

工学シミュレーションの品質保証と信頼性提示 - 国内外の動向と ASME V&V 概説 -

櫻井英行*1

V&V (Verification & Validation) に代表される工学シミュレーションの品質保証と信頼性提示について、国内外の動向を紹介し、基本的な考え方を示す。V&V には品質 V&V とモデル V&V の二つの流れがある。前者については、日本計算工学会、英国 NAFEMS、原子力安全推進協会、後者については、米国機械学会 (ASME)、米国航空宇宙局、日本原子力学会の活動や文書等について簡単に紹介する。そして、V&V のガイドラインとして最も広く認知されている ASME V&V10 を例に、モデル V&V の考え方を紹介し、バックエンドにおける信頼性提示に関する私見を述べる。

Keywords: V&V, Verification and Validation, 検証と妥当性確認

1 はじめに

こんにちは、V&V (Verification & Validation) が代名詞となって、工学シミュレーションの品質と信頼への関心は、学界・産業界を問わず、非常に高いことは周知のとおりである。V&V には、検証と妥当性確認という訳があてられており、次の様な英語表現で両者の違いを表すことがある。

Are we solving the problem right?

Are we solving the right problem?

似たような文だが、*right* の位置で意味が大きく異なり、直訳すれば、「問題を正しく解いているか?」、「正しい問題を解いているか?」となる。前者が検証、後者が妥当性確認に対応する。しかし、実際の V&V は、これほど単純ではなく、また、画一的なものもない。本再録では V&V の二つの大きな流れとそれらの国内外の動向をまず簡単に紹介する。続いて、V&V のガイドラインとして、世界的に最も認知度の高い米国機械学会 (AMSE) の考え方を示し、バックエンドの工学シミュレーションの信頼性提示の考え方について私見を述べる。以降は、工学シミュレーションを数値解析、あるいは、単に解析と呼ぶこともある。

2 二つの V&V と国内外の動向

文献[1]では、V&V を二つに大別しており、それぞれ品質 V&V とモデル V&V と呼んでいる。前者の品質 V&V は、解析プロセスの品質管理を対象としている。受託解析などにおいて、顧客の要求仕様を満足しているかを確認するための業務的な V&V と言える。我が国では、原子力分野での取り組みが先駆的であり、日本原子力技術協会が整備したガイドライン[2]がある。現在は、原子力安全推進協会に引き継がれている[3]。本誌の読者の多くは、これらのガイドラインには明るいと思われるので、web から自由にダウンロード可能であることを付記することに定める。

品質 V&V については、日本計算工学会 (JSCES) も精力的に取り組んできた。三つの標準書 (S-HQC001~3) [4,5,6]を整備しており、S-HQC001 と S-HQC002 の初版は 2011 年である。最新の S-HQC001 第 3 版では ISO9001-2015

Quality assurance and credibility assessment of numerical simulation - Domestic and overseas circumstances, and an outline of ASME V&V by Hideyuki SAKURAI (hideyuki.sakurai@shimz.co.jp)

*1 清水建設株式会社 技術研究所

Institute of Technology, Shimizu Corporation

〒135-8530 東京都江東区越中島 3-4-17

本稿は、日本原子力学会バックエンド部会第 34 回「バックエンド」夏期セミナーにおける講演内容を加筆・修正したものである。

への対応がなされた。S-HQC002 も第 2 版において内容が拡充されている。これらは、ISO9001 に準拠しており、原子力分野にも十分適用可能であるが、JSCES 標準の特筆すべきは、非常に柔軟な使用を許諾している点であろう。図 1 は、pdf 版の表紙に付記される内容である。これを基にして、各企業、あるいは企業の各部門等の品質方針に応じて独自の標準を策定し、社内や事業所内に展開できることが分かる。

海外では、英国の非営利団体 NAFEMS (National Agency for Finite Element Methods and Standards) [7]が、1980 年代から工学シミュレーションの品質保証の問題に取り組んでおり、品質 V&V に関する膨大な文書を発行している。web を経由して容易に購入することも可能であり、日本の企業から訳本も販売されている。

もう一つのモデル V&V は、実現象に対する M&S (Modeling & Simulation) の信頼性確立を対象としたもので、シミュレーション・モデルの予測性能の本質的な評価を行うことが目的である。ASME が精力的に活動しており、世界的な牽引役であると言えよう。次の 6 分野の委員会において、ガイドラインや標準書等の策定、発行、更新のための活動を行っている。

- (1) V&V 10: V&V in Computational Solid Mechanics
- (2) V&V 20: V&V in Computational Fluid Dynamics and Heat Transfer
- (3) V&V 30: V&V in Computational Simulation of Nuclear System Thermal Fluids Behavior
- (4) V&V 40: V&V in Computational Modeling of Medical Devices
- (5) V&V 50: V&V of Computational Modeling for Advanced Manufacturing
- (6) V&V 60: V&V of Computational Modeling in Energy Systems

使用許諾番号: HQC002:2015-### 発効日: 2018 年 xx 月 yy 日
 ・(社)日本計算工学会は本書現版を下記団体に無期限に使用許諾します。
 法人名: 日本計算工学株式会社
 事業所: HQC推進展開事業部 殿
 ※改訂版は別に定める更新料にて都度、導入いただけます。
 ※発効日又は更新日から3年以内は無償で事業所名の変更を承ります。
 ・事業所内に限定した次の使用が許諾されています。
 ①印刷して配布すること ②イントラに掲載すること
 ③所内文書に転載すること ④改変して所内文書として再利用すること
 ※③および④では出展に本書を明記してください。
 ・許諾範囲を逸脱した場合、使用許諾を取り消すことがあります。

図 1 pdf 版 JSCES 標準の使用許諾

このうち、V&V 10 から二つ、V&V 20 から一つの文書が正式に発行されており[8-10]、紙書籍の他に、pdf でも購入できる。後述する V&V の概説は、ASME V&V 10-2006 (以降、VV10) を参考にして記述している。

我が国のモデル V&V としては、日本原子力学会のガイドライン[11]がある。この文書も上述の原子力安全推進協会と同様、活用されている本誌読者は多いと推察する。原子力分野における V&V の基本的な考え方だけでなく、他のモデル V&V の特徴や現在までのモデル V&V の歴史・変遷が解説としてまとめられており、大変参考になる。

原子力同様、一品生産で極限の信頼性が要求される V&V として、NASA (米国航空宇宙局) の技術標準があり、これは web から自由にダウンロード可能である。2016 年の Revision A では、2008 年の Baseline Release から大幅な改定がなされており、Revision A の主目的として記載されている内容が大変参考になるので、原文のまま転載しておく。

The primary purpose of this NASA Technical Standard is to reduce the risks associated with M&S-influenced decisions by ensuring the complete communication of the credibility of M&S results.

以上のほか、今後、具体的な成果が期待される活動として、土木学会の取り組みを紹介しておく。2014 年、土木学会・応用力学委員会は、工学シミュレーションの信頼性向上を図ることを目的とし、「土木分野の数値解析における V&V に関する小委員会」を立ち上げた。活動内容は、①国内外の関連分野の V&V の動向調査と分析、②各材料分野における数値解析の信頼性の現状調査と分析、③各材料分野における V&V の具体的な実施方法の検討、としている。著者もその一員であり、現状は、土木に特徴的な材料である地盤、コンクリートを対象とする WG と不確かさのモデリングを対象とする WG の計三つの WG において、解析だけでなく実験を含めた具体的な検討が行われている。また、土木学会・地震工学委員会も「地盤・構造物の非線形地震応答解析法の妥当性確認/検証方法の体系化に関する研究小委員会」を立ち上げ、2016 年から活動している。

3 モデル V&V の考え方 (ASME V&V 概説)

ここでは、VV10 を参考にしてモデル V&V の要点を解説する。VV10 の中には、数式は一つもない。観念的で具体性に欠けると評されることもあるが、観念的であるがゆえに、計算固体力学を対象としたガイドラインとしながらも、約 20 ページの中にすべての工学シミュレーションを遂行する上で共通して備えておくべきリテラシについて書かれているように思う。一読を強く推奨する。

図 2 は VV10 を参考にしたモデル V&V の流れである。上から順に、まず、実現象に対するモデル化を行い、シミュレーションにより解を得る過程で 2 段階の検証を行う。解析コードの検証とシミュレーションで得られる解の検証である。検証にパスしたモデルにより、目的のシミュレーションを実施して得られた解は、並行して実施している実験結果との対比により妥当性確認を行うことになる。以降、各プロセスを概説する。

3.1 モデリング (Modeling)

モデリングは、着目する実現象に対して、概念モデル (Conceptual Model) → 数理モデル (Mathematical Model) → 計算モデル (Computational Model) の順に行う。概念モデルでは、考慮すべき重要な物理現象を抽出し、実現象の理想化を行い、着目する物理量のシミュレーション結果での正確度の要件等を検討する。数理モデルは概念モデルに基づく偏微分方程式である。計算モデルは数理モデルを FEM (有限要素法) や FDM (有限差分法) などの数値解析法で離散化し、プログラム言語を利用してコンピュータに実装したものである。

モデリングに着手する前には、次の 4 項目が明確に定義されていなければならない。

- (1) 着目する実現象
- (2) モデルの所期の利用目的 (以降、IU : Intended use)
- (3) 評価対象とする物理量
- (4) 妥当性確認の際の正確度の要件

IU は非常に重要であり、VV10 では V&V の構成要素の最上位に位置付けている。IU よって、実現象を理想化するための仮定や着目する物理量、解析結果に対する正確度の要件は異なる。IU が決まっていなければ、何も始まらないということになるが、IU を明確に定義しないまま、解析を実行してしまうことの方が、多いのではないだろうか。

また、近年は、商用コードや公開コードを用い、コードありきでシミュレーションが行われているのが実情であるが、その場合でも、上記の概念モデルからの一連のモデリングは必要である。どのような仮定のもとに、どのような偏微分方程式を扱い、どのような離散化手法を使っているのかを確認しておかなければ、V&V を実施できない。

3.2 検証 (Verification)

検証は、数理モデルに対応する解が、計算モデルによって精度良く正確に得られるかを評価するプロセスである。上流のモデリングで採用した数学モデルが正しいという前提で検証を行う。コード検証 (Code Verification) と解検証 (Calculation Verification) の 2 段階に分かれる。

3.2.1 コード検証 (Code Verification)

コード検証では、計算モデルが正しく計算機に実装され、採用したアルゴリズムが所期の性能を発揮することを確認する。具体的には、次の 2 項目である。

- (1) 計算機に実装したプログラムに間違いがないこと
- (2) 計算アルゴリズムに不具合等がないこと

コード検証は、理論解等の厳密解が得られている問題で行うのが一般的であるが、理論解では単純な線形問題に限られてしまい、完全なコード検証を行うことはできない。近年は、より一般的で非線形問題にも適用可能な方法として、意図的に作った解を満足するベンチマーク問題を構築する方法 (Method of Manufactured Solution : 創成解の方法) [12] も用いられるようになった。しかし、複雑な計算モデルでは、創成解の方法でもすべての因子を検証しきれない。より汎用性の高い方法として、ベンチマーク問題を使って、まったく別の計算モデルで解析した結果との比較を行うコード対コード照査がある。当然のことながら、正解が分か

らない問題を扱うので、比較対象とする計算モデルの信頼性には格段の注意を払う必要がある。とは言え、色々なベンチマーク問題を用いたコード対コード照査の積み重ねによって、比較する計算モデル群が相互に信頼性を高め合うことができるので、大変有用な方法ではある。

商用コードや公開コードを用いる場合、コード検証は必要ないと誤解され、省略されがちであるが、目的のシミュレーションを実施して、十分な精度・正確度の結果を与えるかの性能確認のためのコード検証は必要である。解析対象が複雑な場合は、対象に近い問題、あるいは、単純な問題に分解して行うなどの工夫も必要なる。もっとも重要な性能確認の一つとして、格子収束性（あるいは、メッシュ収束性）が挙げられる。計算モデルの解が、格子サイズを小さくすることにより、どのような特性で正解に収束するかの検証である。これは、後述の解検証の際の離散化誤差推定に役立つだけでなく、モデル化の誤りを炙り出す場合もある[13]。

3.2.2 解検証 (Calculation Verification)

解検証は、解析条件等に誤りがなく、十分な精度・正確度で計算されるかを検証するプロセスである。具体的には、次の3項目を行う。

- (1) 入力データに誤りがなく、十分な精度・正確度で計算されるかを検証するプロセスである。具体的には、次の3項目を行う。
- (1) 入力データに誤りがなく、十分な精度・正確度で計算されるかを検証するプロセスである。具体的には、次の3項目を行う。
- (2) 解析結果の数値誤差の推定
- (3) 出力結果の扱いと図化等に誤りがなく、十分な精度・正確度で計算されるかを検証するプロセスである。具体的には、次の3項目を行う。

(1)と(3)は人為的な誤りがなく、十分な精度・正確度で計算されるかを検証するプロセスである。具体的には、次の3項目を行う。

(1)と(3)は人為的な誤りがなく、十分な精度・正確度で計算されるかを検証するプロセスである。具体的には、次の3項目を行う。

(1)と(3)は人為的な誤りがなく、十分な精度・正確度で計算されるかを検証するプロセスである。具体的には、次の3項目を行う。

(1)と(3)は人為的な誤りがなく、十分な精度・正確度で計算されるかを検証するプロセスである。具体的には、次の3項目を行う。

空間方向の離散化誤差については、分割数の異なる複数のメッシュで解析し、解の収束性から誤差推定を行う方法 GCI (Grid Convergence Index) [12]やアダプティブ FEM で用いられる誤差推定法[14]等を用いることができる。

しかし、地層処分のように、多種多様な材料（地層）で構成される複雑形状の三次元複合領域を対象としなければならない場合、複雑なメッシュの離散化誤差推定に GCI の適用は現実的ではない。また、アダプティブ法でも誤差推定は行えたとしてもメッシュの改善は容易ではない。解検証の結果をトレース可能な形で蓄積し、のちのメッシュ分割戦略に活用できるようにすることが重要である。また、汎用性の高い典型的な条件を設定して、メッシュ分割のガイドラインを整備することも必要であると思われる。

3.3 妥当性確認 (Validation) と不確かさの定量化 (UQ : Uncertainty Quantification)

妥当性確認では、シミュレーション結果を物理モデル(実験)や実現象の計測データと比較して、概念モデリング段階で予め定めた正確度の要件を満足するか否かを判定する。シミュレーション結果を実験結果と比較して評価する場合、「概ね一致した」、「良い一致を示した」といった表現が用いられている論文は少なくないと思うが、そのような曖昧

な表現ではなく、'Yes or No'による明確な合否判定である。要件が満足されない場合は、モデルの修正をすることになる。計算モデルに用いた物性値などのパラメタの見直し、あるいは、線形から非線形といったような概念モデルにまでさかのぼった見直しや妥当性確認の要件の緩和が必要になることもある。このような妥当性確認が成功しなかった場合のモデルの修正については、V&Vを実施する最初の段階で予め決めておかなければならない。

妥当性確認において重要なのが、比較対象の両者に含まれる不確かさの定量化である。シミュレーションの不確かさには、初期・境界条件の不確かさ等に加え、モデリングの過程での判断や誤りも含まれる。実験にも材料の物性や仕上げのバラツキに加え、計測誤差など、決して小さいとは言えない不確かさが含まれている。そのような不確かさをモデル化して、シミュレーションに取り込み、解析結果に含まれる不確かさを定量化することが重要になる。材料物性値のようなバラツキのデータが存在していれば、モンテカルロ・シミュレーション等によって不確かさの伝搬解析を行って、解析結果の不確かさの定量化が可能になる。しかしながら、地層処分では、対象となる地層は、どんなに精密に地質調査を行ったとしても地下の三次元地質構造や物性値の分布・バラツキなどを完全に知ることはできないし、不確かさの程度すら分からない場合も少なくない。初期・境界条件等の設定も非常に難しい。V&Vの初期段階で、考えうる不確かさの要因を可能な限り抽出し、まず、その特徴づけを行うことが重要である。その際、PIRT (Phenomena Identification and Ranking Table) [15]のような手法を使って整理することにより、V&Vがより合理的・戦略的になるとと思われる。不確かさによっては、専門家の判断に頼らざるをえないものや定性的にしか分かりえないものがあるので、V&Vのプロセスのループの中でPIRTの修正を繰り返す必要もある。

3.4 予測 (Prediction) と信頼性 (Credibility)

実験や実現象との比較による妥当性確認ができない、あるいは、行っていないシミュレーション結果を V&V では単に予測 (prediction) と呼ぶことがある。地層処分の場合、多くのシミュレーション結果は妥当性確認が困難、あるいは不可能な予測結果である。よく、「妥当性確認のできない結果はどうしたらいいのか?」という言葉を目にするが、できないものはできないので、どうしようもない。しかし、対比する実験や実測結果がなく、結果の妥当性を「確認」することはできなくとも、予測結果の信頼性を裏付けるデータ (evidence) を積み上げて提示し、それらを総合して工学的に「信頼に値するかを評価」することは可能である。その評価をモデル V&V では、妥当性確認と呼ばないだけである。

一方、品質 V&V では、妥当性確認に柔軟な考え方を取り入れており、例えば、文献[5]では、実験との比較だけでなく、上述のコード対コード照査等による独立した手段との比較も妥当性確認に含めている。受託解析の場合、契約の中に実験が含まれていなければ実験を行う必要はないので、比較のための実験データがないのは当然である。モデ

ル V&V は、実現象との比較のみを妥当性確認とすることに固執すぎるという指摘もあるが、個人的には、実現象との対比ができなければ妥当性確認と言わないというのは大変分かり易いと感じている。著者は、妥当性確認の説明に料理を度々引用する。一流のシェフが、どんなによくできたレシピを使って作った料理であっても、本当においしいか否かは食べてみなければ‘確認’できないのである。しかし、できあがった料理を食べなくとも、食材や調味料、調理の様子を見ていれば(検証)、だれもが間違いなくおいしいと思うはずだ。極端ではあるが、妥当性確認なしでも信頼が得られる例とは言えないだろうか。

4 おわりに

シミュレーション結果の信頼性提示のためにやれることの本質はモデル V&V だろうと品質 V&V だろうと変わるはずがない。工学シミュレーションの最大の魅力は、実験や試作による事前検討をできないような現象でも、定量的に予測できる点にあると考える。妥当性確認ができない現象こそシミュレーションに頼らざるを得ない。そして、その信頼性提示のためには、妥当性確認のできる対象で、V&V の結果をトレースできる形式で蓄積し、計算モデルが所期の予測性能を有していることを実証しておく重要であると考える。V&V は妥当性確認ができない予測シミュレーションの信頼性を提示するための方法論であるとも言えるのではないだろうか。

参考文献

[1] 白鳥正樹, 越塚誠一, 吉田有一郎, 中村均, 堀田亮年, 高野直樹: 工学シミュレーションの品質保証と V&V, 丸善出版, (2013).
 [2] 日本原子力技術協会: 原子力施設における許認可申請等に係る解析業務の品質向上ガイドライン, JANTI-GQA-01-第1版(2010).
 [3] 原子力安全推進協会: 原子力施設における許認可申請

等に係る解析業務の品質向上ガイドライン, JAN-SI-GQA-01-第2版(2014).
 [4] 日本計算工学会: 日本計算工学会標準「工学シミュレーションの品質マネジメント」第3版, JSCES S-HQC001:2017(2017).
 [5] 日本計算工学会: 日本計算工学会標準「工学シミュレーションの標準手順」第2版, JSCES S-HQC002:2015(2015).
 [6] 日本計算工学会: 日本計算工学会標準「学会標準(HQC001&002)事例集」, JSCES-HQC003:2015(2015).
 [7] <http://www.nafems.org/>
 [8] The American Society for Mechanical Engineers: ASME V&V 10-2006, Guide for Verification and Validation in Computational Solid Mechanics(2006).
 [9] The American Society for Mechanical Engineers: ASME V&V 10.1-2012, An Illustration of the Concepts of Verification and Validation in Computational Solid Mechanics(2012).
 [10] The American Society for Mechanical Engineers: ASME V&V 20-2009, Standard for Verification and Validation in Computational Fluid Dynamics and Heat Transfer(2009).
 [11] 日本原子力学会: 日本原子力標準「シミュレーションの信頼性確保に関するガイドライン: 2015」, AESJ-SC-A008:2015(2015).
 [12] Roache, P. j.: Verification and Validation in Computational Science and Engineering, Hermosa Publishers, Albuquerque, NM, (1998).
 [13] 櫻井英行, 山田俊子, 鈴木誠: 拡散方程式の有限要素モデルに対するコード検証, 計算工学講演会論文集, Vol.22, C-10-2(2017).
 [14] 手塚明, 土田英二: 計算力学レクチャーシリーズ②アダプティブ有限要素法, 日本計算工学会編, 丸善(2003).
 [15] 日本原子力学会「シビアアクシデント評価」研究専門委員会: シビアアクシデント評価に関する調査研究報告書(2014).

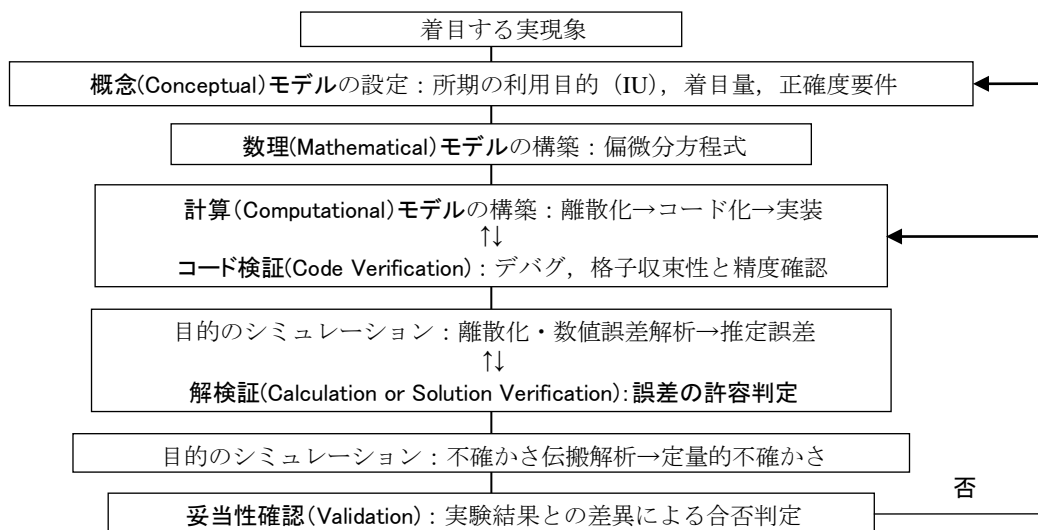


図2 ASME V&V10の流れ