

ASME V&V関連資料

- Constitutive Model Verification and Validation
 - Constitutive Model V&V for Softening Materials
 - Calibration in Computational Mechanics
-

横浜国立大学 大学院環境情報研究院
安全管理学分野 澁谷忠弘

“ASME V&V 10-2006 Guide for Verification and Validation in Computational Solid Mechanics” (以下のURLから購入可)を理解するために、関連資料 (PTC60委員会技術レポート)の解説をシリーズで行う

<http://www.asme.org/>-> search “V&V”

http://catalog.asme.org/Codes/PrintBook/VV_10_2006_Guide_Verification.cfm

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) (小國、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)	講演(2件)	
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		

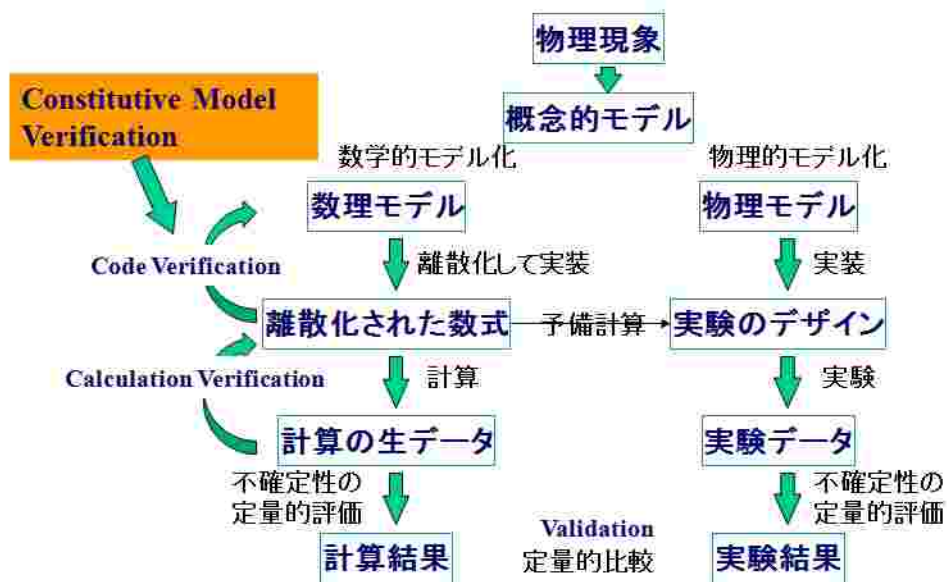
- ASME V&V文献 (1) Benchmarks (J. T. Oden)
 (2) A Posteriori Error Estimation (April 2002) (J. T. Oden)
 (3) Experimental Data Requirements for Validation
 (4) Key Terms and Concepts
 (5) Role of Non-determinism in Verification and Validation of Computational Solid Mechanics Models (July 2001) (B. Thacker and T. Hasselman)
 (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)

ASME V&V 10-2006 “Guide for Verification and Validation in Computational Solid Mechanics”に関連した文献(1)～(10)の内、(1)～(9)を3回にわたり解説する。今回は、構成モデル(構成則)とCalibrationに関する文献(7)-(9)を解説する。

これらの文献は以下のURLからダウンロードできる。

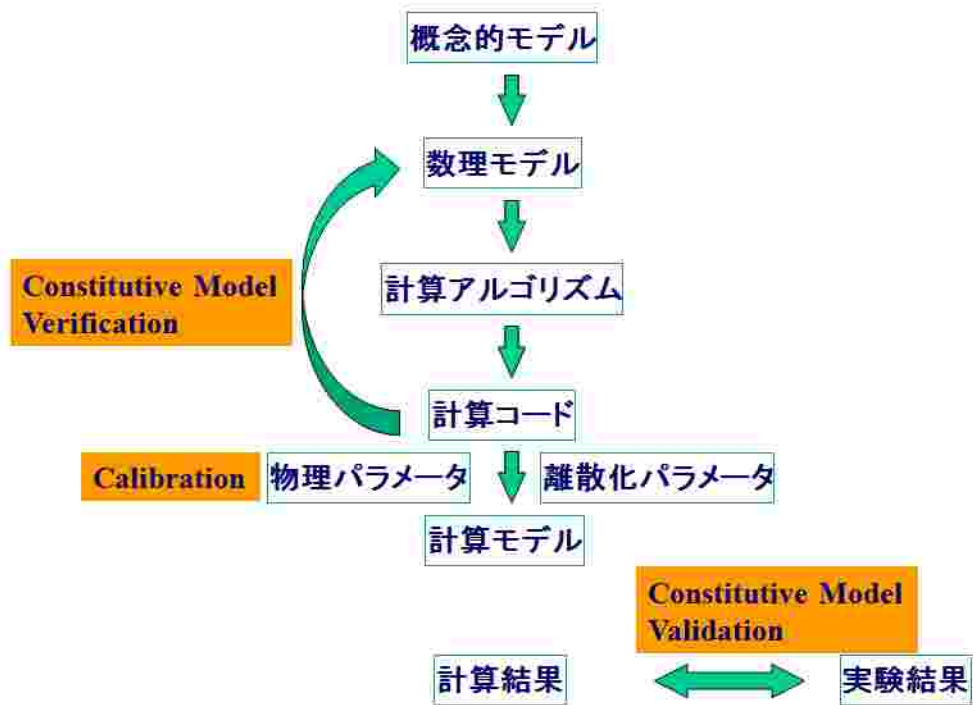
<http://www.usacm.org/vnvcsm/>

V&V Fig. 4



ASME V&V 10-2006の図 4を和訳して示す。文献(7)は、図4の一部を構成モデルのV&Vに適用するためのガイドラインであるが、全体のV&Vの中での位置づけとしてはCode Verificationの一部であるといえる。

V&V Fig. 5



ASME V&V 10-2006の図 5を和訳して示す。構成モデルのV&VおよびCalibrationに該当する部分を示す。

Constitutive Model Verification and Validation (1/11)

題目	Constitutive Model Verification and Validation	
著者	Len Schwer	
出典・年	Draft・2001/5/14	
頁数	11 頁	
目次	<ul style="list-style-type: none">-Introduction-Verification<ul style="list-style-type: none">-Designing a Constitutive Model Verification Suite<ul style="list-style-type: none">-General Constitutive Model Features-Specific Constitutive Model Features-Calibration	<ul style="list-style-type: none">-Code-to-Code Comparisons-Validation-Error Estimation-Material Model Drivers-Material Model Documentation
概要	構成モデルについてV&Vを実施するためのガイドライン。	

文献(8)について、題目、頁数、目次と概要をまとめる。概要に述べた通り 構成モデルにV&Vを適用するための方法論について紹介している。著者は、DYNAの初期からのユーザーであり DYNAのコードには彼の名前がついた要素も存在する。このため、本文献では構成モデルのV&VについてDYNAをベースに紹介している。

Constitutive Model Verification and Validation (2/11)

構成モデルへのV&Vの適用

以下のV&Vに関する概念*は、構成モデルのV&Vに適用可能

-Verification

解析解とコードの比較

-Calibration

数理モデルのパラメータ決定

-Validation

実験データとの比較

-Code-to-Code Comparisons

本来のベンチマークに加え、上記のプロセスを補う役割を有する。

*P. J. Roache, "Verification and Validation in Computational Science and Engineering", Hermosa Publishers, ISBN 0-913478-08-3, 1998.

ASME V&Vに含まれているV&Vの原理は、主としてP. J. Roacheの文献に沿っている部分が多い。これらの概念の中でVerification、Calibration、Validation、Code-to-Code Comparisonの4つについては、構成モデルのV&Vに対しても適用可能である。ただし、後述のようにCode-to-Code Comparisonは、他の3つを補う役割でありV&Vの中では少し異質な部分を有している。

Constitutive Model Verification and Validation (3/11)

Verification

-構成モデルの検証は、実装されているソフトウェアとは切り離して実施しなければならない (Material Model Driver)。

-実装される構成モデルの一般的な形式

入力:ひずみ(増分) 出力:応力

問題点:応力経路での検証が困難

⇒単一セルモデルでの検証(他の因子が含まれる)

-ロバスト性を目的とした、商用ソフトウェアの解析パラメーターについては、構成モデルの検証の対象外

構成モデルにV&Vを適用するに当たり まず注意すべきは可能であれば構造解析コードの部分とは切り離して実施すべきである(理由:コードの影響を除くため)。DYNA/3Dなどでは、Material Model Driverが実装されており コードとは独立に実装された構成モデルの検証が可能である。

構成モデルの、一般的な形式は入力にひずみ(or ひずみ増分) 出力が応力の形式が一般的である。一般に、実験や解析解ではしばしば応力経路を基準とする場合があるが、その場合はコードと独立して検証するのは困難である。その場合、実用的な手段として単一セルを用いて応力を境界条件として解析することで検証できる(疑似Material Model Driver)。ただし、これはコードの影響が含まれるため厳密には構成モデルのVerificationとは言い難い。また、商用コードではソフトウェアにロバスト性をもたせるために、様々なパラメータを導入しているがこれらもできるだけ排除して検証すべきである。

Constitutive Model Verification and Validation (4/11)

実例① 疑似粘性項

- 疑似粘性項：衝撃解析においてコードの安定性を向上させるために意図的に導入されたもの
- 局所的な高ひずみ速度が疑似粘性項をアクティブにすることで意図しない結果が生じる場合がある(例。自動車の衝突解析における衝撃吸収材)

実例② ひずみ速度依存性を有する材料

- 単一セルモデルによる検証は、得られた結果についてセルサイズの影響が含まれてしまう(陽解法(LS-DYNA?)の場合)。
- 節点に割り振られた質量により生じる平均応力の増大は結果に思わぬ影響を与える(例。摩擦材料)

前述のVerificationに関する注意に関連する実例を挙げる。ひとつは疑似粘性項である。解析の収束性・安定性を意図して導入されたものであるが、自動車の衝撃吸収材のように変形量大きい構造物では疑似粘性が思わぬところで働く場合がある。もう一つの実例としてひずみ速度依存型の構成モデルでの問題を挙げる。DYNAのような慣性項を考慮したコードの場合、単一セルモデルの解析であっても各接点に質量が割り振られるため平均応力が増加する。摩擦材のように、圧力依存の変形挙動を有する場合には注意を要する。

Constitutive Model Verification and Validation (5/11)

General Constitutive Model Features

構成モデルについて検証すべき項目

-ソースコードの確認

本来のV&Vでは、ユーザーが行う作業ではないが可能であればソースコードのチェックはそれなりに意味がある。

-様々なひずみ経路での解析的検証

解析解と比較するために新たに計算(アルゴリズム)が必要

⇒Code-to-Code Comparisonとの境界があいまい

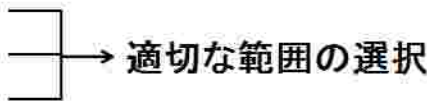
-除荷と再負荷

弾性範囲での検証と硬化則の検証

-ひずみ増分の検証

-ひずみ範囲の検証

-単位系



一般に構成モデルで検証すべき項目を列挙する。

ソースは、オープンソースでない限り確認は容易ではないが、可能であればコード内部をチェックする方がよい。また、解析解があるひずみ経路での検証は必要であるが、解析解によっては検証するための値の計算に別のアルゴリズムが必要になる場合がある。このような場合には、Code-to-Code Comparisonで検証せざる得ないが、その場合にはverificationとCode-to-Code Comparisonの境界があいまいになる。除荷と再負荷については、コードのチェックも兼ねて弾性領域で正しく復元されるか、硬化則は正しく用いているかなどをチェックするために必要な項目である。残りの3つについては問題に応じて適切に選択することが肝要である。

Constitutive Model Verification and Validation (6/11)

Specific Constitutive Model Features

構成モデルについて検証すべき項目

-塑性モデル:不安定な材料挙動を生じないように塑性ポテンシャルを検証しておく

-ひずみ速度依存性

-熱依存性

-軟化特性

-破壊:潜在的な破壊プロセスをできる限り抽出しておくこと

} 各因子について広い範囲で精度を検証しておくことが肝要

Design of Experiments and Input-parameter Sensitivity

多次元空間を有する入力パラメータに対して感度を確認しておく必要がある

⇒実験計画法を用いた感度解析をVerificationで実施することが望ましい。

また、前述の項目に加えて対象となる現象に関連したさまざまな因子についても検証が必要である。代表的な項目を列挙しているが、いずれも実際の問題を考慮して適切な範囲で精度を検証しておくことが重要となる。また、入力パラメータのチェックとして実験計画法などを用いた感度解析などもVerificationを効率よく行うための有効な手段である。

Constitutive Model Verification and Validation (7/11)

Calibration

Calibrationは構成モデルに関して最もキーとなる部分

-求められるアウトプット(実験データ)を適切に再現するようにパラメータを調整する。

-何を基準とすべきか？

単純引張試験ですら平均化された応力とひずみの関係にすぎない(局所的な材料特性ではない)。

例①。ASTM standards準拠の平板試験片：

応力：ロードセルの荷重／断面積

ひずみ：伸び計で変位計測／標点間距離

ヤング率：平均応力／平均ひずみ→厳密な意味で材料物性か？

例② ひずみ速度依存性

構成式をMaterial Model Driverを使って検証しても実際の解析コード(LS-DYNA?)では慣性の影響が含まれていてセルサイズ依存性が存在する。

Calibrationは、構成モデルに関して最も重要な位置づけである。ここで、Calibrationとは与えられた実験データに対して近い値を再現するように入力パラメータを調整することである。しかし、基準とすべきデータにはいくつかの問題が含まれている。単純な、引張試験といえども得られたデータは平均的な応力とひずみの関係であり、厳密な意味で局所の材料特性とは言えない(この部分は金属材料など微視構造を有する場合にはさらに議論が必要かと思われます)。また、前述同様ひずみ速度依存性に起因したセルサイズ依存性はCalibrationを非常に困難にする。

Constitutive Model Verification and Validation (8/11)

Validation

- 厳密な意味で構成モデル単体で実験との定量的検証 (Validation) は困難: 前述の Calibration と同様
- 実験室レベルの単純な試験で評価せざる得ない
- 注意: 材料パラメータを取得した試験を Validation に適用することはできない (実験が間違っていた場合、検出不可能)
- 別途、Validation を目的とした試験が必要。
(例。円筒シリンダの内圧試験)

構成モデルの Validation は、現実問題として不可能であるといわざる得ない。実験側のデータと構成式の検証に必要な値との間に差異があるため、例えば単軸引張試験の場合でも実際に試験片を模擬した構造解析を行う必要がある。結果として、Validation にはコードの影響が必ず伴う。また、Calibration で使用した実験を Validation に使用することはあまり意味がない (実験にミスがあればそれがそのまま残るため)。このため、構成モデルの Validation では別途実験を準備する必要がある。

Constitutive Model Verification and Validation (9/11)

Code-to-Code Comparison

- 構成モデルの検証では、解析解が極めて限られているので複雑な荷重経路に対してはCode-to-Code Comparisonで確認するぐらいしか方法がない
- その場合、Material Model Driverがあればソルバー一部の差異を無視できるので有効

Error Estimation

- 構成モデルについて、誤差評価に関する特段の議論はない。
(解析コードを含んだトータルで議論すべき)

構成モデルでは、ひずみ経路の検証においても解析解はごく限られており、複雑な荷重経路に対してはCode-to-Code Comparisonで確認するしか方法がない。このため、Code-to-Code Comparisonは構成モデルのV&Vでは他の部分を補い役割を有している。また、誤差評価はCalibrationを伴う構成モデルのV&Vではあまり意味をなさない。

Constitutive Model Verification and Validation (10/11)

Material Model Driversについて

- Material Model Driversとは、与えられた入力値に対して実装された構成モデルに基づきその応答を出力するモジュール
- ソルバー部分と独立して構成モデルの検証が可能な場合には、単一セルモデルでの検証しかできない。
- 現状では、ひずみを入力としたMaterial Model Driversが実装されている。
- 構成モデルのV&Vのために、応力経路を入力とするMaterial Model Driversの開発が望ましい。
 - 材料試験は応力経路基準のものが多い(分野による?)
 - 反復計算が必要となるが、解析ソルバーとは独立で動作すること。
 - 他構成モデルとの機能の共通化
 - 反復計算のアルゴリズム部には、関連する解析コードのいかなるパラメータも含まないようにすべき(オープンソース)

前述の通り コードと独立に構成モデルの検証が可能になるMaterial Model Driverは、構成式のV&Vにとって重要な役割を有している。また、今後は応力経路の検証も可能なDriverの開発が望まれる。この場合の必要項目を列挙している。ポイントは、(i)構造解析モジュールと独立であること(ii)他の構成モデル(ひずみ経路基準)のタイプとの機能の共通化(iii)計算が必要になる部分には、できるだけ意図的なパラメータの導入は避けることである。

Constitutive Model Verification and Validation (11/11)

構成モデルの文書化

-文書化はV&Vには含まれないが、構成モデルの場合はあった方がよい

(文書がない構成則は使わない方がよい)

-文書化の例

Level 1 概要

Level 2 問題例

Level 3 入力パラメータの決め方

Level 4 簡潔な理論の説明

Level 5 数値アルゴリズムの実装方法についての解説

最後に、構成式に関して言えば文書化しておくことが重要である。理論・マニュアル等が記載されていない構成モデルはできるだけ使用しない方がよい。典型的な文書の構成例を示す。

Constitutive Model V&V for Softening Materials (1/3)

題目	Constitutive Model V&V for Softening Materials
著者	Don Simons (Logicon)
出典・年	Draft・2001/5/21 (Revised 2001/7/5)
頁数	2頁
目次	なし -構成モデルにおける軟化の問題 -軟化による局所化制限因子
概要	構成モデルで材料の軟化挙動を取り扱うための問題点および対処法について述べている。

文献(9)について、題目、頁数、目次と概要をまとめる。概要に述べた通り 構成モデルにおける軟化の問題について紹介している。この著者も、DYNA3Dを用いて軟化に関する論文を公表している。

L. Javier Malvar, John E. Crawford, James W. Wesevich and Don Simons, “A plasticity concrete material model for DYNA3D”, International Journal of Impact Engineering, Volume 19, Issues 9-10, October-November 1997, Pages 847-873.

Constitutive Model V&V for Softening Materials (2/3)

構成モデルにおける軟化の問題

ひずみ速度非依存型構成モデルの軟化の問題点

⇒変形の局所化・メッシュ依存性

- 速度依存性の導入（材料特性・疑似粘性項）
- ひずみ勾配依存（例。コッセラ連続体理論）
- 非局所構成モデル
周囲の要素を含む空間領域で平均化（非局所化）処理
- 破壊プロセスにおける適切な内部エネルギー散逸の設定
- 破壊に伴う再メッシュ化

構成モデルでは、しばしば軟化をモデル化する必要がある（コンクリート）。ひずみ速度非依存型の構成モデルでは、数学的な問題から変形の局所化が生じることに起因したメッシュ依存性が問題となる。これらの問題を回避するために、いくつかの局所制限子が提案されている。

Constitutive Model V&V for Softening Materials (3/3)

軟化構成モデルへのV&V

- 現状では軟化を適切に取り扱うためのガイドラインは欠如している。
- 速度非依存の軟化構成モデルを用いることは困難
- 局所化制限子を導入した場合には、材料パラメータの設定に十分な注意が必要(実験室レベルでも変形は不均一変形)

結論として、軟化には様々な要因があり現在でも不明な点が多い。このため、軟化の構成モデルに関して適切なガイドラインは確立されていない。しかし、速度非依存の構成モデルで軟化を扱うことはV&Vの立場からあまり良い選択肢とは言えない。また、その他の局所制限子を用いる場合でも、正確な微視領域でのモデル化が行われていない限りその取り扱いには注意が必要であると思われる(個人的な意見も含む)。

Calibration in Computational Mechanics (1/4)

題目	Calibration in Computational Mechanics
著者	Hans U. Mair
出典・年	Draft・2001/4/4
頁数	2頁+Appendix (4頁)
目次	-Background -The Calibration Process -Summary
概要	固体の有限要素解析のための Calibrationについて述べている。

文献(7)について、題目、頁数、目次と概要をまとめる。概要に述べた通り 固体の解析を対象としたCalibrationに関する意見を述べたものである。

Calibration in Computational Mechanics(2/4)

Calibrationの例(固体力学分野)

- 構成モデルの選定および材料パラメータの調整
- 境界条件の設定
- サブモデル(ばね・ジョイント要素)の使用の可否
- 収束していないメッシュの調整
- ばらつきの問題
- 疑似粘性の導入

Calibrationは、計算力学でも重要な役割を担っているにもかかわらず学問的には反論が多い(とくに、メッシュ収束性、“bad science”)

しかし、現実問題(複雑な実際のシステム)に対してメッシュ収束性に関してもある程度のCalibrationを実施しないと現実的な解決策が見つからない(一部の流体の問題は除く)。

計算工学の分野では、Calibrationは重要な役割を担っている。スライドには、Calibrationの対象となる解析手順を列挙している。ここでのCalibrationは、前述の構成式におけるCalibrationをはじめ、境界条件や解析モデル等を含んだ解析全体でのCalibrationを指している。なかでも、メッシュに関する議論は学問的には異論が多い。しかし、現実の複雑なシステムをモデル化するにあたりハードウェアの制限の範囲内で適切な解析を行うためには、メッシュ非収束なモデルをCalibrationと併用しないと現実的な解が得られない。これは、とくに固体力学の分野では顕著であると思われる。

Calibration in Computational Mechanics(3/4)

Summary

-結論はまだ定まっていないが、現在のV&Vの在り方について一石を投じている。

-Calibrationは、計算力学の分野で重要な役割(特に固体力学分野)を果たしており、体系的に論じることが今後重要となる。

-厳格な検証を要求する現在のV&Vに加えて、許容されるCalibrationの範囲を明確に定量化かつ文書化していくことが望ましい。

ASME V&Vにおいても、Calibrationの記述はモデルのアップデートに用いられるように記述されている。しかし、CalibrationをV&Vのコアなプロセスとしては記載されていない。また、実験ではCalibrationは正しい測定値を得るための重要なプロセスとして考えられている。Validationにおいて、実験と解析を比較するのであれば解析側においても適切にCalibrationが行われることが不可欠であると思われる。本文献では、はっきりとした結論は述べていないが計算力学においてもCalibrationを重要なプロセスとして取り扱っていくべきであると主張している。

Calibration in Computational Mechanics(4/4)

Appendices (Calibrationに関する文献)

主としてCFD分野

-Appendix 1 – AIAA “Guide for Verification and Validation of Computational Fluid Dynamics Simulations”

Calibrationは、実験データに近づけるための手段。Validationのように予測信頼性をもたらすものではない。

-Appendix 2 – Patrick Roache, “Verification and Validation in Computational Science and Engineering”

CalibrationとValidationの違いについて過去の文献をReview

Calibration :

Validationされたモデルの範囲外での実験に基づいたモデルの調整

(Marvin)

特定のパラメータを予測するために実験と比較するプロセス(NASA)

Validation :

パラメータのある範囲で正確なモデル化か可能かどうかを検証するプロセス(NASA)

本文献での補足資料としてCFD分野でのCalibrationに関する文書が記述されている。ひとつは、AIAAのガイドラインであるがCalibrationとValidationの差について記載されている。Validationとの違いとして、予測信頼性の有無について言及している。もうひとつは、幾つかの文献をレビューしたものである。とくに、NASAの定義として特定のパラメータの値を予測するCalibrationに対してValidationはある一定範囲での精度を評価するプロセスとして定義されている。若干、ニュアンスは異なるもののValidationが検証された範囲で予測可能なモデルの構築を目指していることに特徴がある点で一致している。これらの議論は、ASME V&Vにも反映されている。