Computer Networks

[Course description and aims]

This course will equip you with the necessary knowledge and skills to develop fast algorithms for numerical methods in scientific computing. We will cover finite difference and finite element methods along with direct and iterative methods to solve the resulting linear systems. We will also learn about integral formulations and methods to solve them such as boundary element methods and particle-based methods. Each class will start out with a real world example of the state-of-the-art application for each technique, before explaining the fundamental theory behind these methods.

[Student learning outcomes]

By the end of this course, students will be able to

1. Use finite difference or finite element methods to discretize a continuum field
2. Use molecular dynamics or smooth particle hydrodynamics to simulate a particle field
3. Understand the characteristics of parabolic, hyperbolic, and elliptic PDEs and select an appropriate method
4. Choose for specialized cases, techniques such as spectral methods and boundary element methods
5. Explain the significance of dense and sparse linear solvers, both direct and iterative
6. Understand advanced preconditioning techniques such as multigrid and FMM

[Keywords]

Finite difference methods, Finite element methods, Spectral methods, Boundary element methods, Smooth particle hydrodynamics, Particle mesh, Weighted residual methods, Discretization error, Convergence, Stability, Partial differential equation, Integral equation, Initial condition, Boundary condition, Time integration, Parabolic equation, Hyperbolic equation, Elliptic equation, Sparse matrix, Dense matrix, Eigensolver, Direct methods, Multifrontal methods, Iterative methods, Krylov subspace methods, Preconditioning, Multigrid, Fast multipole method

[Competencies that will be developed]

Specialist skills, Practical and/or problem solving skills

[Class flow]

Two-thirds of each class is devoted to fundamentals and the rest to advanced content or application.

	Course schedule	Required learning
Class 1	Discretizing differential equations	Discretize differential equations using forward, backward, and central difference, with high order, and evaluate the discretization error
Class 2	Finite difference methods	Understand stability of low and high order time integration, and use it to solve convection, diffusion, and wave equations
Class 3	Finite element methods	Understand the concepts of Galerkin methods, test functions, isoparametric elements, and use it to solve elasticity equations.
Class 4	Spectral methods	Explain the advantages of orthogonal basis functions such as Fourier, Chebyshev, Legendre, and Bessel.
Class 5	Boundary element methods	Understand the relation between inverse matrices, δ functions and Green's functions, and solve boundary integral equations.
Class 6	Molecular dynamics	Understand the significance of symplectic time integrators and thermostats, and solve the dynamics of interacting molecules.
Class 7	Smooth particle hydrodynamics (SPH)	Evaluate the conservation and dissipation properties of differential operators formed from radial basis functions.
Class 8	Particle mesh methods	How to conserve higher order moments for interpolations schemes when both particle and mesh-based discretizations are used.
Class 9	Dense direct solvers	Understand the principle of LU decomposition and the optimization and parallelization techniques that lead to the LINPACK benchmark.
Class 10	Dense eigensolvers	Determine eigenvalues and eigenvectors and understand the fast algorithms for diagonalization and orthonormalization.
Class 11	Sparse direct solvers	Understand reordering in AMD and nested dissection, and fast algorithms such as skyline and multifrontal methods.
Class 12	Sparse iterative solvers	Understand the notion of positive definiteness, condition number, and the difference between Jacobi, CG, and GMRES.
Class 13	Preconditioners	Understand how preconditioning affects the condition number and spectral radius, and how that affects the CG method.
Class 14	Multigrid methods	Understand the role of smoothers, restriction, and prolongation in the V-cycle.
Class 15	Fast multipole methods, H-matrices	Understand the concept of multipole expansion and low-rank approximation, and the role of the tree structure.

[Textbook(s)]

- "Computational Science and Engineering", G. Strang, Wellesley-Cambridge Press, 2007.

[Assessment criteria and methods]

Evaluation is based on written reports and final report.

[Related courses]

Numerical Analysis (undergraduate), Basic Application of Computing and Mathematical Sciences -Algorithm-

[Prerequisites (i.e., required knowledge, skills, courses, etc.)]

None

[Contact information (e-mail and phone)]

Rio Yokota, rioyokota@gsic.titech.ac.jp, 03-5734-2121

[Office hours]

Contact by e-mail in advance to schedule an appointment.

高性能科学技術計算 (High Performance Scientific Computing)

[講義の概要とねらい]
本講義では科学技術分野で用いられる数値解析手法の原理を理解し，それを高速に解くためのアルゴリズムを習得することを目的とする．有限差分法，有限要素法などの離散化手法の特性を理解し，その結果生じる連立一次方程式の直接解法や反復解法，前処理について学習する．境界要素法や粒子法などの積分方程式型の解法とそれらの高速解法についても学習する．講義の冒頭で最先端の現場で行われているシミュレーションを取り上げ，その手法の根本原理を講義で解説することで意義を明確にする．

[到達目標]
本講義を受講することで以下の能力を習得することができる．

1. 有限差分法，有限要素法を用いて連続場を解析できるようになる．
2. 分子動力学法，SPH などを用いて粒子系の物理現象を解析できるようになる．
3. 放物型，双曲型，楕円型の方程式の特性を理解し，適切な解法を選択できるようになる．
4. スペクトル法や境界要素法などの特殊な離散化手法を理解し，状況に応じて選択できるようになる．
5. 蜜行列・疎行列の直接解法・反復解法のそれぞれの特性を説明できるようになる．
6. 反復解法の前処理，マルチグリッド法について理解し，状況に応じた選択ができるようになる．

[キーワード]
有限差分法，有限要素法，スペクトル法，境界要素法，粒子法，SPH，PM，重み付残差法，離散化誤差，収束性，安定性，偏微分方程式，積分方程式，初期条件，境界条件，時間積分，方物型方程式，双曲型方程式，楕円型方程式，疎行列，蜜行列，固有値解析，直接解法，マルチフロンタル法，反復解法，クリロフ部分空間法，前処理，マルチグリッド法，高速多重極展開法

[学生が身につける力]
専門力，実践力又は解決力

[授業の進め方]
各講義の 2/3 は基礎的内容について，残る 1/3 は発展的応用的内容についての解説に充てる．

	授業計画	課題
第 1 回	微分方程式の離散化	前進・後退・中心差分，高次の差分を用いて 微分方程式を離散化し，誤差を評価できる
第 2 回	有限差分法	時間積分の安定性や高次精度の積分を理解し 移流・拡散・波動方程式を解析できる
第 3 回	有限要素法	Galerkin 法，テスト関数，isoparametric 要素 の概念を理解し，弾性方程式を解析できる
第 4 回	スペクトル法	Fourier・Chebyshev・Legendre・Bessel などの 直交基底関数による離散化の利点を説明できる
第 5 回	境界要素法	逆行列と δ 関数・Green 関数の関係を理解し 境界積分方程式を用いた解析ができる
第 6 回	分子動力学法	時間積分の symplectic 性や熱浴の概念を理解し 分子間に働く保存力の動力学を解析できる
第 7 回	Smooth particle hydrodynamics (SPH) 法	微分演算子の動径基底関数による離散化と その保存性・散逸性を評価できる
第 8 回	Particle mesh 法	粒子と格子の両方の離散化を組み合わせる場合の 離散点からの補間法と高次モーメントの保存法

	授業計画	課題
第９回	密行列の直接解法	LU 分解の原理を理解し，その最適化・並列化 と LINPACK ベンチマークの特徴を理解できる
第１０回	密行列の固有値解析	固有値・固有ベクトルの求め方を習得し対角化 正規直交化の高速化手法を理解できる
第１１回	疎行列の直接解法	AMD や Nested dissection などの並べ替え法と skyline・multifrontal 法の高速化手法を理解
第１２回	疎行列の反復解法	正定値行列や条件数の概念を理解し，Jacobi 法 CG 法，GMRES 法の相違点を理解
第１３回	反復法の前処理	前処理による条件数やスペクトル半径への影響や 前処理された CG 法の効果を理解できる
第１４回	マルチグリッド法	V-cycle における緩和・縮約・補間の役割を理解し 前処理法としての効果を理解できる
第１５回	FMM，H 行列	多重極展開，低ランク近似の概念を理解し 木構造の果たす役割を理解できる

[**参考書**]

- “Computational Science and Engineering”, G. Strang 著, Wellesley-Cambridge Press, 2007.

[**成績評価の基準及び方法**]

小レポート，期末レポートにより評価する．

[**関連する科目**]

数値計算法（学部），計算数理応用–アルゴリズム–

[**履修の条件**]

なし

[**連絡先**]

横田 理央 rioyokota@gsic.titech.ac.jp, 03-5734-2121

[**オフィスアワー**]

メールで事前予約すること．