustických vln či zpracování obrazů. Zajímavé se zdá, že je také úspěšně kombinována s metodou hraničních prvků, kde pak dává možnost řešit na běžném PC modely s miliony neznámých. O této problematice ale čas vyhrazený na přednášku už nedává možnost hovořit, pro případné zájemce budou k dispozici další materiály v elektronické podobě.

## A comparison of some a posteriori error estimates for fourth order problems

Karel Segeth

**Abstract:** A lot of papers and books on a posteriori error estimates analyzing them from the point of view of robustness, guaranteed upper bounds, global efficiency, etc. have appeared recently. At the same time, adaptive finite element methods have acquired the principal position among algorithms for solving differential problems in many physical and technical applications.

In this survey contribution, we present and compare several error estimation procedures for the numerical solution of the biharmonic equation and some further fourth order problems including computational error estimates.

## Residual distribution schemes for the neutron transport equation

Martina Smitková

**Abstract:** The contribution is devoted to the numerical methods for simulations of neutron transport. The motivation is to obtain robust algorithms for reactor physics problems. The mathematical model is based on time-dependent Boltzmann kinetic equation for neutrons which is approximated by spherical harmonics. The resulting system of linear hyperbolic partial differential equations is solved by high-resolution nonlinear multidimensional upwind numerical scheme. The developed scheme is based on ideas borrowed from the finite volume and finite element methods with approximate Riemann solvers. The quasi-linear implicit solver is devised. The application to the steady-state problems is discussed. 1D and 2D numerical experiments are presented.

# Numerická analýza některých problémů v polygonálních biliárových dynamických systémech

Martin Soukenka

**Abstrakt:** V příspěvku zkoumáme aplikaci numerických experimentů na některé otevřené problémy v racionálních biliárových dynamických systémech. Speciálně zkoumáme maximální délku společné orbity, danou itinerárem odrazů trajektorií od očíslovaných stěn biliáru ve dvou kvazipodobných polygonálních biliárech.

# Solution of nonlinear coupled problems of flow induced vibrations of an elastic structure

Petr Sváček, Jaromír Horáček, Miloslav Feistauer

**Abstract:** We shall focus on mathematical modelling of nonlinear coupled problems of fluid-structure interactions and particularly on description of a numerical method based on finite element method for solution of such problems in 2D. The coupled problems describing the interactions of fluid flow with elastic structure motion (e.g. aeroelasticity/hydroelasticity) are of great importance in many fields of physical and technical sciences and scientific applications (e.g. in civil engineering – stability of bridges, in mechanical engineering – bladed machines, aircraft design and safety, etc). In the technical practice the linearized aerodynamics approach is used based on solution of only special problems of aeronautical aeroelasticity in the linear domain. The critical fluid flow velocity can be determined, but nonlinear phenomena cannot be captured. In order to address the nonlinear effects we shall consider the coupled solution of partial differential equations describing the flow problem coupled with the solution of motion equations for the structure. The main attention will be paid to the description of the numerical method. First, the approximation in moving domains and the time discretization will be treated with the aid of Arbitrary Lagrangian-Eulerian method and higher order implicit backward difference formula. The weak formulation of a simplified problem will be introduced and the use of various boundary conditions will be discussed. Further, the energy transfers between fluid and structure for a simplified problem will be discussed. Further, the weak formulation of the problem will spatially discretized with the aid of a stabilized finite element method. Moreover, the solution of the nonlinear coupled problem will be treated. The performance of the numerical method will be demonstrated on number of examples either on nonlinear aeroelastic problems or by an application from biomechanics.

# Numerical methods for problems of nonlinear elasticity with large distortions

Tomáš Svatoň

**Abstract:** Non-linear elasticity with large displacements and/or strains is a well known and widely studied argument; innumerable papers are found in the literature tackling this topic, ranging from theoretical foundations, constitutive issues, numerical approximations, and so on. Much smaller indeed is the number of papers dealing with non-linear elasticity with large distortions (also known as pre-strains), and even narrower is the number of those about numerical solutions or finite element method for solving such kinds of problems. Here, we shall investigate some numerical approaches to the elastic problems when large distortions are involved. In particular, after a brief review of the notion of distortions, and the related multiplicative decomposition of the deformation gradient into a distorted and elastic part, we shall present the isotropic hyperelastic model for neo-Hookean, incompressible material. Granted for this constitutive model, we shall discuss the effectiveness of different mixed schemes (displacement-pressure, de Voebeke-Hu-Washizu formulation) on solving selected examples, such as the plain strain regime with stepwise distortions field.

# A posteriori error estimates of the discontinuous Galerkin method for linear elliptic and parabolic problems

Ivana Šebestová, Vít Dolejší

**Abstract:** We deal with a posteriori error estimates of the discontinuous Galerkin (DG) methods applied to the Poisson and heat conduction equations. DG technique provides a high order discontinuous approximation. We present DG formulation of these problems and discuss a use of three types of a posteriori error analysis for the Poisson equation: estimates based on the Galerkin orthogonality, estimates based on the dual formulation and estimates based on the Helmholtz decomposition. The last one technique is further used for the a posteriori error analysis of the heat conduction equation.

# New approach to automatic adaptivity based on fast trial refinements

Pavel Šolín

**Abstract:** We propose a new approach to automatic adaptivity for PDE problems that is based on the solution of small global problems (fast trial refinements). The effect of the fast trial refinements are monitored, either in the global norm or in terms of an arbitrary quantity of interest, and elements causing largest changes are refined. This approach is fully computational, PDE-independent, easy to parallelize, it makes it possible to perform goal-oriented adaptivity very naturally without solving the dual problem (at least for elliptic problems), and we believe that it may be capable of identifying non-local error sources in more complicated equations. The idea of the new approach will be explained and pilot one-dimensional examples will be shown.

## On Chebyshev polynomials of matrices

Vance Faber, Jöerg Liesen, Petr Tichý

**Abstract:** The  $m$ th Chebyshev polynomial of a square matrix  $A$  is the monic polynomial that minimizes the matrix 2-norm of  $p(A)$  over all monic polynomials  $p(z)$  of degree  $m$ . This polynomial is uniquely defined if  $m$  is less than the degree of the minimal polynomial of  $A$ . In this talk we study general properties of Chebyshev polynomials of matrices, which in some cases turn out to be generalizations of well known properties of Chebyshev polynomials of compact sets in the complex plane. We also derive explicit formulas of the Chebyshev polynomials of certain classes of matrices.

### References

- [1] V. FABER, J. LIESEN AND P. TICHÝ, *On Chebyshev Polynomials of Matrices*, submitted, 2009.

## Inverzní problémy přenosu tepla

Jiří Vala

**Abstrakt:** Výpočtová analýza problémů přenosu tepla patří k nejfrekventovanějším inženýrským úlohám. Pro moderní konstrukce jsou často vyvíjeny nové kompozitní materiály, jejichž makroskopické tepelně technické (izolační i akumulační) vlastnosti je nezbytné věrohodně identifikovat; výsledky vycházející z mikrostrukturálních úvah jsou většinou spíše kvalitativní. To stimuluje význam studia inverzních úloh, které jsou však (fyzikálně, matematicky i numericky) podstatně komplikovanější než původní přímé úlohy. Příspěvek se soustředí zejména na matematickou podporu identifikace takových tepelně technických charakteristik (teplné vodivosti, měrného tepla apod.) pomocí relativně levných nestacionárních měřicích zařízení, řízených generujících tepelné toku a zaznamenávajících teplotu v měřicím systému. Znalosti o řešení přímých úloh, reprezentovaných parciálními diferenciálními rovnicemi evolučního typu s vhodnými počátečními a okrajovými podmínkami, lze využít k návrhu rychlých optimalizačních algoritmů pro zjištování tepelně technických vlastností materiálů (včetně analýzy šíření nejistot měření) a následnou predikci jejich chování v konstrukci.

## Komplementarita – cesta k zaručeným odhadům chyby

Tomáš Vejchodský

**Abstrakt:** V přehledné přednášce bude představen komplementární (duální) přístup k řešení symetrických eliptických úloh. Současné přibližné řešení primární (původní) a komplementární (duální) úlohy libovolnou konformní metodou umožňuje získat zaručený horní odhad na velikost chyby jak přibližného řešení primární úlohy tak i komplementární úlohy. Tento postup navíc umožňuje použít tzv. metodu hyperkruhu, kdy jednoduchým zprůměrováním přibližného řešení primární a komplementární úlohy získáme aproximaci jejíž chybu (měrenou v energetické normě) známe přesně. Díky této technice a vhodné adaptivní strategii je možné získat přibližné řešení, jehož chyba je zaručeně menší než předem zvolená tolerance.

## Analysis of a higher order semi-implicit BDF for semilinear problems

Miloslav Vlasák, Vít Dolejší

**Abstract:** We deal with a numerical solution of a scalar semilinear convection-diffusion equation, which represents a simplified model to the compressible Navier-Stokes equations. For discretization we use discontinuous Galerkin method (DG) in combination with semi-implicit backward differential formulae (BDF). The resulting scheme is sufficiently robust and needs only solution of linear problem at each time step. We present analysis of this scheme for higher orders with a priori error estimates.

## Metody s proměnnou metrikou s omezenou pamětí, využívající hodnot z předchozí iterace

Jan Vlček, Ladislav Lukšan

**Abstrakt:** Je navržena třída metod s proměnnou metrikou s omezenou pamětí pro nepodmíněnou minimalizaci, využívající hodnot z předchozí iterace, založená na obdobném kvazi-součinovém tvaru aktualizace, jako široce používaná metoda L-BFGS. Nové metody používají stejný počet násobení matice vektorem a stejný počet vektorů jako metoda L-BFGS a jsou globálně konvergentní. Numerické výsledky ukazují, že pro některé třídy úloh to může významně zlepšit efektivitu.

## Numerical approach to a rate-independent model of decohesion in laminated composites

Jan Zeman

**Abstract:** In this contribution, we introduce an energy-based rate-independent formulation of decohesion processes in adhesively bonded assemblies such as laminated composites. The model itself is based on a variational formulation of isotropic, possibly non-associated, interfacial damage mechanics, in particular on the incremental minimization of the reversible and dissipated energy. Following the alternate minimization strategy introduced recently by Bourdin, the resulting optimization problem is discretized using the Finite Element Method and converted into its dual form based on the Finite Element Tearing and Interconnecting algorithm, extended to account for weakened interfaces. The numerical efficiency and robustness of the resulting algorithm is demonstrated by analyzing representative engineering benchmark tests. This is a joint work with Martin Kružík and Pavel Gruber.

## **Analysis and numerical experiments connected with the computing of the GCD of two inexact polynomials**

**Jan Zítko and Jan Kuřátko**

**Abstract:** The paper introduces the calculation of an approximate greatest common divisor of two univariate polynomials. Euclid's algorithm can be easily simulated by the reduction of the Sylvester resultant matrix to lower triangular form. In real situation the coefficients of both polynomials are inexact and the questions to find a smallest perturbation of both polynomials to obtain the lowest rank of the perturbed Sylvester matrix are solved in many papers. A perturbed matrix is calculated using STLN algorithm. Even though the STLN algorithm has been intensively studied, the theoretical explanation of some parts of algorithm have not been in detail established and this is the first aim of the lecture together with further numerical experiments. Some theoretical questions connected with using QR-factorization for computing GCD will be in detail analyzed together with numerical experiments in the second part of the lecture.

## **Transport program and simulation of transport column experiments**

**Vratislav Žabka**

**Abstract:** The contribution presents the program Transport, which serves to simulation of column transport experiments. Its main function is not to predict results of experiments but to compare influence of individual physical and chemical processes to the experiment results. The one-dimensional advection-diffusion model is based on Finite Volume Method; it includes the triple porosity concept, sorption, retardation, and chemical reactions simulated using connected program React from The Geochemist's Workbench package or PhreeqC. Due to these geochemical programs, the user has extensive possibilities of chemistry simulation during transport. The program Transport simulates not only the processes inside the column but also preparation of entering solutions and measurement methods of outgoing solution parameters.