



PANM 18  
PROGRAMY A ALGORITMY  
NUMERICKÉ MATEMATIKY 18  
*19.–24. června 2016, Janov nad Nisou*  
<http://panm18.math.cas.cz>  
[panm@math.cas.cz](mailto:panm@math.cas.cz)

## ABSTRAKTY

### Vesmírná Odyssea A. C. Clarka a Newtonův gravitační zákon

Stanislav Bartoň

V předloženém článku jsou objasněny základy výpočtu gravitačního pole objektu nesférického tvaru. Jsou vysvětleny metody výpočtu tvaru silokřivek gravitačního pole, ekvipotenciálních hladin a jsou vypočteny trajektorie volného pádu. V závěrečné části jsou provedeny výpočty trajektorií těles o malé hmotnosti v nesférickém gravitačním poli.

### Numerické modelování proudění ve vodních turbínách

Bohumír Bastl, Marek Brandner, Jiří Egermaier, Kristýna Michálková, Eva Turnerová

V příspěvku budeme věnovat pozornost některým problémům souvisejícím s vývojem metod a algoritmů pro numerickou simulaci proudění vazké nestlačitelné tekutiny v točivých mechanických strojích. Zaměříme se na otázky související s použitím Galerkinovy metody, isogeometrické analýzy, se stabilizací získaných schémat a s nespojitou Galerkinovou metodou. Okrajově zmíníme problematiku modelování turbulentního proudění a záměr realizovat tvarovou optimalizaci některých částí turbín.

# Metoda hraničních prvků a paralelní hierarchické matice

J. Bouchala, D. Lukáš

V našem příspěvku nejdříve seznámíme posluchače s podstatou metody hraničních prvků. Jedná se o metodu pro řešení řady okrajových úloh lineárních parciálních diferenciálních rovnic např. vedení tepla, akustika, elasticita, elektromagnetismus. Metodu lze použít pro stacionární i nestacionární případy výše zmíněných úloh. Problém se přeformuluje na hranici uvažované oblasti. Díky tomu snížíme dimenzi řešeného problému, což je zvláště výhodné při řešení úloh na neomezených oblastech. Nevýhodou je nutná znalost tzv. fundamentálního řešení příslušného diferenciálního operátoru a náročnější implementační úsilí např. ve srovnání s metodou konečných prvků, neboť je třeba se vypořádat s integrály různých singularit. Výsledné matice soustav lineárních rovnic jsou bohužel plné. Ukazuje se však, že bloky odpovídající dostatečně vzdáleným částem hranice mají nízkou numerickou hodnotu a lze je efektivně aproximovat pouze z několika řádků a sloupců. Tato technika vyvinutá prof. Hackbuschem a prof. Bebendorfem se nazývá Adaptive Cross Approximation. Bloky se v původní matici vyhledávají rekurzivně, což vede na tzv. hierarchické matice. V závěru příspěvku představíme námi navržený způsob paralelizace hierarchických matic opírající se o cyklické dekompozice kompletních grafů. Výsledná metoda má časovou náročnost  $O(n \log(n)/N)$  a paměťovou náročnost  $O(n \log(n)/\sqrt{N})$ , kde  $n$  je počet neznámých a  $N$  počet paralelních procesů.

## Simplified constitutive solution of a Mohr-Coulomb elastoplastic model via subdifferential of the plastic potential

Martin Čermák, Stanislav Sysala

It is considered an elastoplastic model containing the Mohr-Coulomb yield criterion, the nonassociative plastic flow rule and a nonlinear isotropic hardening. The constitutive initial-value problem is discretized by the implicit Euler method and thus the corresponding constitutive operator cannot be found in closed form. Moreover, the knowledge of a generalized derivative to this operator is required when the semismooth Newton method is used for solving of the whole elastoplastic boundary-value problem. Despite the current approaches based on Koiter's formulas we suggest to work with the subdifferential of the plastic pseudo-potential to find an algorithmic solution of the constitutive problem. The new approach leads to much simpler formulas enabling to investigate also mathematical properties of the constitutive operator. The improved solution scheme is tested on a slope stability benchmark. Here, the related incremental limit analysis is performed for several types of finite elements. The problem is implemented in MatLab.

# Boundary value methods for initial value problems

Cyril Fischer

Certain types of evolutionary (partial) differential equations consist of two separate components: transient and stationary. The transient component can depend on initial conditions or a time-limited function ("load") entering the equation. If the effect of the transient part decreases in time, i.e. the equation possess sufficient damping, for every  $t > t_0$  can be the solution described almost exactly by the stationary component only. The proposed contribution brings an attempt to embrace the transient effect of the solution of an equation between its initial conditions ( $t = 0$ ) and known stationary solution ( $t = t_0$ ) and to employ boundary value numerical methods for solution of such initial value problems.

# Implementace plné linearizace mortarových kontaktních matic ve 2D

Ladislav Foltyn

Pokud chceme počítat kontaktní úlohy pomocí semihladké Newtonovy metody, je nutné mít k dispozici nejen linearizaci matic tuhosti a hmotnosti, ale je potřeba také linearizovat matici popisující kontaktní podmínky. Pro přesný popis kontaktních podmínek je dnes používána formulace přes tzv. Mortary. Náš příspěvek detailně popisuje linearizaci a formulaci vhodnou pro řešení semihladkou Newtonovou metodou.

# **Application of the BDDC method to simulation of flows in hydrostatic bearings**

**Martin Hanek**

We apply Balancing Domain Decomposition based on Constraints (BDDC) to stationary incompressible flow governed by the Navier-Stokes equations. This method solves large systems of linear equations arising from the finite element method. The algorithm is applied to nonsymmetric linear systems obtained by Picard's linearisation of the Navier-Stokes equations using Taylor-Hood finite elements. Numerical results for the benchmark problem of 3-D lid driven cavity and for an industrial problem of oil flow in a hydrostatic bearing are presented.

# **PERMON libraries for massively parallel solution of contact problems of elasticity**

**Václav Hapla**

PERMON forms a collection of software libraries, uniquely combining quadratic programming (QP) algorithms and domain decomposition methods (DDM), built on top of the well-known PETSc framework for numerical computations. Among the main applications are contact problems of mechanics. Our PermonFLLOP package is focused on non-overlapping DDM of the FETI type, allowing efficient and robust utilization of contemporary parallel computers for problems with billions of unknowns. Any FEM software can be used to generate mesh and assemble the stiffness matrices and load vectors per each subdomain independently. Additionally, a mapping from the local to the global numbering of degrees of freedom is needed, and non-penetration and friction information in case of contact problems. All these data are passed to PermonFLLOP, which prepares auxiliary data needed in the DDM. PermonQP is then called in the backend to solve the resulting equality constrained problem with additional inequality constraints in case of contact problems.

# Numerické studie úloh proudění podzemní vody se singularitou

Milan Hokr

Proudění podzemní vody je řízeno rovnicí potenciálového pole. V aplikacích se často vyskytuje případ singularity typu bodového zdroje. V příspěvku bude ukázán jiný případ reálné konfigurace, kde vzniká obdobná singularita na rohu (hraně) oblasti - při kontaktu 3D bloku propustné horniny a pukliny vyjádřené plochou mezi nepropustnými bloky. Je porovnána závislost na diskretizaci u dvou různých numerických schémat (implementovaných v hotových simulačních softwarech) - standardní a smíšené-hybridní MKP. Vliv je menší, než v případě bodového zdroje a u smíšené-hybridní metody se navíc projevuje odlišnost geometrie nutná pro propojení diskrétních proměnných.

# Knihovna nástrojů pro isogeometrickou analýzu G+Smo

Hana Horníková

Cílem příspěvku je seznámení s C++ open-source knihovnou G+Smo (Geometry + Simulation Modules) vyvíjenou především na půdě univerzity v Linci. Knihovna je založena na myšlence isogeometrické analýzy, tedy spojení geometrického modelování (CAD) a numerické simulace do jednotného rámce. Tuto knihovnu využíváme pro vývoj řešiče Navierových-Stokesových rovnic, který bude později použit pro optimalizaci tvaru lopatek vodní turbíny.

# Computational meshes in three (and more) dimensions

Radim Hošek

Proving convergence and error estimates of numerical methods for compressible Navier-Stokes system requires the existence of a family of so called boundary-fitted meshes with uniform bound on regularity of the elements. For the lack of this result, we show the existence of such family for any bounded  $C^2$ -domain. The proof is based on special properties of Sommerville tetrahedra, which will be shown to play also an important role in constructing simplicial meshes in higher dimensions.

# DG method for the numerical pricing of path-dependent multi-asset options

Jiří Hozman, Tomáš Tichý

Option pricing models are an important part of financial markets worldwide. The PDE (or PIDE) formulation of these models leads to analytical solutions only under very strong simplifications. For more general models the option price needs to be evaluated by numerical techniques. First, based on the ideal pure diffusion process for risky asset prices, we introduce the appropriate model describing the evolution of basket options. Next we incorporate a new path-dependent variable into this model and present the general form of PDE for pricing of path-dependent option contracts on two assets. Further, we focus only on one subclass – Asian options – and discuss two concepts of the dimensional reduction (w.r.t. payoff) leading to PDE with two spatial variables. Then the numerical option pricing scheme arising from the discontinuous Galerkin method (DGM) is developed and some theoretical results are also mentioned. Finally, each afore-mentioned model is supplemented with the numerical results (obtained by DGM) on real market data.

# Nejisté konstituční funkce v modelech magnetostrikčního generátoru energie

Jan Chleboun

Magnetostrikční generátor energie (energy harvester) je zařízení, které využívá periodického mechanického zatěžování vzorku magnetostrikčního materiálu ke generování elektrického napětí. Matematické modely generátoru tvoří hierarchickou strukturu od komplikovaného modelu s magneticko-mechanickou hysterezí a zpětnou vazbou po relativně jednoduchý model bez hystereze a bez zpětné vazby. Všechny modely však obsahují jisté vnitřní parametry a funkce, jejichž hodnoty a průběhy jsou zatíženy nejistotou. Příspěvek se zabývá vlivem této nejistoty na množství generované energie v modelu s hysterezí i bez hystereze.

## Kernel detection of singular matrix in TFETI method

Pavla Jirůtková

The Total FETI (Finite Element Tearing and Interconnecting) method is one of the most successful domain decomposition methods (DDM) for efficient solution of partial differential equations in parallel on supercomputers. A singular system of linear equations often appears in the TFETI method. A heuristic approach to detection of its nullspace will be presented. This method does not require knowledge of the nodal coordinates. The analytic results show good properties of the method and they are confirmed by numerical experiments.

# **Výpočetní elektromagnetismus - nové trendy a výzvy**

**Pavel Karban**

Elektromagnetické pole a znalost jeho rozložení je důležitou součástí návrhu většiny zařízení, které nás v dnešní době obklopují. Účinky jsou často úzce navázány na další fyzikální pole (tepelné namáhání nebo silová interakce s pevnou látkou nebo tekutinou) a jeho přesné a dostatečně rychlé řešení hraje tedy klíčovou roli. Samotné řešení je často spojeno s dalšími druhy analýz jako je například tvarová optimalizace, odhad parametrů nebo citlovostní analýza. Přednáška bude zaměřena na numerické techniky používané pro řešení elektromagnetické pole nízkých i vysokých frekvencí a jejich následné využití u optimalizačních úloh. Tyto techniky budou doplněny konkrétními příklady z praxe.

## **Numerical modelling of steady and unsteady flows of generalized Newtonian fluids**

**Radka Keslerová**

This work deals with the numerical simulation of steady and unsteady flows of laminar incompressible viscous fluids through the channel with T-junction with circle cross section. The fundamental system of equations is the system of generalized Navier-Stokes equations for incompressible fluids. Numerical tests are performed on three dimensional geometry, a branched channel with one entrance and two outlet parts. Numerical solution of the described models is based on cell-centered finite volume method using explicit Runge-Kutta time integration. In the case of unsteady computation an artificial compressibility method is considered.



# Identifikace parametrů matematického modelu magnetostrikčního materiálu

Ielizaveta Kholmetska

Vzorky magnetostrikčních materiálů reagují na změnu vnějšího magnetického pole změnou svých fyzických rozměrů. A naopak, při změně zatížení vnější silou se projevují změnou magnetického pole. Těto vlastnosti se využívá například ve snímačích vibrací a v zařízeních pro přeměnu mechanické energie v energii elektrickou (energy harvesting). Odpovídající matematické modely mají různou úroveň složitosti a standardně berou v úvahu i hysterezi magnetostrikčních materiálů, což však komplikuje příslušné výpočty. V případě materiálů se slabou hysterezí (např. galfenol - slitina železa a gallia) se nabízí použití jednodušších modelů bez hystereze. Příspěvek se zabývá identifikací parametrů dvou takových modelů, a to na základě naměřených dat magnetického i mechanického chování galfenolu.

# Stochastic Optimization of the Heat Radiation Intensity and a Temperature Field Model

Roman Knobloch, Jaroslav Mlýnek, Zdeněk Kalousek, Radek Srb

The contribution focuses on the optimization of infrared heaters positioning over the metal mould of a complicated shape. The mould is heated by the set of infrared heaters. The heaters are to be positioned over the mould in such a way that the heat radiation intensity generated by the heaters incident on the mould surface is as homogeneous as possible. The homogeneous heat radiation intensity induces a uniform temperature field inside the mould and on the mould surface. This is a necessary prerequisite for high quality production of plastic leathers. The homogeneity of the temperature field is verified by means of a temperature model. The mentioned optimization task can be solved utilizing various techniques. In the presented paper the authors use the method of stochastic gradient for the optimization and compare it with alternative techniques.

# Návrh robustního experimentu založený na globální citlivosti

Anna Kučerová

Návrh laboratorních měření je stále často prováděn pomocí metody “pokus - omyl“, při níž hraje důležitou roli expertní znalost o kalibrovaném materiálovém modelu. V případě pokročilých modelů, které jsou využívány například k simulaci nelineárních inženýrských úloh, se proto jedná o náročný úkol. Existující numerické metody návrhu experimentů, které jsou založené na výpočtu lokální citlivosti pro apriori odhadnuté hodnoty identifikovaných materiálových parametrů. Tyto metody však mají dva vážné nedostatky: nejsou dostatečně robustní a jejich použití pro řešení nelineárních problémů je kvůli extrémní výpočetní náročnosti optimalizačního procesu velice složitá. V našem příspěvku představujeme postup návrhu experimentů založený na globální citlivosti, která nevyžaduje apriorní odhad identifikovaných parametrů. Namísto citlivosti v jednom konkrétním bodě zohledňuje citlivost modelovaných měření na jednotlivé materiálové parametry s ohledem na jejich zvolený definiční obor, který může být apriori dostatečně široký. Konkrétně uvažujeme globální citlivost vyjádřenou pomocí Sobolových indexů. Jejich výhoda spočívá v možnosti jejich analytického výpočtu z koeficientů polynomiálního chaosu, který postavíme jako aproximaci jednotlivých modelovaných složek měření. Použitím polynomiální aproximace modelových složek odezvy zároveň obejdeme problém výpočetní náročnosti celého optimalizačního procesu při hledání optimálního návrhu robustního experimentu. Celá metoda je ilustrována na jednoduchém příkladu lineárního nestacionárního vedení tepla na čtvercové oblasti v homogenním ortotropním materiálu. Cílem úlohy je navrhnout umístění tří sensorů pro identifikaci tepelné kapacity a tepelných vodivostí v hlavních směrech při uvažování nejistoty v předepsaném zatížení teplotním tokem na hranicích domény, nepřesnosti v navrženém umístění sensorů a experimentální chyby měření teploty v senzorech.

# Mesh adaptivity and domain decomposition for finite element method

Pavel Kůs

Experience shows large benefit of adaptive mesh refinement on the efficiency of finite element calculations. Adaptive algorithms are, however, usually designed for single processor computations only limiting its use for large-scale scientific calculations, which are nowadays usually carried out using large supercomputers with distributed memory and suitable parallel algorithms. The use of adaptivity algorithms on such architectures is not straightforward. In this presentation we will revisit a particular variant of adaptivity algorithm in more detail and then discuss its use within the frame of the domain decomposition method.

## Kombinovaná Broydenova metoda pro řešení soustav nelineárních algebraických rovnic

Ladislav Lukšan, Jan Vlček

Pokud dokážeme účinně počítat Jacobiovy matice, používá se k řešení soustav nelineárních algebraických rovnic Newtonova metoda. Je však třeba v každém iteračním kroku rozkládat Jacobiovu matici, což vyžaduje  $O(n^3)$  aritmetických operací. Broydenova metoda, která aktualizuje QR rozklad Jacobiovy matice, k tomu potřebuje pouze  $O(n^2)$  aritmetických operací. Pro větší úlohy je tedy výhodné používat Broydenovu metodu ve většině iteračních kroků a Newtonovu metodu pouze k zajištění globální konvergence. V příspěvku uvádíme novou velmi účinnou Broydenovu metodu, která ve spojení s Newtonovou metodou dává globálně konvergentní algoritmus, jehož kvality jsou doloženy řadou numerických experimentů.

# **Efficient humanless design approach: Bayesian optimization methodology for multidisciplinary design optimization**

**František Mach**

Mathematical optimization is pervasive in the most of the engineering problems. From practical point of view, real problems are computationally very expensive and enormous effort has to be exerted to find the best available values of the set of objective functions. Apart from the complexity of the optimization problem, huge attention has to be paid to address uncertainty in the optimization process. Nowadays, one of the promising optimization techniques is the Bayesian optimization, which seem to be the cutting edge in the current state-of-the-art approaches. The fundamentals of this methodology is presented and discussed from general viewpoint. All theoretical assumptions are verified by numerical experiments with the artificial test functions and also tested on practical engineering optimization problems.

## **On Model-Based Design of Photobleaching Experiments**

**Ctirad Matono**

The talk is focused on the so-called model-based design of experiments and aims at presenting both interesting and practically useful results in this field. In order to provide an illustrative example, we took the FRAP (Fluorescence Recovery After Photobleaching) experimental technique applied to study mobility of photosynthetic protein complexes in the Institute of Microbiology CAS, Třeboň. Starting with the simplest formulation of the single parameter estimation problem for the Fick diffusion equation, we reached rather surprising results, e.g., ill-posedness of the problem when the diffusivity can vary in time, lotus-like plot for the optimal data space selection, or Disk vs. Annulus – alternating winners of the competition for the best bleach topology.

# Matematický model výroby kompozitu a výpočet trajektorie průmyslového robota

Jaroslav Mlýnek

V článku je popsán matematický model výroby kompozitu. Polyuretanový 3D rám s kruhovým průřezem je připevněn ke koncovému efektoru robota. Rám postupně prochází navíjecí hlavou a na jeho povrch jsou navíjeny 3 vrstvy uhlíkových vláken. Důležitou podmínkou dosažení potřebné kvality kompozitu je zajištění správných úhlů návinu vláken jednotlivých vrstev. Za účelem splnění uvedených podmínek je proveden výpočet potřebné trajektorie koncového efektoru robota užitím maticového počtu. Trajektorie je stanovena na základě určení diskrétní množiny hodnot „tool-center-point“ (stanovení transformačních matic, výpočty Eulerových úhlů rotací) popisujících polohu a orientaci koncového efektoru vzhledem k základnímu souřadnému systému robota. Současně je řešena i problematika optimalizace trajektorie. Úloha je naprogramována v systému Delphi, článek obsahuje praktický příklad stanovení trajektorie.

## Nehladká optimalizace – úvod do metody proximal bundle

Nikola Plívová

V některých optimalizačních úlohách, např. v úlohách kontaktní mechaniky, je cenová funkce nehladká a použití standardní gradientní či Newtonovy metody není možné. V příspěvku popíšeme proximal bundle metodu a její implementaci. Tato metoda je založena na aproximaci Clarkeova zobecněného gradientu s využitím znalosti subgradientů z každého iteračního kroku, což nám umožní volit směr poklesu v dané iteraci a také implementovat ukončující podmínku. Po stručném popisu zmíněné metody ukážeme výsledky numerických experimentů využívajících naši implementaci v Matlabu.

# Experimental Comparison of Second-Order Traffic Flow Models on Traffic Data

Miroslav Vaniš a Jan Prikryl

A key element of microscopic traffic flow simulation is the so-called driver behaviour model, describing the way in which a typical driver interacts with other vehicles on the road. This model is typically continuous and traffic micro-simulator updates its vehicle positions by a numerical integration scheme (Treiber 2014). Motivated by this research, we will present an overview of two selected microscopic car-following models which are frequently used for traffic simulations and evaluate the performance of different numerical integration schemes with respect to predicting real-world traffic data. We will use the SUMO traffic micro-simulator, a popular open-source traffic simulation platform, as a demonstration platform.

# Homogenization and sensitivity analysis for numerical modelling of flows in nonlinear deforming porous media

Eduard Rohan

Homogenization of heterogeneous media with nonlinear effects leads to computationally complex problems requiring updating local microstructures and solving local auxiliary problems to compute characteristic responses. Such a computationally expensive updating procedure can be avoided using an efficient approximation scheme for the local homogenized coefficients, so that the complexity of the whole two-scale modeling is reduced substantially. We consider the deforming porous fluid saturated media described by the Biot model. The proposed modeling approaches are based on the homogenization of the quasi-static fluid-structure interaction whereby differentiation with respect to the microstructure deformation is used as a tool for linearization. Assuming the linear kinematics framework, the nonlinearity in the Biot continuum is introduced in terms of the deformation-dependent material coefficients which are approximated as linear functions of the macroscopic response. These functions are obtained by the sensitivity analysis of the homogenized coefficients computed for a given geometry of the porous structure which transforms due to the local deformation. The deformation-dependent material coefficients approximated in this way do not require any solving of local microscopic problems for updated configurations. Difference between the linear and nonlinear models depends significantly on the specific microstructure of the porous medium; this observation is supported by numerical examples. Links to related issues involving finite deformation and shape optimization in the context of homogenization and porous materials will be presented.

# Goal oriented a posteriori error estimates for discontinuous Galerkin method

Vít Dolejší, Filip Roskovec

We employ the Dual Weighted Residual method (DWR) for estimating computational errors arising from discontinuous Galerkin discretization of nonlinear partial differential equations. Whole computational process is driven by some chosen quantity of interest, expressed in the mathematical language as a functional applied to the solution of the problem (e.g. drag or lift in the airflow simulations). We exploit the information obtained from the linearized dual problem not only for adaptive refinement of the computational mesh, but also to control the algebraic errors. We illustrate the advantages of this algorithm compared to other adaptation techniques on several numerical examples.

# Levinova metoda integrace pro funkce typu black-box

Petra Rozehnalová

Výpočet integrálu z rychle oscilujících funkcí klasickými numerickými metodami může být výpočetně náročné. V tomto případě bývá efektivní použití Levinovy metody integrace. Její nevýhodou je, že je obvykle potřeba znát předpis integrované funkce. Příspěvek popisuje možnosti použití této metody pro funkce typu black-box.



# Matematické modelování svorníků v tunelu

David Runt, Jaroslav Novotný, Jan Pruška

Svorníky jako konstrukční prvky jsou velice často využívány v mnoha podzemních stavbách. Tento příspěvek se zabývá matematickým modelováním svorníků upínaných cementovou zálivkou po celé jejich délce. Pro popsání svorníků byly využity speciální kvadratické svorníkové prvky, které vycházejí z Aydanovy teorie. Ty jsou v modelu dále doplněny isoparametrickými prostorovými prvky pro popis horninového masivu. Pomocí vlastního programu jsem sestavil matice tuhosti a pravé strany výše popsaných prvků. Celý postup byl nejdříve otestován na několika jednoduchých testovacích příkladech a porovnán s analytickým výpočtem. Následně byl proveden výpočet prostorového modelu reálné úlohy, konkrétně charakteristického příčného řezu tunelu Brusnice. Vliv svorníků je patrný z průběhů napětí v okolí výrubu při porovnání s obdobnými výsledky získanými výpočtem bez uvažování svorníků.

## On the variety of Turing patterns

Vojtěch Rybář

Due to the non-linear nature of reaction-diffusion systems, their analysis is highly difficult. There is little known about the final shape of the patterns emerging from the initial equilibria states. This contribution aims to relate large amount of numerical experiments to the existing theory and heuristics for the far from the (initial) equilibria steady state solutions known as Turing patterns.

## A particular smooth interpolation that generates splines

Karel Segeth

We show that the general variational approach called smooth interpolation (first introduced by Talmi and Gilat) covers not only the classical cubic spline but also some other more general ways of spline interpolation. The theory of splines can be based on two different approaches: the algebraic one (where splines are understood as piecewise smooth functions of some form) and the variational one (where splines are obtained via minimization of proper quadratic functionals with constraints). To this end, we choose the system of functions  $\exp(-ikx)$ ,  $k$  being a (multi)index, for the basis of the smooth interpolation space where we measure the smoothness of the result. We also mention the problem of smooth curve fitting (data smoothing) and present a 1D numerical example.

# Implementace TFETI metody v knihovně PermonFLLOP umožňující libovolný počet podoblastí na MPI proces

Radim Sojka

Implementace metody rozložení oblasti TFETI v naší knihovně PermonFLLOP dosud dovozovala zpracovávat pouze jednu podoblast na MPI proces. Modifikace této implementace nyní umožňuje jednomu procesu přiřadit libovolný počet podoblastí. Zvětšení počtu podoblastí při zachování diskretizačního kroku zmenšuje číslo podmíněnosti TFETI operátoru a tím snižuje počet iterací TFETI metody. Dále pak klesá dimenze matice tuhosti pro jednotlivé podoblasti a tím i náročnost její faktorizace a následných dopředných a zpětných substitucí. V neposlední řadě tato modifikace umožňuje hybridní paralelizaci (MPI+vlákna). Omezujícím prvkem se pak stává řešení hrubého problému, jehož velikost je úměrná počtu podoblastí.

## Shape optimization for Stokes problem with stick-slip boundary conditions

Jan Stebel

We consider the problem of finding an optimal shape of a domain occupied by a viscous fluid. A part of the boundary represents a solid wall to which the fluid may or need not adhere depending on the magnitude of the shear stress. Such model describes e.g. hydrophobic or microscale surfaces. The existence of an optimal shape is proved. Moreover, a regularized-penalized problem is formulated and it is proved that its solutions converge to the solution of the original shape optimization problem. Finally we present an approximation of the problem and numerical results. This is a joint work with J. Haslinger and R.A.E. Mäkinen.

# **On incremental and truncation methods in limit analysis of elastic-perfectly plastic bodies**

**Stanislav Sysala**

The contribution is concerned with guaranteed and computable bounds of the limit (or safety) load, which is one of the most important quantitative characteristics of elastic-perfectly plastic models. We introduce two innovative ideas for getting such bounds. The first idea is based on the fact that limit analysis is much simpler for models with bounded yield surfaces. In such a case, a guaranteed and easily computable upper bound of the limit load is derived. Based on this fact, the truncation method is suggested for unbounded yield surfaces. The second idea is related to the incremental method of limit analysis. Instead of the standard load parameter, we suggest to control the loading process through another quantity representing the work of external forces. The mutual relation between these control parameters leads to other estimates of the limit load. Both ideas are independent of type of discretization. For the standard finite element method, we introduce several convergence results. We illustrate the new techniques on numerical examples including the von Mises and the Drucker-Prager yield criteria. This is a joint work with J. Haslinger and S. Repin.

# **An introduction to task-based programming models**

**Jakub Šístek**

This will be an introductory lecture about the concept of task-based programming models. The idea behind these models is splitting an algorithm into smaller units of work called tasks. By defining interdependencies among these tasks, one constructs a directed acyclic graph (DAG) of the algorithm, in which vertices represent tasks and edges their dependencies. A dependency is created when one task needs data from another task, and consequently, it requires the previous task to complete before starting. The DAG is passed to a runtime scheduling system, which uses the information about the underlying hardware to decide which task to schedule at which nodes and cores to automatically optimize the parallel execution of the algorithm while satisfying all data dependencies. Recent examples of runtime systems include OpenMP, StarPU, OmpSs, QUARK, PaRSEC. Their use will be shown on PLASMA and DPLASMA, two libraries for numerical linear algebra with dense matrices from the Innovative Computing Lab at the University of Tennessee.

# Implementace řešiče Navierových–Stokesových rovníc pomocí knihovny G+Smo

Jan Šourek

Příspěvek se zabývá implementací řešiče Navierových–Stokesových rovnic, popisujících proudění nestlačitelné tekutiny, založeného na diskretizaci rovnic metodami isogeometrické analýzy s využitím B-spline bázových funkcí. Samotná implementace v jazyce C++ využívá nástroje open-source knihovny G+Smo. V rámci příspěvku bude popsán způsob implementace řešiče, paralelizace některých jeho částí a další využití přístupy.

## On solving linear systems arising from Shishkin mesh discretizations

Petr Tichý

We consider a convection-diffusion boundary value problem (1D, convection dominated) with Dirichlet boundary conditions. Because of the occurrence of boundary layers in the solution, such problems are difficult to solve numerically. Standard discretization techniques typically cannot resolve the layers and have to be stabilized in order to yield an acceptable numerical solution. Here we consider discretizations using a Shishkin mesh, which clusters mesh points in the layer instead of putting them equidistantly over the whole region, leading to linear algebraic systems with highly nonnormal matrices. In this talk we are interested in solving such systems. We present and compare results for two solvers, the GMRES method and the multiplicative Schwarz method.

# **Výpočtové modelování tepelné spotřeby budov s řízenou vnitřní teplotou**

**Jiří Vala**

Materiály, konstrukce a technologie současného stavebnictví zpochybňují tradiční výpočet roční tepelné spotřeby budovy, založené na kvazistacionárním odhadu tepelného odporu obálky budovy, případně funkčních částí budovy s garantovanou teplotou. Celková důkladná fyzikální analýza, založená na uplatnění principů termodynamiky a vhodných konstitutivních vztahů pro jednotlivé materiálové vrstvy i vzduch v místnostech, není realistická kvůli stochastickému charakteru fyzikálních procesů, nutnosti identifikace mnoha materiálových charakteristik, stěží předvídatelnému chování uživatele i finančním možnostem investora. Z nabízejících se kompromisních řešení se příspěvek soustředí na zjednodušenou formulaci dynamického chování budovy jako nelineárního tepelného systému, vycházející z analogie s řešením elektrických obvodů. V numerickém řešení se uplatní metoda konečných prvků, metoda přímků a spektrální analýza diferenciálních operátorů. Praktická implementace je provedena v MATLABu.

# **On finite element approximation of flow induced vibration of an elastic structure**

**Jan Valášek**

The fluid-structure interaction is studied on a simplified model of the human vocal fold. This problem is mathematically described, where the arbitrary Lagrangian-Eulerian method is used in order to solve fluid motion on the time dependent domain. The viscous incompressible fluid flow and linear elasticity models are considered. Then the numerical approximation of the fluid flow and the motion of elastic body are derived with help of finite element method. The whole algorithm is implemented in the in-house developed solver. Numerical results investigating the influence of different inlet velocities are showed.

# Parallel elastic image registration based on the TFETI method using the libMesh and PermonFLOP libraries

Alena Vašatová

Image registration is used whenever we need to extract information from different images. Here we present an elastic registration method focused on medical usage. The spatial relation between the images has to be found within the process called image registration. The related elasticity problems are solved by TFETI, which is a variant of the Finite Element Tearing and Interconnecting (FETI) domain decomposition method for massively parallel numerical solution of elliptic partial differential equations (PDE) with optimal complexity. We use the libMesh library to generate the mesh and input data (FEM matrices, vectors and a mapping from local to global numbering of degrees of freedom). They are then passed to the PermonFLOP library, which prepares additional auxiliary data needed in TFETI and internally calls the PermonQP solver to solve the resulting constrained problem.

## Computational comparison of methods for two-sided bounds of eigenvalues

Tomáš Vejchodský

The standard finite element method provides guaranteed upper bounds on eigenvalues of symmetric elliptic partial differential operators. Computing lower bounds is much more demanding. We will compare three finite element based methods for two-sided bounds of eigenvalues of symmetric elliptic operators. The first method is known as eigenvalue inclusions and it is described in [H. Behnke, U. Mertins, M. Plum, C. Wieners: Eigenvalue inclusions via domain decomposition, Proc. R. Soc. Lond., Ser. A, Math. Phys. Eng. Sci. 456, no. 2003, (2000) 2717-2730]. The second method is based on Crouzeix-Raviart nonconforming finite element method [C. Carstensen, J. Gedicke: Guaranteed lower bounds for eigenvalues, Math. Comp. 83, no. 290, (2014) 2605-2629]. The third one is a combination of the a priori-a posteriori inequalities with complementarity based estimators [I. Šebestová, T. Vejchodský, Two-sided bounds of eigenvalues - local efficiency and convergence of adaptive algorithm, arXiv 1606.01739 (2016) 28p.] We briefly describe all three methods and use them to solve two numerical examples. We compare their accuracy, computational performance, and generality.

# Časové diskretizace pro evoluční úlohy

Miloslav Vlasák

Cílem přednášky je vytvořit přehled technik časové diskretizace a jejich vlastností pro parabolické úlohy. V přednášce začneme od jednoduchých metod typu  $\theta$ -schéma, na kterých vysvětlíme zároveň klíčové vlastnosti - stabilita, konzistence, konvergence. Dále budeme diskutovat metody vyššího řádu, zejména vícekrokové metody a metody typu Runge-Kutta. V závěru pak stručně zmíníme další témata, např. aposteriorní analýzu, úlohy s proměnnou hranicí a exponenciální integrátory.

## Zobecnění metody BNS s omezenou pamětí, založené na blokových aktualizacích BFGS

Jan Vlček, Ladislav Lukšan

Je ukázáno, že podobně jako standardní aktualizaci BFGS, lze variačně odvodit i její blokovou verzi, splňující kvazinevtonovské podmínky pro všechny použité rozdílové vektory a dávající nejlepší možné zlepšení konvergence v jistém smyslu pro kvadratické účelové funkce. I přes řadu zajímavých vlastností není metoda bez úprav vhodná pro obecné funkce, neboť nezaručuje spádovost směrových vektorů. Proto je navrženo zobecnění metody BNS s omezenou pamětí pro nepodmíněnou minimalizaci, založené na blokových aktualizacích BFGS. Algoritmus lze uspořádat tak, aby byl globálně konvergentní pro konvexní dostatečně hladké funkce a numericky efektivní.

# Total least squares problem and its tensor generalizations

Iveta Hnětynková, Martin Plešinger, Jana Žáková

Our contribution is focused on the total least squares (TLS) problem and its extension from matrix to tensor setting. First, we briefly recapitulate some basic notation and concepts of the multilinear algebra. Then we present a few possible generalizations of the TLS definition. We investigate their relations to two standard TLS formulations dealing with linear approximation problems:  $Ax \approx b$ , where  $b$  is a vector (the so-called single right-hand side problem); and  $AX \approx B$ , where  $B$  is a matrix (the so-called multiple right-hand sides problem). Finally, we try to employ tensor TLS formulations in the analysis of solvability of the multiple right-hand side problems, which have not been fully understood yet.

## Numerical Solution of Nonlocal Problems

V. Kučera, A. Živčáková

Classical differential equations are formulated using derivatives of various orders which are local operators, i.e. defined using only local properties of the function. The solution process is then nonlocal, where e.g. a local change of boundary conditions affects the solution in the entire domain or an open subset thereof. However there are equations, where even the problem formulation is nonlocal. A classical example are fractional differential equations. More recently, a nonlocal differential calculus was devised by Gunzburger which gives a description of various nonlocal phenomena such as nonlocal diffusion or convection-diffusion with interesting applications. Efficient solution of such problems is very challenging. Our interest in this subject originally comes from the solution of a model of flocking dynamics using the discontinuous Galerkin method.