

ASME V&V関連資料

- ROLE OF NON-DETERMINISM IN VERIFICATION AND VALIDATION OF CSM MODELS
- KEY TERMS AND CONCEPTS
- UNCERTAINTY関連文献

芝浦工業大学 システム理工学部
機械制御システム科 長谷川浩志

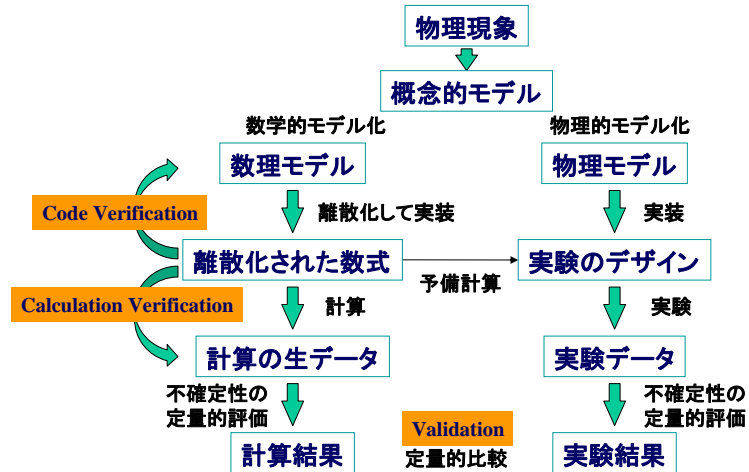
ASME V&V関連資料 今年度計画

回数	日付	内 容			
		NAFEMS	ASME V&V	企業事例	その他
第1回目	2009年6月26日	QMS紹介(吉田)	技術基準紹介(越塚)	-	-
第2回目	2009年9月11日	資料紹介[4]	文献紹介(1), (2), (3) (小園、高野)	講演(2件)	
第3回目	2009年11月10日		文献紹介(4), (5), (6) (長谷川)		
第4回目	2010年1月7日		文献紹介(7), (8), (9) (渋谷)		
第5回目	2010年春		未定		

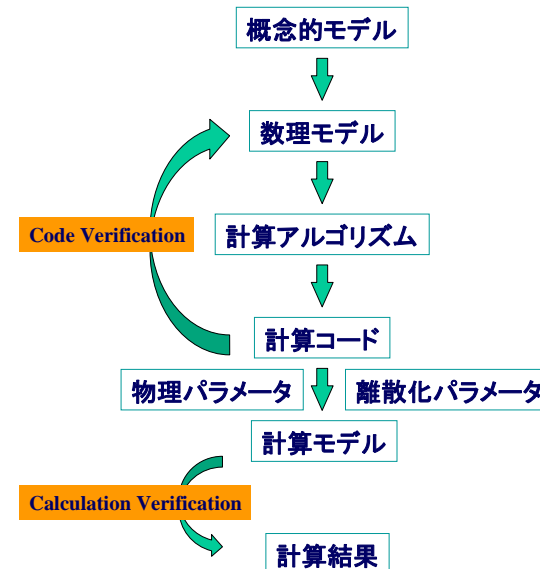


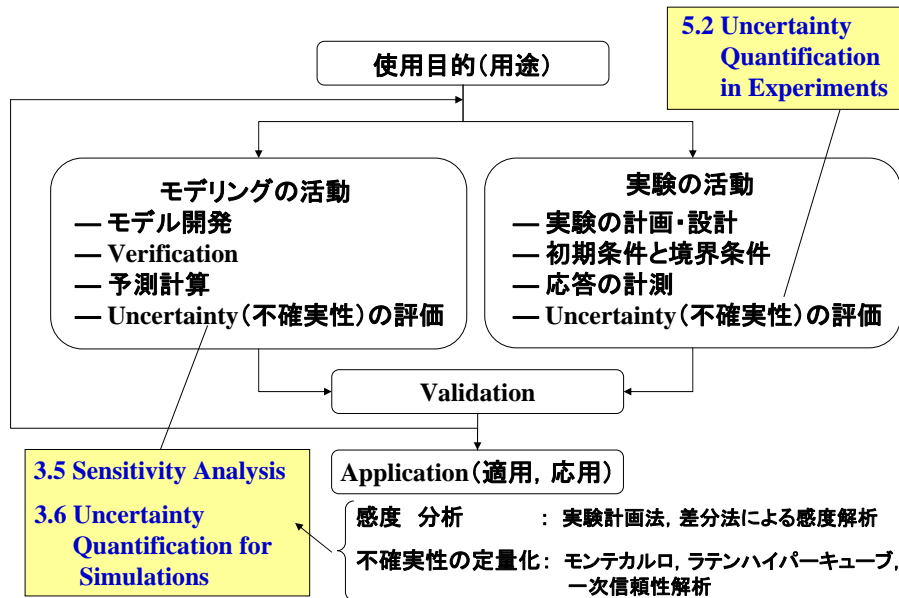
- NAFEMS文献 [1] NAFEMS QSS001 Quality Standard Supplement (2007)
 [2] Quality Management in Engineering Simulation - A Primer for NAFEMS QSS (2009)
 [3] SAFESA Management Guidelines (1995)
 [4] SAFESA Management Technical Manual (1995)
 [5] Management of Finite Element Analysis - Guidelines to Best Practice (1995)
- ASME V&V文献 (1) Benchmarks (J.T.Oden)
 (2) A Posteriori Error Estimation (April 2002) (J.T.Oden)
 (3) Experimental Data Requirements for Validation
 (4) Role of Non-determinism in Verification and Validation of Computational Solid Mechanics Models (July 2001) (B.Thacker and T.Hasselmann)
 (5) Key Terms and Concepts
 (6) Uncertainty関連文献
 (7) Calibration in Computational Mechanics (H.U.Mair)
 (8) Constitutive Model Verification and Validation (May 2001) (L.Schwer)
 (9) Constitutive Model V&V for Softening Materials (July 2001) (D.Simons)
 (10) Method of Manufactured Solutions: Demonstrations (August 2002) (L.Schwer)

V&V Fig.4



V&V Fig.5





題目	ROLE OF NON-DETERMINISM IN VERIFICATION AND VALIDATION OF COMPUTATIONAL SOLID MECHANICS MODELS
著者	Ben Thacker and Tim Hasselman
出典・年	Draft Outline, 7/19/2001
頁数	3頁
目次	-Background -Sources of Non-determinism -Classification of Errors and Uncertainties
概要	非決定論に基づく、計算個体力学モデルに対する不確実性の定義

背景

「モデル」は、コンピュータ・ソフトウェアだけでなく、すべてのインプットモデルと解析コントロール・オプションを含むもの。

不確実性は、物理システムやモデリングの理想化、実験の変動、測定の過ち等の固有なランダム性に起因して起こる。

非決定的分析(モデルの検証)

ステップ1

モデルの定式化や実験データの取得に関する多数のシステムエラーを見つけること、確認すること、除外すること(可能であれば)。

ステップ2

先入観やランダムな「ばらつき」などの残った不確実性の特性を許容範囲内で明確化、もしくは減らす。なお、予測精度の改善をもたらす範囲内でモデルの更新や「キャリブレーション」が必要な場合もある。

重要な不確実性は、認識・定量化されるべきモデルに、関連付けられる。

モデルやその種の経験が蓄積すれば、モデルの更新は、不要、適宜更新、定期的に更新。

モデル固有の不確実性も同様に、予測精度を見積もるために定量化。

ステップ3

予測精度を評価するプロセス。予測精度は、新しい実験データ(モデル更新やパラメータの特徴付けに利用していないもの)との比較により、検証される。

予測精度は、「どのくらいがいいか？」

定量的なモデリングの不確実性に基づくモデル予測の不確実性と比較。

これは、場当たりの比較ではなく、むしろ再現可能な比較量に基づき、明確な(統計上の)手続きに従うべき。

非決定論の原因

背景に示したように、実世界は、つぎの認識から根本的に非決定論である。

1. 実験データ
 - a. 試験装置は、さまざま.
 - b. 据え付けは、さまざま.
 - c. 環境条件は、変化.
 - d. 測定は、さまざま.
2. 現状のシステムと構造
 - a. 設計誤差.
 - b. 材料特性は、さまざま.
 - c. 構築方法は、さまざま.
3. モデル
 - a. モデリングの決定は、作成者が変わる、更新が重なるたびに判断(基準)が変化。この要素も含まれる.
 - b. モデリングツールは、例えば、異なった有限要素法、異なった有限要素解析ツール、同じ有限要素解析ツールの異なったバージョン
 - c. モデリングのリソース(資源)は、さまざまである。異なる詳細度を引き起こす.

エラーと不確実性の分類

エラーは、再現可能な、もしくは確定的なバイアス(偏り、偏見)を引き起こす。そして、少なくとも理論的には、エラーを減らす、もしくは排除することができる。不確実性は、単純化できる、できないにも関わらず、非決定論的影響を与える。

1. 不確実性
 - a. 単純化できない不確実性
 - i. 固有のばらつき(変動)は、モデル化された物理システムに関係する.
 - ii. ばらつきや偶然の不確実性といわれる.
 - iii. 確率論は、単純化できない不確実性を適切にモデル化するのに用いられる.
 - b. 単純化できる不確実性
 - i. 不完全な情報が原因である潜在的な欠陥。例えば、知識不足、物理プロセスに対する乏しい理解、不明確な定義、故障モードの仕様記述の不備など
 - ii. 知識や認識による不確実性といわれる
 - iii. 存在するかもしれないし、しない可能性もある.
 - iv. 確率論の適用が一般的であるが、非確率的、非決定性理論は、さらに適切ともいえる.

2. エラー – 知識の不足による認識欠如

- a. 認識エラー
 - i. 事例(プラクティス)内では定量化できないと思われるが、検出され、原理内で定量化できるエラー
 - ii. 大間違いやミス: これらのエラーを検出し、取り除くために利用する手続き方法
(質のコントロールと再考, etc.)
- b. 未認識のエラー
 - i. 検出できないエラー(検出できない大間違いやミスを含む)

不確実性の定義

- 原理内の未認識のエラーは、不確実性よりもむしろエラーとして区分される。
- 不確実性の予測と観測した振る舞いの統計的な差異に基づき、その場限りのやり方で定量化するならば、それは、不確実性に関係する。
- 不確実性は、認識エラーが原因ではなく、すべてのばらつきを含めたあらゆる状況に対応できるもの「catch-all」として用いる。

題目	題目なし KEY TERMS AND CONCEPTS (仮題目)
著者	
出典・年	
頁数	7頁
目次	-KEY TERMS AND CONCEPTS -PARADIGM FOR SYSTEM THEORY, SIMULATION DEVELOPMENT, AND V&V -OBSTACLES TO QUANTIFICATION OF SIMULATION FIDELITY AND VALIDITY -ENDURING ISSUES IN M&S FIDELITY AND VALIDITY QUANTIFICATION
概要	用語とコンセプトを全体的な視点で表現するために、どのように体系的な理論(system theory, 現実の把握)やシミュレーションが展開されているか、体系的な理論とシミュレーション開発の関係、さらに、どのようにV&Vに関連するかという理論的枠組みを提案する。

2つの基本的な用語は、詳細度 (Fidelity) と妥当性 (Validity)
この2つの用語を関連付ける指示・参照 (Referent)



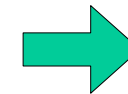
適切に取り扱うために

「エラー」と「確率変動」の両方を伴う不確実性の理念を扱う必要がある。

これらの用語とコンセプトを全体的な視点で表現するために、どのように体系的な理論 (system theory, 現実の把握) やシミュレーションが展開されているか、体系的な理論とシミュレーション開発の関係、さらに、どのようにV&Vに関連するかという理論的枠組みを提案する。

Fidelity (詳細度) と Validity (妥当性):
モデルとシミュレーション (M&S) の Verification (検証), Validation (確証), Accreditation (認定) (VV&A) の根本的な概念。しかし、筆者らは、これらの定義と指示対象のいずれも、VV&Aの定義として、適切、もしくは広く受け入れられているとは思っていない。

理由は、M&SのFidelityとValidityの数量化する能力をあまり進展できなかったこと。



以降の定義を適用

Simulation Interoperability Workshop (SIW) の Fidelity study group によって作り上げた Fidelity の本質的な定義

Fidelity:

モデルもしくは、シミュレーションが
- 実世界のオブジェクトの状態と振る舞い, or
- 実世界のオブジェクト, 特性, 状況の認識, or
- 選んだスタンダードの認識 (測定, もしくは認知可能な方法, モデルやシミュレーションの現実性の規準, 信頼性の範囲で) を再現している度合い。

- 一般に、計測、スタンダード、もしくはその評価や記述に利用する視点で述べられるべき
- Fidelityは、実世界とM&Sの表現の親密性(近さ)に対する絶対的な尺度
- アプリケーション側の要求では変化しない。

Defense Modeling and Simulation Office (DMSO) webサイトの M&S の用語説明

Fidelityを「実世界と比較されるとき表現の正確さ」と定義

「正確さ」は、パラメータと結び付けられ、要因が表現した範囲と、これらの要因(「正確さ」が一般的に適用される)の表現の質を明示する。

よって、この定義を利用することがもっと良さそうに思われる。

Validity

1. モデルやシミュレーションの表現能力に関する具体的なアプリケーションや特定のシミュレーションに十分に合う推論(infer),推定(deduce), もしくは計算の質.
2. 現実とM&Sの表現の親密性(近さ)に対する相対尺度.
3. 表現が意図する狙いに十分に近いかどうかで決定される.

なお、表現のValidityは、アプリケーション側の要求で変化する。

ゆえに、M&Sの表現に対するFidelityが不変であった場合、1つのアプリケーションにとっては有効でも、他の場合には有効とはいえない。

この極めて重要な概念が、しばしば誤解される。

DMSOのWebサイトのM&S用語説明でのValidityのための定義は、データ品質にだけ関係している。よって、この論文にとっては適切ではない。

我々は単純な辞書のような定義を、不確実性、エラー、ばらつきのために選ぶ

Referent(指示・参照)

1. シミュレーションしている「もの」についての知識の骨格を体系化
2. シミュレーション内で、表現されている「もの」から導出されたスタンダード
3. M&S表現の正確さを背景に評価されたスタンダード

基本的に、SIW fidelity研究グループの考えを発展させたReferentの定義。

DMSOのWebサイトのM&S用語説明: Referentのための定義はなし。

FidelityのReferent:

- M&Sで表現された対象についての完全な情報を集めたもの。

ValidityのReferent:

- M&Sのために用いた方法を含めなければならないので、より複雑になる。

これは、ValidityのReferentにおいて、システム理論とテスト/実験データの一部を無視できる。

例えば、物理学の講義のはじめには、学生に機械エネルギーとモーメントの原理を明快に説明するために、摩擦を無視する。

教育的には重要であるけれども、ValidityのReferentにとって妥当なものの選択を困難にする。

ValidityのReferentには、様々な考え方がある。

V&V Symposium at the US National Congress on Computational Mechanics (August 2001)では、半分以上の論文でシミュレーションの不確実性とエラーを取り上げている。

NISTアプローチ:

不確実性は、①統計的に記述できるもの、②他の手段で記述されなければならない

Sandia National LaboratoriesのASCI V&V, CFDを対象としたAIAAのGuideなど:

不確実性(プロセスや項目の固有のばらつきにより引き起こされる)からエラー(既知もしくは、理解できる要因によって引き起こされる不確実性)を分離

論理的限界から来る不確実性:

論理的な限界から、確率的なばらつきの存在を否定する (Jaynes, [8])

Uncertainty (不確実性) — 確実にわからないこと.

これは、不確実の領域で、情報やデータの確からしさと一緒に取り扱えないことを意味する。

観察と測定の前について、エラーとばらつきの組み合わせに起因する不確実性を含む。

不確実性は、観察環境についての完全な知識の欠如、バイアス、観察装置の分解能の限界などによって引き起こされる。

論理的限界による不確実性は、M&Sのコミュニティーでは知られていない

Error (エラー)

測定値や計算値と正しい値との違い。エラーは、正確さの逆。

この定義は、様々な要素からのエラーの分離もしない、システムエラーやバイアスと呼ばれるものにも分離しない。

サンプリング・エラー：計測のばらつきによって起こるエラー

シミュレーション結果で、エラーと同様にReferentと関連付けられるエラーは、シミュレーションのFidelityとValidityを定量化するために、明確に定量化しなければならない。

Stochastic Variation or Variability (確率的変動とばらつき)

考慮しているプロセス、項目、システムや環境の固有の変動。ばらつきのために、確率的項目も使用

ばらつきは、考慮するパラメータの前後関係に対して、独立しているという点でランダムである。

一般的には、量のレベルを超えた原理を取り扱うとき、変動プロセスは、プロセス、項目、システム、あるいは環境をばらつきの表現に関する統計的な項目として記述する。

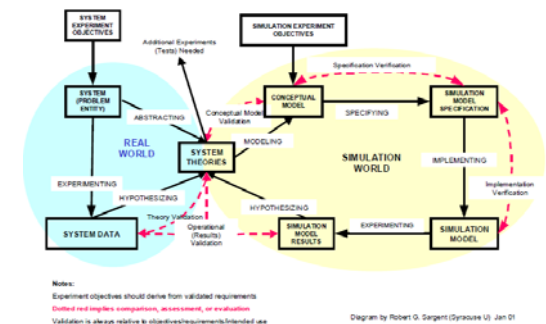
このようなパラメータのM&Sの表現は、通常、分布関数やルックアップテーブルなどを必要とする。

ばらつきについての十分な情報を伴い、ばらつきに由来するプロセス、項目、システム、あるいは環境についての実用的な記述は、明らかにできる。

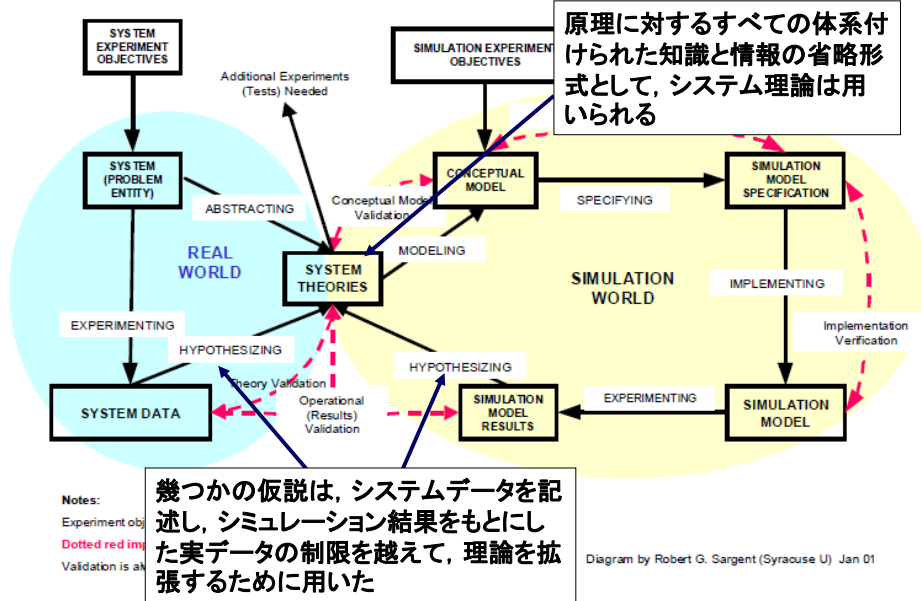
システム理論、シミュレーション開発、V&Vのためのパラダイム

- ① どのようにシステム理論を展開するか、
- ② 実験、テスト、観測、データから何を引き出すか、
- ③ どのようにシミュレーション開発が進むのか、V&Vは、どこに適用できるのかを示す。
- ④ システム理論、シミュレーション開発、V&Vがどのように影響し合うのか

新しく特定するための仮説と追加のテスト、理論に対する要素の確認(もしくは否定)が必要なデータを通じて、把握し、展開することを示す。



KEY TERMS AND CONCEPTS(14/20) < 25 >

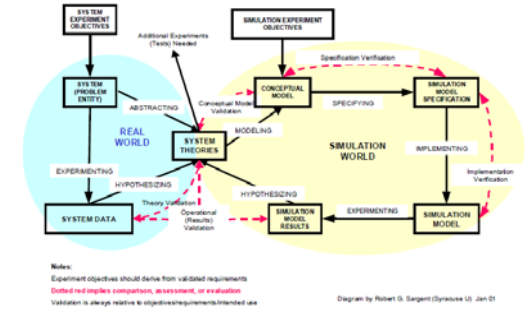


幾つかの仮説は、システムデータを記述し、シミュレーション結果をもとにした実データの制限を越えて、理論を拡張するために用いた

KEY TERMS AND CONCEPTS(15/20) < 26 >

Verification (検証) は、使用目的に関連する
 Validity referent は、使用目的によって、fidelity referent を調整する。

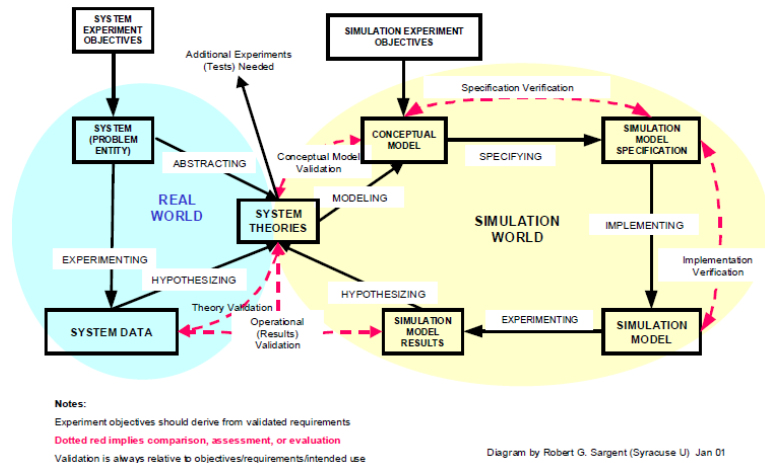
使用目的は、シミュレーションの概念モデルがモデルに対する要求を詳細設計プロセス内(シミュレーションをするソフトウェア、ハードウェア、ネットワーク、システム、装置)に変換することで、シミュレーション開発の方法を構築できる。



まず、Validity referentとして概念モデルを作成する。

KEY TERMS AND CONCEPTS(16/20) < 27 >

概念的な検証と結果の検証は、システム理論(表現された主題を理解する)と関連付けなければならない。しかしながら、結果検証もまた、システム理論を構築するのに利用可能なシステムデータと関連付けなければならない。

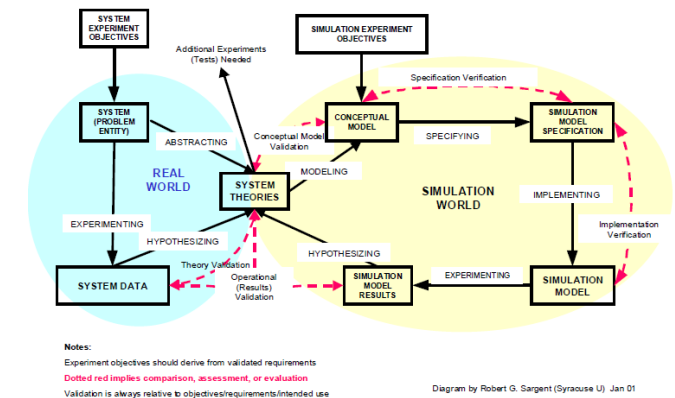


KEY TERMS AND CONCEPTS(17/20) < 28 >

理想的なシステム理論は、完全にすべての利用可能なシステムデータと関連付けられる。

ただ、なかなか関連づけられない

結果の検証は、シミュレーション結果とシステム理論とシステムデータの両方を比較しなければならない。



シミュレーションのFidelityとValidityの定量化に対する障害

シミュレーションのFidelityとValidityを定量化する取り組みを失望させる4つの検証俗説を示す。

これらの俗説は、データとシミュレーション結果の間の合意が(1つ、もしくは少量のサンプルサイズで、シミュレーションした状況にまったく対応していない状況)検証と同一であるという考えに基づいている。

俗説1:

多数の誤った結論は、シミュレーション結果が実データと関係があり、どれぐらい見せかけや偶然であったとしても、シミュレーションのFidelityやValidityを定量化することを励むことは必要ではない。

俗説2:

V&Vは、V&Vへの確かな投資効果(たとえ、大きいとしても)を考えることなしに、いつも高くつくと思測すること。

← シミュレーションの妥当性を数量化する努力を思いとどませる。

俗説3:

「政治的な」要因、コストの考慮、プログラムの重要性、あるいは他への配慮がM&Sとその結果の利用方法を認める決定を占めているので、V&Vは、無意味である。

俗説4:

シミュレーションの妥当性を定量化することは、考慮した多数のシミュレーションの変動が大きな値となるため、不可能である。

シミュレーションのFidelityとValidityを定量化することを真摯に取り組まないために、しばしば、言い訳としてそれらは使用されるので、本当の障害ではないので、俗説とする。

M&SのFidelityとValidityの定量化の永続的問題

現実の受け入れ

Referentデータが限定(欠落)されているか、あるいは重大な不確実を持っているとき、M&SのFidelityとValidityを定量化する可能性は限定される

現実的な見通し

シミュレーション結果の信頼性に対する根拠が不明確な場合、シミュレーションの正確さをベースにした信頼性のレベルに従い、VV&Aリソースは、限定的に支出される。

説得できるVV&A のビジネス事例の不足

VV&Aに関連したコスト(Referentデータの作成を含む)を計上する方法やその投資効果を割り出す方法に関するモデル(広く受け入れられる)を開発できなかったので、ビジネス事例についてプログラムマネジャーや意思決定者を教育することは難しい。

人材能力

シミュレーションのvalidityを定量化するための統計的、論理的、数学的技術の利用に関するV&Vの人材能力について疑問がある。

題目	Science Based Nuclear Energy Systems Enabled by Advanced Modeling and Simulation at the Extreme Scale
著者	Richard I. Klein ¹ and Paul J. Turinsky
出典・年	Working Draft
頁数	12頁
目次	-Introduction -Background for Modeling Nuclear Energy Systems -Overview of Critical Elements of V&V and Uncertainty Quantification -Critical Issues and Challenges in V&V and UQ
概要	原子カシステムモデリングを通じて、Verification & Validation (V&V), Uncertainty Quantification (UQ), Risk Quantification のためのフレームワークを提供

原子力エネルギーシステムのモデリングの背景

- 原子力エネルギーシステムは、創成期からシミュレーションを多用し、成功。
- しかし、現在のシミュレーションは、マクロレベルのモデル、例えば、熱伝導のサブモデルを扱う。そのために、不確実性を扱う必要がある。
- このシミュレーションの能力をより一層、科学的認識に基づくものにするためには、ミクロスケールのサブモデルへの展開が必要。
- ただ、設計者は、マクロスケールの結果の把握に基づいてデザインを決定する。すなわち、マルチスケールモデリングが必要となる。

原子力エネルギーシステムでは、将来的にマルチフィジックスシミュレーションが重要な役割を担う。



マルチフィジックスとマルチスケールモデリングを支援するために、新しい Verification and Validation (V&V), Uncertainty Quantification (UQ) and Risk Quantificationが必要。

Verification and Validation (V&V), Uncertainty Quantification (UQ) and Risk Quantificationの動機: → 以降, VUと呼ぶ

- システムの予測される応答と予測知識の不確実性に関する信頼性をシミュレーションパッケージのユーザに提供すること。
- 許認可機関、特にUS Nuclear Regulatory Commission(米国, 原子力規制委員会)からシステムの重要特性を評価することが要求されている

VUの目的:

コンピュータシミュレーションモデルを用いて、すべてのエラー、不確実性のソースに対する信頼性、評価、関連した複雑システムの特性の不確実性の予測。

- モデリング
- 数値処理
- 認識の不確実性 (例えば、依存関係を含んだデータの取り扱い)
- 初期状態、境界条件、領域分解等

VUの目的を満たすならば、有益な結果(成果)を支援する

- 代替設計、運転、原子力安全を考慮したときのリスク情報に基づく意思決定と信頼性の構築
- さらに、特定の項目を支援する
 - コード開発の必要性の検証
 - 要求された検証実験の設計と検証
 - 余裕を管理するための設計の意思決定
 - リスク情報に基づく安全事例(規制機関へ)の提供

VUを原子力システムに適用するチャレンジは、

高い信頼性(成熟した影響要因を含める)とマクロスケールの限られた実験データが原因となって低い確率で発生する事象からなる高度な影響力のある結果を予測できると考えられる。

Verification:

- コンピュータ・コードが正確に意図されていたアルゴリズムを実行することを確認するプロセス。
- これは、方程式が正確に数値的に解かれることを確認するプロセス。

Validation:

- コードの予測が的確に物理現象を再現しているかを確認するプロセス。
- これは方程式が物理的に、正確であることを確認するプロセス。

Verification: コードのVerificationは, V&Vの最も一般的

以下の方法にて, Verificationテストとテスト問題について考えることは有効.

1. 方程式は, 数学的に(物理的ではなく)正しいコードで表現されているか?

テスト問題の構造, すなわち, 基礎となっている論理的な原理, テスト問題がなぜ選ばれ, どのように構成されているかという重要な質問を取り扱う

2. 方程式の計算アルゴリズムは数値計算上, 正しいか?

具体的なテスト問題一式, もしくはテスト問題一式として選ばれたコードの組み合わせの具体的な意味

3. アルゴリズムのソフトウェアへのインプリメンテーションは正しいか?

具体的な評価規準, すなわち, テスト問題をコードがパスしているか, 失敗しているかどうかを決めるために用いる具体的な基準. 評価は客観的, かつ厳格で, 文書化されなければならない.

解のVerification: 解のVerificationは, 数値エラーの定量化.

質問: 与えられた計算のエラーは何か?

複雑な計算では, 完全, かつ厳格に実行することはほとんど不可能. 明示的な解の検証が行われなければならない.

ただし,

形式的なエラー評価の手続きやテスト問題一式からの推論,

以前の経験(すなわち判断)からの推論(考えようによっては, 少し危険)



明示的な打ち切り, ロバスト性, 収束性の検査によって, 部分的, かつ現実的に取り扱われる. もし, 適切に理解し, 把握され, 提示されているなら, 過去の経験は価値がある.

解のVerification: 計算と実験データとの比較において存在している数値エラー

基本的な質問: 実験データとの比較において, 数値エラーは, 致命的で, かつ改善する結果を促すか?

この問いに対する認識がないときには, 実験データとの比較は無意味である.

キーとなるプロセス:

1. 事後のエラー評価,
2. 収束性調査,
3. 数値エラーモデル,
4. 数値エラーを認識の(「知識の欠如」)不確実性として, 取り扱うための不確実性の定量化手法.

Validation

実験のValidation

- 実施済の実験とValidationの計算の間の整合性を合わせ込むためにValidationの厳密な仕様(規格)をテストする.
- 実験のV&V
 - 実験のVerificationは, 実験が正確に実施されたことを確認する(プロセス).
 - 実験のValidationは, 正しい実験が実施されたことを確認する(実験そのもの).

実験データがValidationの品質でないとき, Validationの効果は弱められる.



実験サイドでも, 最高品質の実験データを提供するために, VerificationとValidationを受けること.

実験のValidation

- Validationの計算のためには、計算のVerification性能(能力)がかぎ
- 測定/計算による予測の比較の定量化(定量化した不確実性を含む)
 - 実験的な不確実性を含む実験エラーバー
 - Uncertainty Quantification(UQ)によって不確実性が確定した計算の不確実性を含む計算エラーバー

Validationの計算

- コードの物理的な質 / 物理的な正確さ / 予測する能力を評価するための計算.
- 計算の物理的な正確さを推定するための実験データのValidationの質と比較.
- Validationの計算と比較される実験データは、Validationの計算効果を上げるために、定量化された実験的な不確実性、再現性、実験データのロバスト性を含む.

実験のエラーバー

- 実験のエラーバーは、実験のUncertainty Quantification (UQ)のためのもの.
- 実験と計算の比較をし、推定するためのスタートポイント.

実験のエラーバーの構成要素は、例えば、
- 実験のバイアス
- 変動
- その他の様々な要因

実験のエラーバーは、例えば、
- ガウス分布の代表値
- 統計的な信頼区間
- 一様分布表現
- 可能性区間 など

Validationの比較から厳密に推定し、実験のエラーバーを把握することが必要.

Uncertainty Quantification

大規模シミュレーションのUQは、コードのV&V
プロセスにおいて、重要な位置付け

シミュレーションの不確実性と実験の不確実性

シミュレーションが実験結果に対して、定量的に検証できるなら、以下のことが重要になる.

- 計算の出力測定基準から予想される不確実性の把握と認識
- 実験の出力測定基準に関するエラーバーの定量的な判断

「実験の不確実性 < シミュレーションの不確実性」のとき、シミュレーションの真の正確さを評価することができる.

実験の不確実性のエラー評価は、コントロール可能なパラメータを伴った実験全体に対して行い、既知のシステムエラーを把握する.

Uncertainty Quantification

リスクは、経済リスク、健康リスク、企業に関連するリスクなど

UQとリスク、UQは、広義の意味でリスクを含む.

UQは、以下に影響を与える.

- リスクの定量化のためのシステムの応答測定基準の不確実性
- リスクに対する応答測定基準

リスクモデルは、それ自身の不確実性のことである.

従って、システムの応答測定基準の確率分布は、リスク測定基準の確率分布が畳込みこまれたものが要求される.



従って、UQには、リスクの不確実性を含める.

Uncertainty Quantificationの決定

1. シミュレーションの不確実性の既知の原因を確認

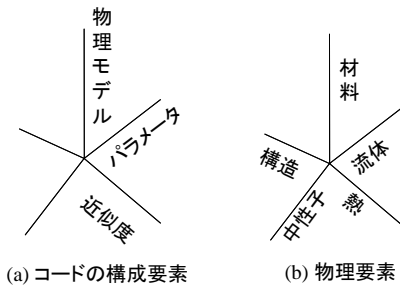
マルチフィジックス、マルチディメンションコード:
 パラメータ数が膨大、要素(領域)間の全ての組合せに対する不確実性のテストは指数的に複雑。

- 物理的、数学的アルゴリズムに基づいた近似モデルに関連する不確実性
- 物理モデルで用いられているパラメータ設定に関連する不確実性
- 個別のアルゴリズムを安定的に実行させるための設定
- 不明瞭なテーブル、状態テーブルの平均化(方程式)などの様々なレベルに関連する不確実性
- 与えられたステップ幅にてシミュレーションを実行したときの収束性に関連する不確実性

2. シミュレーションコードのために、すべての確実なパスを確認

- 出力測定基準の有力な要因となる不確実性の要素(アルゴリズム、近似、パラメータ等)を特定するために、感度分析を繰り返す。これは、事前に決まらないので、演繹的でない。
- 不確実性の要素を除去するための感度分析を行う。このため、物理モデルとなる物理的、数学的なリーズナブルなパラメータの組み合わせ(物理的、数学的に妥当な限界)を把握。
- この把握と決定は、膨大な数の試行の取り組み(努力)と実験、分析的な解析、科学的な判断から得られる知識にもとづき定量化される。

物理コードに基づくパラメータ、物理モデル、近似度などの要素で構成されたN次元空間にて、コードの物理モデルに対するパラメトリックな変動要因の感度評価を行えば、これらの要因の不確実性を指し示すことができる。



N次元空間に割付けられた相互関係は、次元を減らす可能性を含んでいる。

代表的なシミュレーションの組合せにて、全次元の不確実性に対して全てのN次元空間をサンプリングすることが重要(必須)である。

次元が大きい場合(N>10)には、標準的なサンプリング技術(モンテカルロ)ではカバーできない。これを解決するための技術開発が必要。

特定可能な全ての不確実性とそれらの相互作用

Uncertainty Quantificationのチャレンジ

- 大規模シミュレーションの出力(特に、出力が入力の高度な非線形関数のとき)において、不確実性をコントロールするコード内で、支配的な感度を確定できるアプローチは開発できるか。
- 出力の不確実性のコントロールに支配的な感度を確定することにおいて、これらのアプローチはどのように互いを比較するか。
- 大規模シミュレーションの出力測定基準内で、全ての不確実性予測を決定するシミュレーションを通じて、多数の不確実パラメータ(N>>10)と関連付けられた不確実性を広めるアプローチはどのようなものか。不確実性の空間次元が高次で(すなわち、N>>10)、コードの計算コスト(実行コスト)が非常に高いとき、計算効率のよい方法は得られるか。
- どのようなアプローチで高次元のUQ空間の次元を(例えば、「高次元の呪い」)を減らすことができるか。
- 物理モデルのコードパラメータセッティングの入力確率密度関数は、コードの出力測定基準に対する最終的な不確実性にどれくらい影響を与えるか。

Uncertainty Quantificationのチャレンジ

6. 不確実性の次元Nの任意の数に対して、コードシミュレーションの出力の不確実性を求めるために、どの程度のサンプリング回数(計算回数)が必要か。また、与えられたサンプリング回数(不確実性の次元の任意数をカバーする)にて、出力の不確実性の正確さをどのように定量化できるか。
7. どのような技術が完全なモデルの集合(全てに適した既知の実験データ)であるかどうかを決定することができるか。
8. V&V, UQの方法をどうするか。
9. UQの別の方法論により決定した場合、定量的に決定した出力の不確実性はどのように比較するのか。
10. UQの方法をテストするために用いる実験を設計することができるか。

Uncertainty Quantificationのチャレンジ

11. 既存のテストの方法論で、コードシミュレーションにとって適した方法がない場合には、コードの出力測定基準の不確実性を確定するためにUQの方法論の信頼性を計測できるか。
12. UQと感度分析のために、競争力のある方法論で、公正なテストであることを示すベンチマーク問題はありますか。
13. 偶然性の不確実性、認識の不確実性、両者が組み合わさった不確実性の普及と収集のための実用的な方法論は何か。
14. パラメータや別のソースが過渡問題に依存した不確実性を示すときに、UQはどのように完了(終了)するか。
15. 弱連成の物理パッケージ(オペレーションを分割する典型的なアプローチ)を通じて、効率的に不確実性を広める方法は。

Uncertainty Quantificationのチャレンジ

16. マルチスケール問題のスケールを通じて不確実性を広める方法は。
17. マルチフィジックス問題(線形・非線形物理応答の組み合わせ)の計算的、効率的にアドバンテージを得る方法は。
18. 動的要素の連続を用いたときの確率的リスクアセスメント(PRA)のために、UQを完了(終了)する方法は。
19. どのような問題(特別問題)が、UQ分析を 10^{18} スケールのアーキテクチャに拡張すべきか。なお、 10^6 スケールのシミュレーション集合の場合には、実行可能で、UQ分析に関係するデータセットは膨大になる。
20. シミュレーションが進展していくにつれて、不確実性を積極的に広めるための今後のコード開発はどのようにすればよいか。