

数値計算シミュレータ常識のウソ

テクニカルショウ横浜 2010 2/6 出展社セミナー

石飛徳昌 info@SonnetSoftware.co.jp

(有) ソネット技研 <http://www.SonnetSoftware.co.jp/>

1 まえがき

今や数値計算シミュレータはあらゆる創造的業務に不可欠の道具となった。しかししばしば誤った認識がその効果的な選択と活用を妨げる事がある。

2 数値計算の一般的な性質

2.1 分割数あるいは刻み幅

数値計算ではアナログ量を適切な刻み幅で標準化し、有限な精度のデジタル量に量子化して扱う。しばしばこの刻み幅の粗さ、すなわち分割数の少なさに誤差要因が求められるが、それ以外の誤差

- 打ち切り誤差
- 丸め誤差
- 桁落ち

が最小になる最適な分割数が存在する。それゆえ分割数と誤差の関係は一般に図1のようにV字型になることが知られている。[1]

2.2 陽解法と陰解法

一般に、陰解法のプログラミングは複雑だが、小さな計算リソースで解析できる場合が多い。しかし大規模な問題では連立方程式の係数行列の格納に要素数の2乗に比例するメモリが必要で、計算時間は要素数の3乗のオーダーで増加するため、要素数の増加に伴い、必要な計算リソースが急激に増加してしまう。

これに対し陽解法はプログラミングが容易な反面必要な計算リソース非常に大きくなる場合が多い。しかし大規模な問題に対しては、要素数に比例したメモリと時間ステップ数に比例した計算時間の増加で済む。

問題規模と使用可能な計算リソース、そして問題の性質によって不適切な解法では解が得られないか、不経済な結果になる場合がある。

3 商用シミュレータ

3.1 分割数と誤差

商用シミュレータでは、内部で数値積分、数値微分、微分方程式、連立方程式などの数値計算を多量に繰り返しているため、分割数に対する誤差の変化は単純ではない。図2のように適した分割数の範囲が狭い場合や、分割数に対して誤差が振動する場合もある。使用する上では、この曲線がなだらかで、分割数に対する変化が単調なシミュレータが好ましい。

3.2 アルゴリズムの選択と計算時間

計算リソースが非常に小さかった時代から長い実績のある商用シミュレータでは陰解法が使われていることが多い。使用者の工夫次第で非常に早く計算できる場合が多いが、無闇に大規模な問題を与えると極端に遅くなる。

4 むすび

商用シミュレータには今後も多機能でリアルな表現やユーザーインターフェースが実装されていくであろう。しかしその表面的な表示やインターフェースだけにとらわれず、数値計算手法の基本的な性質を理解して選択し利用することが必要であろう。[2]

参考文献

- [1] 伊理・藤野, “数値計算の常識,” ISBN4-320-01343-3, 共立出版, 東京, 1985.
- [2] 石飛, “マイクロ波シミュレータの発展傾向と選択について,” 信学技報, Vol.MW98, No.282, pp. 23 - 30, Sep. 1998.

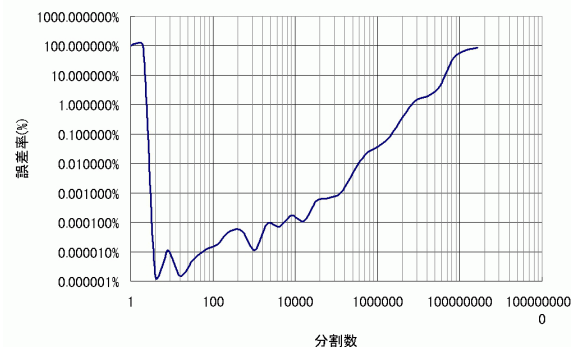


図1 \cos^2 の数値積分誤差の一例
積分範囲 $\pi \sim \pi$. f90 fortran を使用

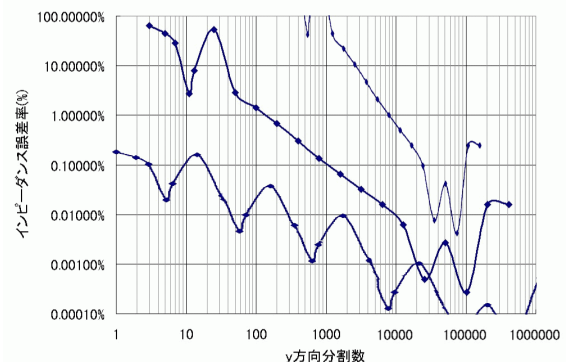


図2 商用シミュレータの分割数に対する解析誤差の例
複雑な計算手法では、許容される分割数の範囲が狭い場合や、分割数に対して誤差が振動する場合もある。