



PANM 14  
PROGRAMY A ALGORITMY  
NUMERICKÉ MATEMATIKY 14

*1.–6. června 2008, Dolní Maxov*

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

[panm@math.cas.cz](mailto:panm@math.cas.cz)

**ABSTRAKTY**

## Aproximace 3D tvaru zemědělské plodiny

Stanislav Bartoň

**Abstrakt:** Znalost přibližného tvaru plodiny je určující vlastností z hlediska zpracování a skladování. Plodina je vyfocena na kontrastní podložce známých rozměrů. Pořídí se tři fotografie v názájem kolmých směrech. Z rozměrů podložky je možné odvodit souřadnice 2D obrysu. Projekcí obrysu do rovin  $xy$ ,  $yz$ , a  $xz$  je možné metodou nejmenších čtverců proložit vhodnou funkci  $F(x, y, z)$ . V mnoha případech se využívá tříosý elipsoid. Po transformaci elipsoidu do kanonického tvaru lze stanovit základní tvarové charakteristiky plodiny.

## Numerical modeling of neutron flux in hexagonal geometry

Tomáš Berka, Marek Brandner, Milan Hanuš,  
Roman Kužel, Aleš Matas

**Abstract:** In this paper we deal with numerical methods for the multigroup neutron diffusion equation in the VVER type nuclear reactors. Characteristic feature of these reactors are their hexagonal fuel assemblies. This fact has significant consequences for numerical solution of particular equations. We use nodal methods to establish the numerical solution. The main advantage of this class of methods is their high speed without substantial loss of accuracy. We also study a modern variant of nodal methods, i.e. the nodal methods involving conformal mapping. These methods give more accurate results than classical nodal methods. We conclude with a few numerical experiments.

## Numerical modelling of river flow (numerical schemes for one type of nonconservative systems)

Marek Brandner, Jiří Egermaier, Hana Kopincová

**Abstract:** In this paper we propose a new numerical scheme to simulate the river flow in the presence of a variable bottom surface. We use finite volume approach, our method is based on the technique described by D. L. George for shallow water equations. The main goal is to construct the scheme, which is well balanced, ie maintains not only some special steady states but all steady states which can occur. Furthermore this should preserve nonnegativity of some quantities, which are essentially nonnegative from their physical fundamental, for example the cross section or depth. Our scheme can be extended to the second order accuracy. We also present numerical experiments.

## On a traffic problem: Filippov system formulation for $N$ cars

Lubor Buřič, Vladimír Janovský

**Abstract:** We consider a microscopic car-following model of road traffic. In our previous work we investigated oscillatory solutions to the model. The analysis showed that these solutions may not be physical since an event which can be interpreted as a collision with the preceding car. The natural action of a driver at that moment would be to overtake the slower car. We proposed a model of overtaking. Later on, we formulated equivalent model for three cars on the road as a Filippov system, i.e. ordinary differential equations with discontinuous righthand sides. In our presentation we extend such formulation to  $N$ -cars systems, with  $N \geq 3$ , and give some simulation results with particular attention to oscillatory solutions.

## Multiscale modelling with SfePy

Robert Cimrman

**Abstract:** SfePy is an open source finite element analysis software written primarily in Python programming language, see <http://sfepy.kme.zcu.cz>. It was designed to provide a flexible general finite element modeling tool easily adaptable to solve problems defined in terms of PDEs systems. A variety of problems treated by SfePy is demonstrated on multiscale modeling examples, originating from the description of strongly heterogeneous media. These comprise, for example, fluid saturated porous media, and phononic materials. The examples are complemented with general information on SfePy; the choice of the Python is discussed as well as other tools required to install or use the software.

## Lineární stabilita Eulerových rovnic

Libor Čermák

**Abstrakt:** Závislost stability proudění na vstupním rychlostním profilu je významným faktorem ovlivňujícím jak návrh tak provoz hydraulických strojů. Hrubé posouzení takové závislosti dostaneme již pro zjednodušený model proudění. V tomto článku se omezíme na proudění nevazké nestlačitelné tekutiny mezi dvěma sousými válci. K posouzení stability se použijí vlastní čísla linearizovaných Eulerových rovnic a rovnice kontinuity. Diskrétní problém vlastních čísel získáme metodou spektrálních prvků. Algoritmus je implementován v MATLABu. Použitelnost sestaveného programu dokládá několik testovacích výpočtů.

## Adaptive wavelet frame methods with B-spline bases

Dana Černá

**Abstract:** It is known that a function  $f$  that is smooth, except at some isolated singularities, typically has a sparse representation in a wavelet basis, i.e. only a small number of numerically significant wavelet coefficients carry most of the information on  $f$ . This compression property of wavelets led to design of adaptive wavelet methods for solving operator equations. The effectiveness of these methods is strongly influenced by the choice of a wavelet basis. In our contribution, we propose a construction of B-spline wavelet basis on the interval and its adaptation to complementary boundary conditions. The resulting bases are well-conditioned and corresponding stiffness matrices have small condition numbers. Furthermore, we show that this construction combined with frame approach to adaptation to a fairly general bounded domain leads to effective adaptive wavelet frame methods.

## High-order approximations of gradients of smooth functions in vertices of sharply regular triangulations

Josef Dalík

**Abstract:** For a regular triangulation  $\mathcal{T}_h$  without obtuse angles of a bounded open polygon  $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ , let  $\mathcal{L}_h$  be the space of continuous functions, linear on the triangles from  $\mathcal{T}_h$  and  $\Pi_h$  the operator of interpolation in the vertices of  $\mathcal{T}_h$  from  $C(\overline{\Omega})$  to  $\mathcal{L}_h$ . We characterize such vertices  $a$  of the triangulation  $\mathcal{T}_h$  that there exist vectors  $f$  with the property that the linear combinations  $f_1 \nabla \Pi_h(u)|_{T_1} + \dots + f_n \nabla \Pi_h(u)|_{T_n}$  of the gradients  $\nabla \Pi_h(u)|_{T_i}$  on the triangles  $T_1, \dots, T_n \in \mathcal{T}_h$  meeting  $a$  approximate the gradient  $\nabla u(a)$  with an error of the size  $O(h^2)$  for every sufficiently smooth function  $u$ .

## Modelování rezonančních vlastností kulového tlumiče

Cyril Fischer

**Abstrakt:** Kulové tlumiče, které se používají k tlumení vibrací věží a mostů, mohou pro jisté konfigurace zatížení ztratit své žádoucí tlumící funkce. V předkládaném příspěvku je takový tlumič modelován přibližně jako nelineární prostorové kyvadlo a je sledována ztráta jeho stability v rezonanční oblasti. Ukazuje se, že existuje několik typů rezonančního chování v závislosti na parametrech soustavy a harmonickém zatížení. K popisu ztráty stability (rezonance) a jejich příčin je v příspěvku použito kombinace numerického a analytického přístupu.

## Three-dimensional numerical model of neutron flux in Hex-Z geometry

Milan Hanuš, Tomáš Berka, Marek Brandner,  
Roman Kužel, Aleš Matas

**Abstrakt:** We present a method for solving the multigroup system of neutron diffusion equations. Their stationary solution characterizes an equilibrium state of a nuclear reactor core whose actual geometry defines the solution domain. In the case of the investigated VVER-1000 type reactor, the domain comprises non-overlapping prismatic nodes with hexagonal cross-sections. The described nodal method effectively combines a whole-core, coarse-mesh finite-difference calculation with more detailed computation of fluxes over several horizontal cuts through the core. These refined fluxes are obtained by solving the transverse-integrated diffusion equations over pairs of neighbouring hexagonal meshes within each cut. The paper is concluded by sample numerical demonstrations.

## Discontinuous Galerkin method for the simulation of 3D viscous compressible flows

Martin Holík

**Abstract:** We deal with the numerical solution of the 3D compressible Navier-Stokes equations. We employ a combination of the discontinuous Galerkin finite element method for the space semi-discretization and backward difference formulae for the time discretization. Linearization of inviscid as well as viscous fluxes and an application of a suitable explicit extrapolation to nonlinear terms, lead us to a system of linear algebraic equations at each time step. We obtain an efficient numerical scheme which has a higher degree of approximation with respect to the space and time coordinates. For practical computation is used C++ based program COOLfluid which is briefly described in this paper.

## Discontinuous Galerkin method for convection-diffusion problems

Jiří Hozman, Vít Dolejší

**Abstract:** A wide class of problems of fluid mechanics is governed by the combined effects of convection and diffusion. The first part of this contribution is concerned with an analysis of error estimates of the discontinuous Galerkin finite element method (DGFEM) applied to the space semidiscretization of a nonstationary two-dimensional convection-diffusion equation with nonlinear convection and nonlinear diffusion. The attention is paid to the derivation of the error estimates for three variants of DGFEM, namely NIPG, SIPG and IIPG types of stabilizations of diffusion terms. The second part presents a set of numerical examples verifying the theoretical results, namely applications of NIPG, SIPG and IIPG methods to the system of compressible Navier-Stokes equations, where these techniques are applied to a steady flow around the NACA0012 profile and the error of DGFEM is treated with respect to the coefficients of drag and lift.

## The averaged gradient technique in sensitivity analysis

Jan Chleboun

**Abstract:** In 1995, Hlaváček, Křížek, and Pištora proposed an averaging technique to increase the accuracy of the gradient of a finite element solution. This technique can be used in sensitivity analysis of PDE-constrained optimization.

## Vplyv volby linearizácie na riešenie Fisherovej rovnice v rovine

Pavol Chocholatý

**Abstrakt:** Príspevok je venovaný numerickému riešeniu zaciatočno-okrajovej úlohy pre PDR, keď reakčno - difúzna rovnica s dvojrozmernou priestorovou premennou, modelujúcou hustotu populácie, berúc do úvahy tendenciu jej rozširovania, je riešená s Neumannovou okrajovou podmienkou reprezentujúcou skutočnosť, že nepríde k migrácii populácie cez hranicu skúmanej oblasti, metódou striedavých smerov.

## FE modeling of wood structure in drying process

Petr Koňas

**Abstract:** The main aim of this work is focused on FE modeling of wood structure. This task is conditioned mainly by different organized structures/regions (tissues, anomalies,...) and leads to homogenization process of multi physics declaration of common scientific and engineering problems. In this paper the crucial role is played by digitizing of wood structure and determination of significant conditions/hypothesis for mathematical model formulation of interaction between wood (formed by mentioned way) and various forms of energy. Coupled task takes into account visco-elastic response, moisture and temperature dependency of material characteristics. Drying process is considered as microwave type. Solution is based on Lykov's equation system such as one of typical diffusion problem used for description of similar engineering tasks.

## The numerical solution of compressible flows in time dependent domains

Václav Kučera

**Abstract:** This work is considered with the numerical solution of inviscid compressible fluid flow in moving domains. Specifically, we assume the boundary part of the domain (impermeable walls) are time dependent. We consider the Euler equations, which describe the movement of inviscid compressible fluids. We present two formulations of the Euler equations in the ALE (Arbitrary Lagrangian-Eulerian) form. These two formulations are discretized in space by the discontinuous Galerkin method. We apply a semi-implicit linearization with respect to time to obtain a numerical scheme requiring the solution of only one linear system on each time level. We apply the method to two basic situations: flow in a channel with moving walls and flow around a moving (vibrating) profile.

## Selected aspects of *hp*-FEM in 3D

Pavel Kůs, Pavel Šolín, Tomáš Vejchodský

**Abstract:** Finite element method is one of the most often used methods for solving partial differential equations. The ability of adaptive refinement of the mesh is a substantial feature of all modern methods. It has been shown theoretically and practically, that for a variety of physical and technical problems, the ability to change both size and polynomial order of elements is very usefull. Such variant of the finite element method is called *hp*-FEM.

The main drawback of this method is its difficult implementation, which is even more significant in three spatial dimensions. In order to ensure conformity of the approximation, we have to care about orientation of faces and edges when constructing base functions. The most demanding part is the treatment of hanging nodes, that appear during adaptation steps. According to our previous experience from 2D, we decided to implement arbitrary level hanging nodes. This implementation is more complicated, but it significantly simplifies the adaptive procedure (no forced refinements are needed) and leads to smaller discrete systems (degrees of freedom are used only when they are really needed).

In this presentation, we discuss some aspects of the implementation of the method. Numerical example is presented to show its usefulness.

## Metody vnitřních bodů pro zobecněnou minimaxovou optimalizaci

Ladislav Lukšan, Ctirad Matonoha, Jan Vlček

**Abstrakt:** Je popsána nová třída primárních metod vnitřních bodů pro zobecněnou minimaxovou optimalizaci. Tyto metody používají kromě standardní logaritmické barierové funkce též zdola omezené barierové funkce, které mají příznivější vlastnosti pro vyšetřování globální konvergence. Jde o metody spádových směrů, kde se aproximace Hessovy matice počítá buď pomocí diferencí gradientů nebo pomocí kvazinevtonovských aktualizací. Používá se dvojúrovňová optimalizace. Směrový vektor se počítá pomocí Choleského rozkladu řídké matice. Jsou uvedeny numerické experimenty týkající se dvou základních aplikací, minimalizace bodového maxima a součtu absolutních hodnot hladkých funkcí.

## On Lagrange multipliers of trust-region subproblems

Ctirad Matonoha, Ladislav Lukšan, Jan Vlček

**Abstract:** Trust-region methods are globally convergent techniques widely used, for example, in connection with the Newton's method for unconstrained optimization. One of the most commonly-used iterative approaches for solving the trust-region subproblems is the Steihaug-Toint method which is based on conjugate gradient iterations and seeks a solution on Krylov subspaces. We will give a theory concerning properties of Lagrange multipliers obtained on these subspaces.

## Metoda tepelných bilancí a odhad rychlosti konvergence

Jaroslav Mlýnek

**Abstrakt:** V příspěvku je uvažována eliptická parciální diferenciální rovnice 2. řádu na obdélníkové oblasti s Newtonovou okrajovou podmínkou. Předpokládáme dostatečnou hladkost přesného řešení rovnice a funkcí vyskytujících se v rovnici a v okrajové podmínce. Na základě sestavení vhodné triangulace a příslušné duální sítě oblasti je v příspěvku ukázáno, že se v uzlových bodech duální sítě uvnitř i na hranici oblasti dopouštíme chyby  $O(h^2)$ , kde  $h$  značí maximum z délek stran obdélníkového prvku duální sítě. Součástí příspěvku jsou také numerické výsledky řešení praktické úlohy uvedeným postupem.

## Numerical solution of boundary value problems by means of B-splines

Vratislava Mošová

**Abstrakt:** B-splines, thanks to their flexibility and computational efficiency, are successful tool in approximation theory. They can be used as basis in Galerkin method for approximating boundary value problems. There are admittedly some difficulties with implementation of essential boundary conditions and with stability of requirements in this case, but such difficulty can be overcome if we slightly modify the B-splines. In this contribution, the construction of proper weighted B-splines for given boundary value problem will be described, received functions will be used for solving the boundary value problem and error estimate will be derived.

## Solving problems with some peculiar matrices

Eva Neumanová

**Abstract:** This contribution deals with some systems of linear algebraic equations. These peculiar matrices arise from discretization of certain problems in elasticity. Although the matrices are symmetric, positive definite, well conditioned, and of order not greater than  $10^2$ , they are dense and with entries ranged from  $10^{-8}$  to  $10^{+9}$ . Various methods tested are aimed to achieve higher accuracy of the solution of the problems considered.

### Literatura

- [1] P. Burda, M. Čertíková, A. Damašek, E. Neumanová, J. Novotný, J. Šístek. Application of the BDDC method to linear elasticity problems. In Sameš M., editor, Proceedings of SAMO'06, Ostravice, Czech Republic, September 13–15, pages 9–10, VŠB TU Ostrava, 2006.
- [2] P. Burda, M. Čertíková, J. Novotný, J. Šístek. BDDC method with simplified coarse problem and its parallel implementation. In Proceedings of MIS 2007, Josefův Důl, Czech Republic, January 13–20, 2007.

## Existence and uniqueness for Navier Stokes equations in a cascade of profiles with linear separated boundary condition on the outflow

Tomáš Neustupa

**Abstract:** The paper is concerned with the theoretical analysis of the model of incompressible, viscous, stationary flow through a plane cascade of profiles. The boundary value problem for the Navier-Stokes system is formulated in a domain representing the exterior to an infinite row of profiles, periodically spaced in one direction. Then the problem is reformulated in a bounded domain of the form of one space period with suitable boundary conditions. Specially, we study the question of uniqueness of the weak solution of this problem for linear boundary condition for vorticity and Bernoulli's pressure on the outflow.

## Computational homogenization for multiscale modeling of heterogeneous materials

Eduard Rohan, Robert Cimrman, Vladimír Lukeš

**Abstract:** The modeling of heterogeneous materials means to find (compute) global response of structures having characteristic size relevant to the "macroscopic" scale, whereas the physical properties and thereby the structure behaviour is given at the "microscopic" scale characterized by a small parameter  $\varepsilon \rightarrow 0$ . This setting of the problem requires to homogenize the microstructural behaviour defined in terms of PDEs with oscillating and possibly scale-dependent parameters reflecting some sub-microscopic effects.

In the paper we explain a general multiscale modeling methodology and present particular problems which we treated by homogenization. These comprise fluid saturated porous media, elastic waves in phononic materials, acoustic transmission on perforated interfaces and large deforming poroelastic structures.

The multiscale homogenization-based models involve the limit systems of PDEs possessing macroscopic fields of interest and the local models which allow to 1) obtain macroscopic model parameters and 2) to recover microscopic response for a particular macroscopic loading. This "microscopic recovery" procedure is more complicated for models with scale-dependent material parameters, such as those governing the fluid-saturated porous media with dual porosities; there the flow described by the Darcy law is featured by heterogeneities (discontinuities) in the hydraulic permeability,  $K$ , so that in some parts of the microstructure  $K$  depends on  $\varepsilon$ -square, which corresponds to the dual porosity ( $\varepsilon$  is the length of the heterogeneity period). In general, the strong heterogeneity results in a new quality of the macroscopic constitutive laws in comparison with those defined at the microscopic level. A similar phenomenon characterizes the phononic materials where strong heterogeneities in elastic coefficients are considered.

Numerical results illustrating the mentioned applications and some particular numerical procedures implemented in the in-house developed SfePy software will be presented.

## Remarks on the economic criterion – the internal rate of return

Carmen Simerská

**Abstract:** The internal rate of return (IRR) is used as an important measure for investment projects and financial securities described by a sequence of cash flows over time. When used appropriately, it can be a valuable aid in project acceptance or selection. From mathematical point of view the problem is to find the roots of an equation  $f(r) = 0$ . We are interested in the existence, uniqueness and/or multiplicity of the IRR solutions. The IRR can be unambiguously used in decision making if it is unique and simple. Additional IRRs can occur e.g. when changes in the signs of the net sums or large changes in the relative magnitude occur in the cash flows. In case of multiple IRR, any numerical method can run into difficulties. A strategy is proposed how the economist (financial manager) should deal with the project when special software tools (symbolic programs), which can provide all existing roots, are not available.

## About one 4<sup>th</sup> order boundary value problem with nonlinear potential: numerical realization

Ivona Svobodová

**Abstract:** We consider functionals of potential energy  $\mathcal{P}_\psi(u)$  corresponding to a rotary-symmetric boundary-value problem. We are dealing with bending of a thin intercircular plate with Neumann boundary conditions. Various types of subsoil of the plate is described by nondifferentiable  $\psi(u)$ . The aim of the paper is to formulate suitable problem discretization and convergence analysis furthermore. The discretization is by means of *Semismooth Newton method*



# Paralelní implementace metody BDDC a její aplikace na analýzy napjatosti v tělesech

Jakub Šístek, Pavel Burda, Marta Čertíková, Jaroslav Novotný

**Abstrakt:** Bude představena metoda Balancing Domain Decomposition based on Constraints (BDDC) [1], předpodmiňovač pro metodu předpodmíněných sdružených gradientů (PCG) založený na rozkladu oblasti na subdomény. V příspěvku se budeme zabývat zejména aspektem implementace tohoto předpodmiňovače, s důrazem na paralelní verzi. Budou diskutovány přístupy k implementaci zobecněných podmínek spojitosti, které jsou nezbytné pro konstrukci robustního BDDC předpodmiňovače. Metodu budeme prezentovat na několika příkladech analýzy napjatosti v tělesech pomocí lineární teorie pružnosti.

## Literatura

- [1] C. R. Dohrmann. A preconditioner for substructuring based on constrained energy minimization. *SIAM J. Sci. Comput.*, 25:246–258, 2003.

# Automatic adaptivity for evolutionary problems based on the Rothe's method

P. Šolín, K. Segeth, I. Doležel, J. Červený, L. Dubcová, P. Kůs

**Abstrakt:** We present a new method for automatic adaptivity for time-dependent PDEs that includes simultaneous mesh refinement and coarsening. The technique is based on a combination of our recently developed multi-mesh FEM [2,3] with the classical Rothe's method. The Rothe's method performs semi-discretization in time only while leaving the spatial variables continuous (as opposed to the Method of Lines).

In this way, a time-dependent PDE translates into several time-independent ones in every time step. The actual number of the time-independent PDEs depends on the accuracy of the time integration scheme – for example, one has to solve one time-independent PDE per time step when using the backward Euler method. Each of these time-independent PDEs is solved adaptively until a prescribed accuracy is reached, starting from a suitable coarse mesh (master mesh). The multi-mesh FEM is used for simultaneous treatment of approximations on different meshes. The technique of arbitrary-level hanging nodes [1] is employed to prevent conflicting refinements in the system of meshes.

If no a-priori knowledge of the solution is available, we use a uniform master mesh. Otherwise, the master mesh is chosen to be coarser in parts of the computational domain where the solution does not exhibit any problematic phenomena. In particular, note that the final mesh (or system of meshes in a coupled problem) changes at the end of every time step – in other words, an effect that can be called "simultaneous mesh refinement and coarsening" takes place naturally. In this way, spatial discretization error can be practically eliminated in every time step. Numerical examples are presented.

## References

- [1] P. Šolín, J. Červený, I. Doležel: Arbitrary-Level Hanging Nodes and Automatic Adaptivity in the *hp*-FEM, *MATCOM*, in press, doi:10.1016/j.matcom.2007.02.011.
- [2] P. Šolín, J. Červený, L. Dubcová: Adaptive Multi-Mesh *hp*-FEM for Linear Thermoelasticity, submitted to *CMAME*, November 2007.
- [3] P. Šolín, J. Červený, L. Dubcová, I. Doležel: Multi-Mesh *hp*-FEM for Thermally Conductive Incompressible Flow. In: *Proceedings of ECCOMAS Conference COUPLED PROBLEMS 2007* (M. Papadrakakis, E. Onate, B. Schrefler Eds.), CIMNE, Barcelona.

# Modelování vícesložkové difúzní fázové transformace v pevných látkách

Jiří Vala

**Abstrakt:** Difúzi v systémech o konečném počtu složek lze charakterizovat:

- mechanismem pohybu vakancí pro „pomalou“ difúzi substitučních složek,
- procesem nerovnoměrného generování a anihilace vakancí,
- „rychlou“ difúzi atomů intersticiálních složek.

Pro věrohodnou numerickou simulaci difúzní fázové transformace je potřebné řešit sdružený problém difúze a pohybu mezifázového rozhraní, jenž zahrnuje a), b) i c) ve všech svých fázích. Běžné modely (nehledě na další zjednodušení) většinou pracují s ostrým mezifázovým rozhraním (tj. s rozhraním nekonečně malé tloušťky), a neobejdou se tak bez dodatečných podmínek rovnováhy formulovaných pro takové ideální rozhraní. Ucelená fyzikální i matematická teorie je dosud zpracována jen pro modelové binární (dvousložkové) systémy.

Nový vícesložkový model, navržený v rámci řešení projektu GA AV ČR *Modelování kinetiky fázových transformací v pevných látkách*, uvažuje pohybující se rozhraní konečné tloušťky  $h$ . Jeho odvození vychází z Onsagerova termodynamického principu, zejména z vyčíslení celkové Gibbsovy a disipační energie na rozhraní. Koncentraci jednotlivých složek v každé poloze  $x$  lze charakterizovat  $r$  molárními podíly  $c_k$  pro  $k \in \{1, \dots, r\}$ , jež odpovídají substitučním složkám, splňujícím podmínku  $c_1 + \dots + c_r = 1$ , a  $s$  molárními podíly  $c_k$  pro  $k \in \{r+1, \dots, r+s\}$ , jež odpovídají intersticiálním složkám; zkráceně  $c = (c_1, \dots, c_{r+s})$ . Dalšími proměnnými v systému jsou 3 složky rychlosti  $v = (v_1, v_2, v_3)$  a rovněž  $3(r+s)$  složek difúzních toků  $j_{kp}$ ,  $k \in \{1, \dots, r+s\}$ ,  $p \in \{1, 2, 3\}$ . Budiž  $\Omega$  molární objem. V pohyblivé soustavě souřadnic, kde tečky naznačují parciální derivování podle času, lze zachování hmotnosti pro libovolnou složku  $k$  formulovat ve tvaru

$$\dot{c}_k - v_p \nabla_p c_k = -\Omega \nabla_p j_{kp};$$

zde  $p$  jsou Einsteinovy sčítací indexy z  $\{1, 2, 3\}$ , obdobně použijeme i indexy  $k, l$  z  $\{1, \dots, r+s\}$ . Z Onsagerova principu vyplývá

$$j_{kp} = -\rho_{kl} \nabla_p \mu_l(c)$$

pro jisté materiálové charakteristiky  $\rho_{kl}$  a chemické potenciály  $\mu_l$ . Máme nyní  $4(r+s)$  rovnic o  $4(r+s)+3$  neznámých. Pro kompletování soustavy potřebujeme vyjádřit

složky rychlosti  $v_p$  jako funkce  $c$ , zřejmě opět pomocí  $\mu_l(c)$ : ke klasickým členům typu  $\nabla_p \mu_l(c)$  se připojují další (s nulovou divergencí), zohledňující mechanismus b). Pouze  $r+s-1$  složek  $c$  je nezávislých; i počet rovnic lze tedy snížit o jednu.

Zajímavé výsledky poskytuje už numerické modelování pohybujícího se rozhraní konstantní tloušťky v uzavřeném tříložkovém systému, idealizovaném jako jednorozměrném, v němž dominuje Fe nad Cr a Ni. Pracuje se přitom pouze se dvěma fázemi a s jejich rozhraním jako s třetí fází (pro  $0 \leq x \leq h$ ). Numerická simulace tohoto procesu v MATLABu je schopna vystihnout některé jevy, např. závislost rychlosti pohybu rozhraní na teplotě, resp. přechod od kvazistacionárního procesu k evoluční redistribuci  $c$  v jednotlivých fázích, lépe než dosud používané zjednodušené modely s ostrým rozhraním.

## Deterministické a stochastické modelování dynamiky chemických reakcí

Tomáš Vejchodský, Radek Erban

**Abstrakt:** Dynamický vývoj chemických reakcí je možné modelovat deterministicky pomocí diferenciálních rovnic pro koncentrace (případně počty molekul) jednotlivých chemikálií. Alternativně můžeme použít stochastický simulační algoritmus, který používá generátor náhodných čísel. Jednotlivé realizace stochastického simulačního algoritmu se samozřejmě liší, ovšem průměr přes mnoho realizací je dobře reprodukovatelná veličina popisující průměrné chování systému.

V přednášce předvedeme příklady, kdy deterministický a stochastický model téhož systému chemických reakcí dávají kvalitativně odlišné výsledky: deterministický model konverguje do stacionárního stavu zatímco stochastický vykazuje periodické oscilace. Rozpor obou modelů je způsobený tím, že deterministický model přestává být přesný pokud je počet molekul jedné z chemikálií velmi malý.

Na závěr předvedeme příklad motivovaný chemickými ději v živých buňkách.

## Metody s proměnnou metrikou s omezenou pamětí, založené na invariantních maticích

Jan Vlček, Ladislav Lukšan

**Abstract:** Je popsána nová třída metod s proměnnou metrikou s omezenou pamětí pro nepodmíněnou minimalizaci. Aproximace inverzních Hessových matic jsou založeny na maticích, invariantních vzhledem k lineární transformaci. Protože tyto matice jsou singulární, pro výpočet směrových vektorů se korigují. Metody mají vlastnost kvadratického ukončení, tj. pro přesný výběr délky kroku najdou minimum ryze konvexní kvadratické funkce po konečném počtu kroků. Numerické výsledky ukazují efektivitu metod.

## Parallel implementation of discontinuous Galerkin method for compressible flow simulations

Michal Zajac, Vít Dolejší

**Abstract:** We deal with a numerical simulation of viscous compressible flows, which is described by the compressible Navier-Stokes equations. We employ the discontinuous Galerkin finite element method (DGFEM), which is based on a piecewise polynomial but discontinuous approximations. Among several advantages of DGFEM, a favourable property is the same stencil for any order of accuracy which is important for the parallel efficiency of the method since the communication between cells is carried out only through common surfaces. We develop a parallel implementation of the DGFEM for the Navier-Stokes equations. In the first stage we employ the PETSc library for the parallel solution of the corresponding linear algebra solvers. We present a set of numerical experiments, which demonstrate an efficiency of the developed code and also give some hints for further research.

## The transformation of the Sylvester matrix and the calculation of the GCD of two inexact polynomials

Jan Zítko, Joab R. Winkler

**Abstract:** Euclid's algorithm is a classical method for calculating the greatest common divisor (GCD) of two univariate polynomials. The algorithm should not be executed in a floating point environment because roundoff errors are sufficient to return an incorrect answer. If the given polynomials are inexact, only an approximate GCD can be calculated, that is, a GCD that is obtained by perturbing both polynomials slightly, such that their perturbed forms have a non-constant GCD. The calculation of an approximate GCD of two inexact polynomials is formulated as the construction of a rank deficient Sylvester resultant matrix (which will henceforth be called the Sylvester matrix) that is near the Sylvester matrix of the given inexact polynomials. In this lecture the connection of Euclid's algorithm with the Sylvester matrix is established, the application of the method of structured total least norm for the computation of an approximate GCD of two inexact polynomials using the Sylvester matrix is described. It is shown that this yields an equality-constrained least squares problem (the LSE problem), and a review of methods for solving the LSE problem is formulated. Numerical examples is presented.

# Metody vnitřních bodů pro řešení úlohy lineární elasticity s daným třením

Pavel Ženčák, Jitka Machalová

**Abstrakt:** V našem příspěvku se zabýváme aplikací metod vnitřních bodů na speciální úlohu kvadratického programování s kvadratickými omezeními, která vzniká při řešení úloh lineární elasticity s daným třením. Je použita metoda sledování cesty s adaptivní volbou centrujícího parametru s pravidlem softwaru LOQO a Mehrotrova metoda prediktor-korektor. Jako referenční metoda je použita metoda aktivních množin (QPC algoritmus). Metody jsou porovnány z hlediska výpočetního času a počtu iterací v Matlabu.