

УДК: 621.039.58, 519.63, 532.5

DOI: 10.26277/SECNRS.2021.101.3.002

© 2021. Все права защищены.

О НЕОБХОДИМОСТИ ВЕРИФИКАЦИИ И ВАЛИДАЦИИ МЕТОДОВ ПРЯМОГО ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ГИДРОДИНАМИКИ

Катковский С. Е.*, к. т. н. (katkovskiy@secnrs.ru)

Статья поступила в редакцию 6 апреля 2021 г.

Аннотация

Показано, что при использовании методов прямого численного моделирования (DNS) вычислительной гидродинамики (CFD) для целей обоснования безопасности объектов использования атомной энергии необходима полноценная верификация и валидация программ для ЭВМ. Отказ от валидации на экспериментальных данных на том основании, что эти методы построены «из первых принципов» и для них достаточно лишь показать сходимость расчетов, некорректен.

Рассмотрены три группы проблем применения DNS для обоснования безопасности: проблемы обоснования сходимости численного решения, проблемы постановки начальных и граничных условий и проблемы применимости основных уравнений.

В числе проблем сходимости численного решения отмечены следующие проблемы: неопределенность самого понятия сходимости для DNS-методов, сходимость к нефизическим решениям, отсутствие строгого обоснования сходимости, противоположные требования к решению – сохранять присущую турбулентному течению неустойчивость и одновременно обеспечивать сходимость.

В части проблем постановки начальных и граничных условий отмечены сложность задания граничных условий с детализацией, необходимой для применения DNS-методов, невозможность априорной постановки начальных условий для течений в переходной области, недостаточно точные сведения о свойствах среды.

В отношении проблем применимости основных уравнений отмечены проблемы корректности предположений, использованных для вывода уравнений, при масштабах, характерных для DNS, а также проблема использования упрощенных форм уравнений.

► **Ключевые слова:** CFD, DNS, аттестация, верификация, валидация, вычислительная гидродинамика, метод прямого численного моделирования, сходимость, начальные и граничные условия, турбулентность, уравнения Навье-Стокса.

* Федеральное бюджетное учреждение «Научно-технический центр по ядерной и радиационной безопасности», Москва, Россия.

ON THE NEED OF VERIFICATION AND VALIDATION OF COMPUTATIONAL FLUID DYNAMICS DIRECT NUMERICAL SIMULATION METHODS

Katkovskii S. E.*, Ph. D.

Article is received on April 6, 2021

Abstract

It is shown that computational fluid dynamics (CFD) direct numerical simulation (DNS) codes shall be verified and validated on experimental data to be applicable for safety justification, and that it is not correct to omit experimental data validation appealing to the statement that such methods are based on so-called “first principles” and therefore the simple demonstration of the solution convergence is sufficient for such methods.

The following problem groups of the application of DNS methods to the nuclear safety justification are discussed: the problems of the numeric solution convergence, the initial and boundary conditions problems, and the problems of the applicability of the main equations.

Among the problems of convergence of the numerical solution the following problems are noted: the ambiguity of the concept of convergence applied to the DNS methods, convergence to the non-physical solutions, the lack of the convergence justification, and the opposite requirements for the solution – to maintain the instability inherent in turbulent flow and to ensure convergence.

Among the initial and boundary conditions problems, the following problems are noted: the complexity of setting the boundary conditions with the detail required for using the DNS methods, the impossibility of a priori setting of the initial conditions for the transition flows, and the lack of the accurate information about the medium properties.

In relation to the applicability of the basic equations, the problems of correctness at scales typical for DNS of the assumptions used to derive the main equations and the problem of using simplified forms of equations are noted.

► **Keywords:** *CFD, DNS, certification, verification, validation, computational fluid dynamics, direct numerical simulation, convergence, initial and boundary conditions, turbulence, Navier-Stokes equations.*

* Scientific and Engineering Centre for Nuclear and Radiation Safety, Moscow, Russia.

Введение

Методы прямого численного моделирования (DNS – Direct Numerical Simulation), предназначенные для решения задач вычислительной гидродинамики (CFD – Computational Fluid Dynamics), в настоящее время интенсивно развиваются, прежде всего, благодаря развитию вычислительной техники, фактически не столь давно сделавшему возможным само применение таких методов. Одновременно расширяется и область применения таких методов, разрабатываются программные средства, позволяющие выполнять расчеты многофазных и многокомпонентных течений в областях сложной геометрии. В связи с этим привлекательным является использование таких методов для целей обоснования безопасности объектов использования атомной энергии (ОИАЭ).

Согласно федеральному закону «Об использовании атомной энергии» № 170-ФЗ [1] и требованиям действующих федеральных норм и правил в области использования атомной энергии программы для ЭВМ¹, используемые для обоснования безопасности, должны пройти экспертизу в организации научно-технической поддержки. В процессе экспертизы определяющее значение имеет проверка полноты и корректности верификации и валидации. Основные требования, предъявляемые к верификации и валидации, одинаковы для всех программ для ЭВМ и включают в себя верификацию на аналитических и расчетных тестах и валидацию на экспериментальных данных [2]. Необходимость в выполнении верификации и валидации в полном объеме для традиционных программ для ЭВМ в настоящее время обычно не вызывает сомнений. Действующими нормативными требованиями также не предусмотрено никаких исключений в отношении валидации каких-либо классов программ для ЭВМ. Однако по отношению к программам для ЭВМ, реализующим методы прямого численного моделирования, нередко высказывается мнение об отсутствии необходимости в их экспериментальной валидации на том основании, что эти методы построены «из первых принципов»,

¹ В настоящей статье используется термин «Программа для ЭВМ» в соответствии с [1], в действующих федеральных нормах и правилах до приведения их терминологии в соответствие с [1] в настоящее время в основном используется термин «Программное средство»; аналогично установленная в [1] терминология «экспертиза в организации научно-технической поддержки уполномоченного органа государственного регулирования безопасности» соответствует «аттестации».

и по этой причине достаточно проверить сходимость численного решения и убедиться в отсутствии ошибок на каких-либо простых аналитических тестах (например, [3]). Такое утверждение тем не менее не имеет под собой достаточного научного основания. В этой связи в настоящей статье предполагается подтвердить необходимость экспериментального обоснования расчетных моделей ОИАЭ, построенных на основе методов прямого численного моделирования.

Недостатки описанного выше упрощенного подхода к верификации можно условно разделить на три группы: проблемы, связанные со сходимостью численного решения, проблемы, обусловленные недостаточностью известных «первых принципов» для решения практических задач, и проблемы того, что в действительности является первыми принципами, применимыми в качестве основы методов прямого численного моделирования. Следует сразу отметить, впрочем, что эти проблемы в значительной мере взаимосвязаны. Начнем с утверждения о сходимости.

Сходимость численного решения

Первой проблемой является неопределенность самого понятия сходимости для DNS-методов. DNS-методы предназначены прежде всего для расчета турбулентных течений, являющихся принципиально неустойчивыми в отношении локальной картины течения. Разумеется, DNS-метод может быть применен и для течений, не являющихся турбулентными в строгом смысле, но характеризующихся хотя и регулярной, но сложной и нестационарной картиной течения вроде вихревой дорожки Кармана, образующейся за плохо обтекаемым телом. Наконец, DNS-метод может использоваться и для расчета ламинарных течений, но в этом случае принципиальная разница между DNS и любым другим методом вычислительной гидродинамики отсутствует, и этот случай в контексте настоящей статьи не представляет интереса.

Неустойчивость в зоне развитой турбулентности означает, что малое изменение, вносимое в исходные или граничные условия, приводит на большом временном интервале к картине течения, которая локально, почти в каждой заданной точке области течения, не будет иметь ничего общего с картиной невозмущенного течения. Поскольку в статье обсуждаются численные методы, нет необходимости подробно проводить различие между неустойчивостью по отношению к малым, но конечным

возмущениям, существование которой очевидно из опыта, и неустойчивостью по отношению к бесконечно малым возмущениям, являющейся более тонким математическим вопросом. Возмущения, которые вносятся в решения в численных методах, конечны вследствие ограниченной разрядности (DNS-методы, в которых бы использовалась арифметика с произвольной точностью, в настоящее время, по-видимому, не рассматриваются даже в качестве идеи), в равной мере и воздействия, оказываемые на реальный поток, не могут быть уменьшены до сколь угодно малой величины.

Коль скоро метод претендует на получение результата «из первых принципов», численное решение должно обладать теми же свойствами, что и реальное течение. Вследствие этого любой метод, претендующий на реализацию численного моделирования турбулентного течения «из первых принципов», также должен давать неустойчивую к малым возмущениям расчетную картину течения, но тем самым метод не будет обеспечивать локальную сходимость при измельчении расчетной сетки, поскольку возмущения, вносимые при изменении расчетной сетки, должны приводить к расходимости с невозмущенным решением. Если же в расчетной методике используются явно или неявно какие-то приемы регуляризации, позволяющие подавить неустойчивость по отношению к малым возмущениям, то, хотя бы такие методы и обладали свойством сходимости, они не будут являться методами, построенными «из первых принципов», поскольку в них внесено нечто искусственное (механизм нефизической устойчивости), оказывающее влияние на результат, а также поскольку решения, полученные такими методами, не обладают свойствами, принципиально присущими решениям исходных уравнений и, самое главное, реальным течениям. Если коротко резюмировать, описанная проблема проистекает из двух противоположных требований к методу: точно описывать реальность (DNS-методы часто описываются с применением таких эпитетов, как «прецизионный», «первопринципный»), а следовательно, передавать свойственный реальности хаотический характер решения, и обеспечивать сходимость, что подразумевает, напротив, регулярный характер решения.

Немаловажно, что регуляризация сама по себе может представлять серьезную проблему. Хорошо известно, что решения уравнений движения, соответствующие ламинарному течению, например, течение Хагена-Пуазейля в круглой трубе, формально справедливы при любых числах Рейнольдса,

но реальное движение в трубе при больших скоростях оказывается турбулентным, что обусловлено именно неустойчивостью ламинарного течения при больших числах Рейнольдса. Если попытаться использовать метод, решение которого устойчиво к малым возмущениям, для моделирования течения с переходом от ламинарного к турбулентному режиму можно, в зависимости от степени регуляризации, получить нефизическое решение. Разумеется, такой простой случай, как ламинарное течение в трубе при большом числе Рейнольдса, при реальных расчетах может быть исключен искусственным внесением достаточно сильных возмущений, но остается неразрешенным вопрос: как регуляризация влияет на решение в малых масштабах, и не приводит ли она к аналогичным ошибкам? Далее в статье этот вопрос еще раз будет обсуждаться применительно к проблеме задания начальных и граничных условий.

Следует заметить еще, что нефизическая устойчивость по отношению к малым возмущениям может быть внесена в метод неявно, то есть не за счет целенаправленного применения каких-либо приемов регуляризации, а просто вследствие выбранной аппроксимации исходных уравнений.

Если попытаться отказаться от требования поточечной сходимости и оставить лишь требование сходимости в отношении некоторых средних характеристик потока, возникают новые проблемы. Во-первых, нет никаких убедительных оснований утверждать, что метод, обладающий лишь сходимостью в среднем, априори корректно моделирует явление исходя из первых принципов.

Во-вторых, возникает вопрос о том, по отношению к каким величинам метод должен сходиться. Если для простейших задач стационарной однофазной гидродинамики набор этих величин более-менее очевиден (хотя и здесь есть тонкости, о которых будет сказано ниже), например, для течения в трубе по существу важны лишь сопротивление, расход и перепад давления на участке, то для двухфазных и нестационарных задач с нетривиальной геометрией вряд ли вообще возможно сформулировать такой набор из общих соображений и для общего случая. Рассмотрим следующий пример. Характеристиками, существенными для задачи теплообмена при кипении, могут быть, например, как расходы фаз и истинное объемное паросодержание, так и параметры отдельных пузырьков. Если метод претендует на решение из первых принципов и априорную корректность, он обязан давать и корректные

локальные характеристики паровых пузырьков, поскольку интегральные характеристики, даже если нас интересуют в конечном счете только они, зависят от локальных. Но даже при стационарных внешних условиях паровые пузырьки в процессе зарождения, отрыва и движения меняют свою форму, сливаются и разделяются. В нестационарных условиях меняться может вдобавок и точка начала кипения. Какие средние величины, к которым должен сходиться метод, характеризуют поведение пузырька? Вопрос, по-видимому, на сегодня открыт.

Даже в случае стационарных однофазных течений существуют задачи, в которых вопрос о смысле средней величины нетривиален. Общеизвестно, что вода в ванне при стекании в сток образует воронку, закручивание которой вправо или влево определяется малыми отклонениями от симметрии в начальных и граничных условиях, при этом, возникнув, закрученное течение становится устойчивым. Однако «в среднем», на множестве случаев, скорость жидкости окажется направленной вниз, так как составляющие скорости в горизонтальном направлении при суммировании компенсируют друг друга. Эта задача не столь далека от задач обоснования безопасности ОИАЭ, как может показаться. Так, если в проектном режиме с несимметричным захлаживанием теплоносителя (течь паропровода или незакрытие сбросного клапана) на картину закрученного потока в опускном канале водо-водяного энергетического ядерного реактора накладывается неравномерное распределение температур теплоносителя на входе в реактор, то чтобы обеспечить консервативность результатов расчета по отношению к возникновению повторной критичности, отказ наиболее эффективного органа регулирования (накладываемый в соответствии с [4]) следует принимать в секторе активной зоны с наибольшим захлаживанием. Из-за закручивания этот сектор будет смещен по азимуту от аварийной петли, но по часовой стрелке или против?

Конечно, как и в упоминавшемся выше случае ламинарного течения в трубе, в простом частном случае проблема может быть решена путем искусственного вмешательства, но как тогда доказать, что подобное не происходит на меньших масштабах при расчете течений со сложной геометрией, где также возникают вихревые образования?

Вторая проблема, связанная со сходимостью, не менее серьезна. Предположим, мы имеем метод, который в том или ином смысле сходится к какому-то решению. Ключевой вопрос – к какому? Сходится ли метод к решению, соответствующему

той картине течения, что будет иметь место в реальности, или к какому-то другому? Несмотря на наличие доказанных теорем о том, что из аппроксимации и устойчивости вытекает сходимость, для нелинейных задач общее доказательство аппроксимации² и устойчивости и, как следствие, сходимости отсутствует, и даже в сравнительно простых частных случаях формальная устойчивость метода обычно не доказывается, вместо этого ограничиваются рассуждениями о схожести нелинейной и линеаризованной задач и применяют теорему о сходимости «по аналогии». Некоторым подтверждением допустимости такого подхода является практика применения вычислительных методов, согласно которой сеточные методы³ решения нелинейных задач действительно дают корректные результаты при выполнении условий аппроксимации и устойчивости (здесь уместно лишней раз подчеркнуть, что корректность решения в таких случаях обосновывалась именно сравнением с экспериментом). Однако в случае DNS-методов, применяемых для моделирования турбулентных течений «из первых принципов», применение «по аналогии» теорем вида «аппроксимация + устойчивость = сходимость» невозможно.

Вопрос о том, к чему сходится решение, связан и с общими свойствами уравнений гидродинамики. В настоящее время проблема общей и полной классификации решений уравнений Навье-Стокса различного вида (сжимаемая и несжимаемая жидкость, различные частные случаи), то есть проблема того, при каких начальных и граничных условиях и на каком интервале существует решение, единственно ли оно, устойчиво ли оно и какую степень гладкости имеет, далека от разрешения. Подробный анализ применимости накопленных в этой области результатов для обоснования DNS-методов далеко выходит за рамки статьи. Следует сделать лишь несколько общих замечаний:

▪ результаты, в которых устанавливаются факты о сходимости только в среднем, непригодны для цели обоснования применимости DNS-метода, поскольку для метода, претендующего

² Хотя само по себе установление аппроксимации зачастую представляется тривиальной задачей, для него необходимо существование единственного решения, что для нелинейных задач, вообще говоря, не имеет места.

³ Под сеточными методами здесь понимаются не только конечно-разностные, но и конечно-элементные методы, принципиальной разницы между ними в рассматриваемом контексте нет.

на получение результата «из первых принципов», необходимо наличие поточечного решения⁴;

- в отсутствие единственности, даже имея решение, сходящееся к некоторому точному решению дифференциальной задачи, нельзя утверждать заранее, что это решение будет близко к картине течения, которое реализуется в реальности;

- то же самое справедливо в случае, если точное решение единственно, но не устойчиво.

Сказанное отнюдь не означает, что DNS-методы вообще не пригодны для моделирования турбулентных течений. Ответы на заданные выше вопросы могут быть получены при выполнении полноценной валидации метода на достаточном объеме экспериментальных данных. Если возможно сравнение результатов расчета и эксперимента по отношению ко всем существенным параметрам, под которыми здесь следует понимать как параметры, непосредственно определяющие безопасность ОИАЭ, например, температуру оболочек твэлов, так и параметры, с использованием которых результаты расчета в одном объекте или элементе связываются с другими элементами, например, характеристики паровых пузырьков в жидкометаллическом теплоносителе на выходе из аварийного парогенератора, то вопрос о том, сходится ли численное решение в отношении указанных параметров и если сходится, то к чему, вполне однозначно разрешается. Необходимо подчеркнуть важность именно экспериментальной валидации, поскольку возможность расчетно-аналитической верификации в области турбулентных течений, представляющих основной интерес при применении DNS-методов, не просто ограничена, а практически отсутствует вследствие отсутствия соответствующих точных аналитических решений исходных (не упрощенных и не осредненных) уравнений гидродинамики в указанной области.

Можно отметить еще, что если отказаться от идеи построить «априорно корректный» метод из первых принципов, а опираться вместо этого на экспериментальную проверку, класс методов прямого численного моделирования можно

⁴ В каком-то смысле подобные результаты носят негативный характер, так как допущение о существовании решения лишь в среднем при отсутствии сильного решения может быть интерпретировано как пригодность уравнений Навье-Стокса для описания движения жидкости в среднем, но не для локального описания, что означало бы в общем случае некорректность DNS-методов, опирающихся на локальное описание, при сохранении корректности методов, использующих осредненные уравнения.

существенно расширить, а их применение для задач, не требующих строгого обоснования, существенно упростить. В частности, допустимыми становятся методы, в которых локальная устойчивость и сходимости не имеет места, исчезает необходимость доказывать, что локальные свойства численного решения те же, что и у реального течения, с другой стороны, допустимым становится использование различных приемов регуляризации и так далее.

Начальные и граничные условия

Переходя к вопросу о достаточности первых принципов для решения задач гидродинамики, следует отметить, прежде всего, что помимо собственно уравнений гидродинамики (уравнений неразрывности, движения и энергии, выводимых из соответствующих законов сохранения с использованием определенных допущений), которые обычно и называются «первыми принципами», полная формулировка задачи обязательно включает в себя начальные и граничные условия и свойства компонентов течения. Задать их применительно к реальным задачам исходя только из первых принципов обычно невозможно.

Хорошо известно, что свойства поверхности, граничащей с жидкой средой, оказывают определяющее влияние на процессы гидродинамики и теплообмена: сопротивление в жидкости зависит (в общем случае) от величины шероховатости поверхности, при кипении на поверхности в реальных условиях зародыши паровых пузырьков образуются в микроскопических углублениях на этой поверхности и так далее. В случае традиционных методов детальные микроскопические свойства поверхности не задаются, а неявно учитываются в эмпирических корреляционных соотношениях, достоверность которых как раз и проверяется, в том числе, при валидации на экспериментальных данных. В случае DNS-метода детальные свойства поверхности должны быть, во-первых, каким-то образом получены, а во-вторых, заданы в виде граничного условия. Если метод претендует на получение результатов прямым путем исходя из первых принципов и детальных свойств реальной поверхности, то, например, при моделировании кипения характерный масштаб детализации должен быть много меньше, чем критический радиус зародышевого пузырька (который, например, для воды при параметрах, характерных для реакторов и парогенераторов АЭС,

имеет менее чем микронный размер), и одновременно много меньше, чем размер наименьших вихрей. Такое требование справедливо, по крайней мере, пока не доказано, что течение в вязком подслое гарантированно является ламинарным и турбулентные пульсации внутрь вязкого подслоя не проникают. Таким образом, гидравлически гладкая в обычном (техническом) смысле поверхность, для которой сопротивление однофазному потоку не зависит от шероховатости, совсем не обязательно является таковой по отношению к DNS-методу, претендующему на получение результата «из первых принципов». Корректность процесса получения и задания столь сложных исходных данных сама по себе требует обоснования. Если же в DNS-методе используются какие-либо опытные корреляции, то, разумеется, ни о какой модели «из первых принципов» говорить уже не приходится, зато, помимо самих корреляций, обоснование требуется и для подтверждения корректности комбинирования прямого численного моделирования в жидкой среде и интегрально (не локально) задаваемых граничных условий.

Приведем еще два примера. Первый пример относится к простому и хорошо изученному случаю течения в трубе. Из опыта известно [5], что критическое число Рейнольдса (Re) для течения в трубе (около 2 300) представляет собой нижнюю границу между ламинарным и турбулентным течениями. При числе Рейнольдса менее 2 300 сколь угодно сильные начальные возмущения затухают, возмущенное течение становится ламинарным. При $Re > 2 300$ течение может стать турбулентным, а может оставаться ламинарным, это зависит от величины возмущения. В экспериментах путем тщательной стабилизации входного потока течение в трубе удавалось сохранять ламинарным по крайней мере до $Re \sim 10^5$. Очевидно, что вопрос о том, какова величина возмущения, не может быть решен на основе каких-либо «первых принципов», поскольку она определяется свойствами конкретного объекта. Если в качестве начальных и граничных (на входе в трубу) условий в DNS-методе будет задано идеальное ламинарное течение, численное решение, в зависимости от числа Рейнольдса и деталей реализации метода, либо так и останется ламинарным (если решение будет устойчиво по отношению к малым возмущениям, вносимым численным решением), либо перейдет в турбулентное, но этот переход будет обусловлен внутренними свойствами метода (соотношением между вычислительной погрешностью и границами устойчивости метода). Оба решения не будут иметь ничего общего с реальностью,

когда вид течения и момент перехода ламинарного течения в турбулентное определяется начальными и граничными условиями.

Второй пример относится к двухфазному течению. Для небольших пузырьков газа (пара) или небольших капель число Рейнольдса достаточно мало, чтобы можно было пренебречь силами инерции в уравнениях движения. Для таких уравнений известно точное решение, аналогичное решению Стокса задачи обтекания твердой сферы вязким потоком. Различие между решениями обусловлено подвижностью границы раздела фаз, в отличие от обтекания твердой сферы, где на границе задается условие «прилипания» жидкости (равенство нулю касательной компоненты скорости). В случае когда динамическая вязкость дисперсной фазы много выше вязкости окружающей среды (вязкая капля в воздухе), решение, как и следует ожидать, переходит в решение для задачи обтекания твердой сферы. Если же, наоборот, дисперсная фаза маловязкая (пузырек газа в жидкости), то коэффициент сопротивления пузырька будет в полтора раза меньше, чем коэффициент сопротивления твердой сферы такого же диаметра. Стоит подчеркнуть, что такой результат получен именно путем точного решения задачи, поставленной из первых принципов.

Оказывается, тем не менее [6], что в экспериментах такой результат обычно не находит подтверждения: сопротивление пузырька практически такое же, как у твердой сферы. Наиболее приемлемое объяснение заключается во влиянии поверхностно-активных веществ, даже небольшая примесь которых приводит к тому, что поверхность раздела фаз становится «жесткой». Но независимо от истинной причины этого явления имеет место ситуация, когда полученное из первых принципов решение оказывается некорректным из-за пренебрежения факторами, в других условиях не оказывающими никакого влияния на процесс, и единственным способом выявления такого расхождения теории и реальности может быть экспериментальная проверка. Необходимо отметить, что расхождение никак не связано с упрощениями, сделанными при постановке и решении задачи: исключение инерционных членов из уравнения никак не связано со свойствами межфазной поверхности, численное решение полных уравнений Навье-Стокса для пузырька газа в идеальной чистой жидкости дало бы тот же самый некорректный результат.

Стоит сказать еще о важности этой задачи применительно к обоснованию безопасности ОИАЭ

с использованием CFD-методов (не только DNS). Во всех случаях⁵, когда имеет место двухфазное течение, а это, в зависимости от ОИАЭ, и аварийные режимы, и режимы нормальной эксплуатации: течение пароводяной смеси в канале, барботаж, движение паровых и газовых пузырьков в жидко-металлическом теплоносителе – результат расчета интегральных характеристик потока существенно зависит от сопротивления паровых пузырей потоку жидкости. Традиционные методы лишены этой трудности, поскольку в них используются экспериментально обоснованные корреляции, но для CFD-методов необходимо корректное описание локальной динамики фаз.

Нельзя оставить в стороне и вопрос о теплофизических свойствах среды. Возможность получить их из первых принципов в настоящее время отсутствует (за исключением разве что случая идеального газа). Однако экспериментальные выражения для теплофизических свойств практически всегда получены в условиях, когда исследовалось достаточно большое количество вещества. Применяются же эти выражения в случае DNS-методов, напротив, к весьма малым объемам (дифференциальная постановка задачи вообще подразумевает справедливость этих выражений для бесконечно малого объема). Таким образом, и этот вопрос требует по крайней мере обсуждения.

Как и в случае проблем сходимости, описанные проблемы задания начальных и граничных условий решаются путем экспериментальной валидации. Стоит отметить, что приведенные выше примеры подчеркивают важность обоснования в процессе экспертизы программы для ЭВМ полноты матрицы валидации. Нет сомнений в том, что нельзя допускать, чтобы явления, неучтенные в экспериментах, проявились в виде негативных для безопасной эксплуатации последствий на реальных ОИАЭ. Кроме того, проблемы второй группы в существенной мере распространяются не только на DNS, но и на другие CFD-методы. В этой связи можно отметить, например, что при верификации и валидации CFD-методов в режимах течений в диапазоне чисел Рейнольдса, соответствующих началу перехода от ламинарного к турбулентному течению, нельзя просто постулировать режим течения (ламинарный или турбулентный), поскольку при одном и том же числе Рейнольдса в расчетах и использованных

⁵ Разумеется, при больших относительных скоростях фаз формула Стокса для обтекания сферы неприменима, но корректность постановки условий на межфазной границе по-прежнему сохраняет свое значение.

для валидации экспериментах может иметь место один режим, а на реальном ОИАЭ – другой.

Основные уравнения

Наконец, рассмотрим вопрос о том, в какой мере сами уравнения гидродинамики представляют собой «первые принципы» применительно к использованию DNS-методов. Хотя уравнения неразрывности, движения (Навье-Стокса) и энергии выводятся из соответствующих законов сохранения массы, импульса и энергии, при выводе используются определенные предположения о свойствах среды: предположения о взаимосвязи между обобщенными силами и потоками (связь между тензором скоростей деформаций и тензором вязких сопротивлений, связь между градиентом температуры и тепловым потоком) и, собственно, предположение о сплошности среды.

Наибольшие сомнения обычно вызывает применение уравнений Навье-Стокса. Опытные данные, которыми мы располагаем, практически всегда относятся к интегральным характеристикам течения. Непосредственно выполнить проверку, например, полных соотношений между тензором скоростей деформаций и тензором вязких сопротивлений невозможно, в вискозиметрах проверяется лишь частный случай – закон трения Ньютона. Можно, разумеется, сослаться на то, что используя уравнения Навье-Стокса, мы, в тех случаях, когда имеется точное решение или некоторое интегральное соотношение на основе таких уравнений, получаем результат, совпадающий с экспериментом. Но для подтверждения корректности DNS-методов требуется нечто значительно большее – нужно доказать, что уравнения применимы в малом масштабе: на уровне самых малых вихрей, переходящих в вязкое течение. Здесь требуется показать и то, что, например, вода (или какой-либо другой теплоноситель) остается ньютоновской жидкостью с учетом наличия в ней примесей. Наконец, требуется показать, что на малых масштабах корректным остается допущение о сплошности среды, либо же внести поправки, учитывающие кинетические эффекты, и обосновать их корректность, в том числе корректность включения их в DNS-метод. В случае моделирования двухфазных течений проблемакратно усугубляется необходимостью обоснования корректности описания межфазной границы.

Нет однозначного ответа и на вопрос, в какой форме уравнения гидродинамики представляют собой «первые принципы», а в какой уже являются

упрощениями, применимость которых требует отдельного обоснования. Так, даже для однофазного течения наиболее общая форма уравнений включает в себя сжимаемость и вторую (объемную) вязкость. На первый взгляд, кажется разумным постулировать несжимаемость, что автоматически исключает и влияние второй вязкости, при описании однофазного течения такой среды, как жидкометаллический теплоноситель. Однако нет доказательства, что при этом не теряются некие существенные свойства течения, из-за чего при моделировании проявляются нефизические эффекты (в чем-то подобно тому, как пренебрежение вязкостью при больших числах Рейнольдса дает во многих случаях нефизические результаты, несмотря на успешное использование уравнений Эйлера в ряде задач).

Заключение

Приведенные в статье примеры отнюдь не исчерпывают все возможные проблемы попыток обоснования применимости DNS-методов «из первых принципов», напротив, они в большей степени представляют собой иллюстрацию основных тезисов о сходимости, начальных и граничных условиях и самих уравнениях. По этой причине примеры выбирались в значительной мере из соображений

наглядности и знакомства широкого круга специалистов с описываемыми в них явлениями. Ошибочным поэтому было бы полагать, что если для какой-то частной задачи или области применения метода удастся либо разрешить описанные в примерах проблемы, либо показать их неприменимость к рассматриваемому случаю, то это позволит отказаться от экспериментальной валидации программы для ЭВМ.

В то же время автор надеется, что подробный анализ проблем, затронутых в этих примерах, может быть полезен при обосновании полноты матрицы верификации.

Все сказанное выше в статье несколько не означает непригодности DNS-методов вообще. Напротив, такие методы, даже при отсутствии экспериментального обоснования, вполне могут найти применение в качестве средства исследования, средства инженерной оценки и оптимизации технических решений, средства для вспомогательных расчетов для разработки методов решения уравнений, осредненных по Рейнольдсу и так далее. Несомненна и общенаучная значимость развития таких методов. Некорректным является лишь тезис о том, что программы для ЭВМ на основе DNS-методов могут быть использованы для обоснования безопасности ОИАЭ без экспериментальной валидации.

Литература

1. Об использовании атомной энергии: Федер. закон от 21 ноября 1995 г. № 170-ФЗ.
2. Требования к составу и содержанию отчета о верификации и обосновании программных средств, применяемых для обоснования безопасности объектов использования атомной энергии. РД-03-34-2000: утверждены приказом начальника Госатомнадзора России от 28 декабря 2000 г. № 122.
3. Рекомендации «круглого стола» Комитета Государственной Думы по энергетике на тему «Законодательное регулирование ядерных энерготехнологий нового поколения». Томск, 12 июля 2019 г. URL: <http://www.komitet2-13.km.duma.gov.ru/Rabota/Rekomendacii-po-itogam-meropriyatij/item/19547390/> (дата обращения: 01.06.2021).
4. Федеральные нормы и правила в области использования атомной энергии. Правила ядерной безопасности реакторных установок атомных станций. НП-082-07: утверждены постановлением Федеральной службы по экологическому, технологическому и атомному надзору от 10 декабря 2007 г. № 4.
5. Шлихтинг Г. Теория пограничного слоя. – М.: Наука, 1974. – С. 416.
6. Лабунцов Д. А., Ягов В. В. Механика двухфазных систем. – М.: Издательский дом МЭИ, 2007. – С. 222–223.

References

1. Federalnyj zakon “Ob ispolzovanii atomnoj energii” [Federal law no. 170-FZ “On the usage of the nuclear power”]. 1995.

2. Trebovaniya k sostavu i sodержaniyu otcheta o verifikatsii i obosnovanii programmnyh sredstv, primenyaemyh dlja obosnovaniya bezopasnosti objektov ispolzovaniya atomnoj energii (RD-03-34-2000) [Requirements for the content of the report on verification and justification of the computer code for nuclear object safety justification (RD-03-34-2000)]. 2000.

3. Rekomendatsii “kruglogo stola” Komiteta Gosudarstvennoj Dumy po energetike na temu “Zakonodatelnoe regulirovanie jadernyh energotekhnologij novogo pokolenija”. Tomsk, 12 ijulja 2019 g. [The State Duma Energy Committee “round table” recommendations on the topic “Law regulations for new generation nuclear energy technologies”, 12th July 2019, Tomsk]. URL: <http://www.komitet2-13.km.duma.gov.ru/Rabota/Rekomendacii-po-itogam-meropriyatij/item/19547390/> (reference date: 01.06.2021).

4. Federal'nye normy i pravila v oblasti ispol'zovaniya atomnoj energii “Pravila jadernoj bezopasnosti reaktornyh ustanovok atomnyh stantsij” (NP-082-07) [Federal Standards and Rules in the Field of Atomic Energy Use “Nuclear safety of the nuclear plants reactor facilities regulations” (NP-082-07)]. 2007.

5. Shlihting G. (1974). Teorija pograničnogo sloya [Boundary layer theory]. Moscow: Nauka [in Russian].

6. Labuntsov D. A., Jagov V. V. (2007). Mehanika dvuhfaznyh system [The two-phase flow mechanics]. Moscow: MPEI publishing house [in Russian].

Сведения об авторах

Катковский Сергей Евгеньевич, кандидат технических наук, старший научный сотрудник отдела безопасности атомных станций, федеральное бюджетное учреждение «Научно-технический центр по ядерной и радиационной безопасности» (107140, Москва, ул. Малая Красносельская, д. 2/8, корп. 5).

Author credentials

Katkovskii Sergei Evgenievich, Senior Researcher of Division for Safety of Nuclear Plants, Scientific and Engineering Centre for Nuclear and Radiation Safety (2/8, building 5, Malaya Krasnoselskaya str., Moscow, 107140), e-mail: katkovskiy@secnrs.ru.

Для цитирования

Катковский С. Е. О необходимости верификации и валидации методов прямого численного моделирования вычислительной гидродинамики // Ядерная и радиационная безопасность. 2021. № 3 (101). С. 16–25. DOI: 10.26277/SECNRS.2021.101.3.002.

For citation

Katkovskii S. E. On the need of verification and validation of computational fluid dynamics direct numerical simulation methods. Nuclear and Radiation Safety, 2021, no. 3 (101), pp. 16–25. DOI: 10.26277/SECNRS.2021.101.3.002 [in Russian].

