

О. О. Гейко, І. А. Варава

НТУУ «КПІ імені Ігоря Сікорського»

Берестейський проспект, 37, 03056 Київ, Україна

Особливості програмних рішень в області верифікації і валідації чисельних моделей

Систематизовано сучасні підходи та програмні можливості для верифікації і валідації (V&V) чисельних моделей у контексті актуальних галузевих стандартів і настанов. Розглянуто стандартизацію життєвого циклу моделі та вимоги до доказовості V&V (зокрема практики NASA, DoD і серію ASME V&V/VVUQ), а також узагальнено ключові функції, що реалізуються в сучасних програмних рішеннях: бібліотеки тестових задач і метод виготовлених рішень (MMS), репозиторії валідаційних даних і зіставлення з експериментом, автоматизація регресійних перевірок і «безперервна» валідація, статистичні методи та кількісна оцінка невизначеності (UQ), ризик-орієнтоване планування глибини V&V і підтримка сценаріїв цифрових двійників. Запропоновано практичний набір критеріїв вибору інструментів і вимоги до модульної V&V-підсистеми, інтегрованої з чисельними розв'язувачами та процесами CI/CD, що забезпечує відтворюваність, трасованість артефактів і формалізовані критерії прийнятності результатів.

Ключові слова: програмне забезпечення, верифікація, валідація, моделювання, моделювання процесів, інформаційні технології, контроль якості, аналіз.

Вступ

Сучасне проектування та наукові дослідження все більше спираються на комп'ютерне моделювання та числові методи. Заміна дорогих експериментів і прототипів числовими моделями може значно знизити витрати та пришвидшити цикли розробки. Однак достовірність результатів моделювання може бути забезпечена лише за умови належної перевірки та валідації моделей (V&V). Верифікація та валідація — це два тісно пов'язані процеси, метою яких є забезпечення надійності обчислювальних моделей. Верифікація відповідає на запитання, чи правильно реалізовано і розв'язано математичну модель (чи «правильно розв'язуються рівняння»), тоді як валідація перевіряє, чи адекватно сама математична модель описує реальний фізичний процес (чи «правильні рівняння розв'язуються»). Іншими словами,

верифікація має за мету підтвердити, що числовий алгоритм і програмна реалізація є безпомилковими та можуть давати збіжні результати; валідація має за мету підтвердити, що отримані результати відповідають фактичній ситуації змодельованої системи або експериментальним даним [1].

Наразі обчислювальні моделі широко використовуються в таких галузях як авіація, енергетика, медицина та військова справа, де ціна помилок надзвичайно висока. Наприклад, аналітики зазначають, що виробники поступово переключають свою увагу з масштабних фізичних випробувань на комп'ютерне моделювання, але водночас наголошують на тому, що достовірність результатів моделювання має бути підтверджена за допомогою відповідних процедур верифікації і валідації (V&V) [2]. Зі збільшенням обчислювальної потужності та появою нових технологій (наприклад, цифрових двійників реальних об'єктів) удосконалювалися підходи та процедури верифікації і валідації. Це зумовило розвиток сучасних програмних рішень, спрямованих на підвищення надійності числових моделей.

Аналіз останніх досліджень і стандартів

Існує ряд стандартів та керівних документів, що уніфікують процес верифікації та валідації моделей. Зокрема, NASA розробило власний стандарт NASA-STD-7009 (остання версія — Редакція В, 2024, рис. 1, 2), який встановлює єдині вимоги до розробки та використання моделей і симуляцій у проектах NASA для забезпечення їхньої якості та визначає критерії прийнятності результатів [3]. Стандарт охоплює весь життєвий цикл моделі та вводить поняття оцінки достовірності моделі. Після катастрофи шатла «Колумбія» NASA підвищило вимоги до V&V і розробило формальний метод оцінки достовірності моделей на основі комплексу існуючих стандартів [3].

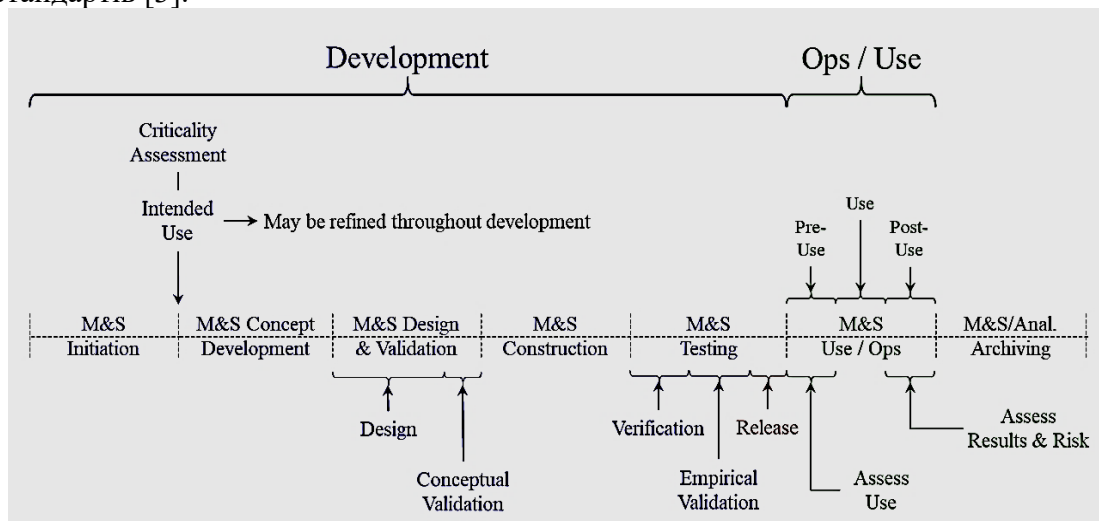


Рис. 1. Життєвий цикл моделі та симуляції (M&S Life Cycle) [3]

У військовій сфері процес VV&A моделей також регулюється. У грудні 2024 року Міністерство оборони США оновило Директиву 5000.61/5000.102, яка визначає політику та процедури верифікації, валідації і сертифікації моделей для експлуатаційних випробувань і оцінки живучості техніки [4]. Згідно з цими правилами,

перед використанням моделі в прийнятті критичних рішень необхідно призначити відповідальну особу, що пройшла офіційну верифікацію і сертифікацію цієї моделі.

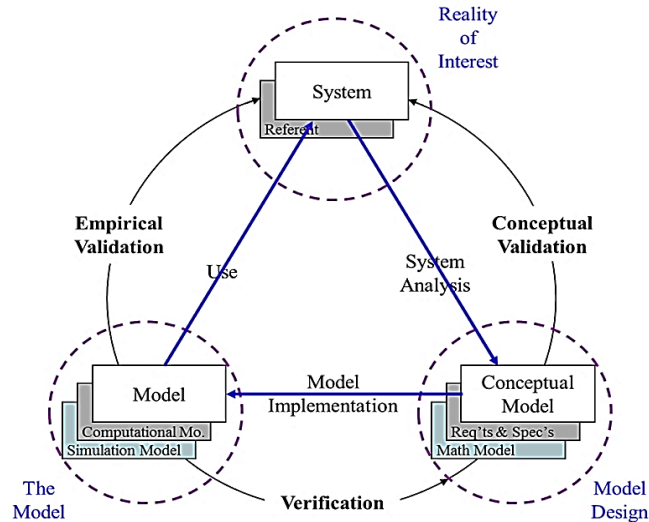


Рис. 2. Взаємозв'язки процесів V&V у M&S [3]

Американське товариство інженерів-механіків (ASME) також створило серію стандартів V&V для різних галузей (наприклад, V&V 10–2019 для механіки твердого тіла, V&V 20–2009 для CFD та V&V 40–2018 для медичних пристроїв) [2]. У 2022 році ASME випустило універсальний стандарт VVUQ 1-2022, що узагальнює термінологію та методи верифікації, валідації і кількісної оцінки невизначеності (UQ) у комп'ютерному моделюванні [2]. Новий компонент UQ дозволяє кількісно оцінювати вплив невизначеностей на результати моделювання [2]. Згідно з визначеннями ASME, верифікація перевіряє відповідність комп'ютерної моделі її математичному опису, валідація — відповідність результатів моделювання реальному фізичному процесу, а кількісна оцінка невизначеності визначає, як зміни чисельних методів чи фізичних параметрів впливають на результати моделі [2]. Усі три аспекти (V, V та UQ) мають забезпечити достатню впевненість у моделі перед її практичним застосуванням.

Останніми роками запропоновано низку методів верифікації і валідації. Для верифікації числових кодів широко застосовується *Method of Manufactured Solutions* (MMS) — метод створених рішень. Його суть полягає у виборі відомої аналітичної «штучної» функції і підлаштуванні системи рівнянь відповідними джерелами та граничними умовами, щоби це рішення виконувало ці рівняння. Потім код розв'язує такий штучний тестовий випадок, а числовий результат порівнюється з аналітичним рішенням. MMS є потужним універсальним інструментом для виявлення помилок реалізації, особливо коли простих точних рішень реальних задач не існує. Дослідники Національних лабораторій Сандії, наприклад, успішно застосували MMS для перевірки кількох власних кодів [1]. Стандарти ASME V&V 20 та 10 офіційно рекомендують використовувати MMS, і регуляторні органи також надають інструменти для цього підходу. Зокрема, Управління з контролю за харчови-

ми продуктами та ліками США (FDA) у 2020 році представило шаблон на базі Python/SymPy для автоматичної генерації потрібних джерел і граничних умов під задане «штучне» рішення — для перевірки комерційного коду кінцевих елементів у біомедичній задачі [5]. Такий підхід підкреслює, що перевірка коду є першим кроком у демонстрації валідності моделі, особливо якщо результати моделювання використовуються для ухвалення критично важливих рішень (наприклад, щодо медичних імплантів).

Отже, накопичено значний базис знань і рекомендацій щодо забезпечення коректності чисельних моделей. Далі розглянемо, які сучасні програмні рішення та засоби реалізовано на практиці для підтримки V&V, і які особливості вони мають.

Особливості програмних рішень для V&V чисельних моделей

Сьогодні провідні системи числового моделювання (як комерційні, так і з відкритим вихідним кодом) мають спеціальні інструменти та можливості для верифікації і валідації, які інтегровані в їхню архітектуру. Розробники програмного забезпечення усвідомлюють, що користувачам необхідно перевіряти точність своїх розрахунків, тому можливості верифікації і валідації часто надаються «з коробки». Розглянемо основні особливості таких рішень.

1. Набори тестових задач для верифікації коду. Більшість пакетів програмного забезпечення для моделювання мають власні набори верифікації — приклади задач з відомими аналітичними або еталонними рішеннями, які можна використовувати для перевірки правильності програмних інструментів. Наприклад, Ansys надає користувачам посібник з верифікації — збірку десятків тестових задач з різних фізичних дисциплін, які демонструють функціональність коду та можуть бути використані для перевірки його правильності [6]. Посібник містить опис задачі, вхідні дані та сертифіковані (еталонні) результати, які користувачі можуть порівняти з результатами інсталяції Ansys. Крім того, Ansys розробив автоматизований пакет верифікаційних тестів, який дозволяє виконувати всі тестові випадки на певній системі користувача, автоматично порівнювати результати зі стандартом і генерувати звіт. Як результат, інженери можуть бути впевнені, що точність їхніх розрахунків не знизиться після встановлення нової версії або зміни програмного середовища. Подібні бібліотеки прикладів доступні для інших систем. Зокрема, COMSOL Multiphysics включає низку моделей валідації у свою бібліотеку додатків, де числові рішення порівнюються з аналітичними розрахунками або експериментами [1]. Ці приклади організовані за частинами сутностей, що допомагає користувачам швидко знаходити тести для перевірки їхнього типу проблеми. Популярна відкрита платформа OpenFOAM також розробляє спільний репозиторій для верифікації і валідації: документація містить список стандартних випадків (динаміка рідин, турбулентність, теплопередача тощо), де результати моделювання порівнюються з довідковими даними [7]. Користувачі можуть виконувати ці випадки, щоби перевірити правильність і точність числових методів OpenFOAM для своїх проблем.

2. Порівняння з експериментальними даними і валідаційні бази. Щоби перевірити, наскільки добре модель відтворює реальність, сучасне програмне забезпечення надає приклади валідації — порівняння з фізичними експериментами або відомими експериментальними даними. Наприклад, вищезгадана бібліотека OpenFOAM містить приклади, які порівнюють числові результати з експеримен-

тальними даними (наприклад, обтікання крила, потік у каналі тощо) [7]. Аналогічно, Ansys та інші постачальники регулярно публікують тестові випадки (бенчмарк-кейси), які порівнюють свої розв'язувачі з вимірюваннями або загальноприйнятими еталонними рішеннями. Існування таких репозиторіїв валідації може підвищити впевненість користувачів, оскільки це показує, що модель може відтворювати реальні фізичні ефекти з прийнятною точністю. Крім того, дослідницька спільнота створила відкриті репозиторії валідації — наприклад, для обчислювальної гідродинаміки (CFD) існує серія експериментів (ERCOFTAC, NASA CFD валідаційні випадки тощо), які доступні розробникам коду. Сучасні тенденції також включають концепцію цифрових двійників, де моделі безперервно валідуються з використанням даних датчиків від реальних об'єктів. Це нова концепція, і її методи верифікації і валідації все ще перебувають у стадії розробки: наприклад, Американське бюро судноплавства (ABS) опублікувало в 2024 році посібник, який розглядає деталі верифікації і валідації цифрових двійників на додаток до традиційних моделей і симуляцій [8]. Варто зазначити, що цифровий двійник, як віртуальний аналог фізичного активу протягом усього його життєвого циклу, потребує нових методів для підтвердження своєї надійності, зокрема поступової інтеграції моделі з реальними даними та відстеження відмінностей у режимі реального часу.

3. Автоматизація тестування та безперервна валідація. Найновіші програмні рішення прагнуть максимально автоматизувати процес верифікації і валідації. Прикладом є вже згаданий автоматизований пакет тестування Ansys, який дозволяє виконувати сотні валідаційних прогонів одним натисканням кнопки [6]. Іншим аспектом автоматизації є безперервна інтеграція та тестування під час розробки коду. У великих проєктах це реалізується, коли кожна зміна в програмі (новий код або виправлення) автоматично тестується за допомогою набору завдань валідації, і лише якщо тести проходять успішно, зміна додається до основного репозиторію. Такі методи давно використовуються в традиційній програмній інженерії і зараз стають стандартом у сфері наукового програмного забезпечення. Наприклад, відкритий проєкт MOOSE (Multiphysics Object-Oriented Simulation Environment) у Національній лабораторії Айдахо має вбудовану систему регресійного тестування для кожної твердотільної моделі та здатний запускати тести паралельно на кластері під час оновлення коду. Це гарантує, що оновлення не порушує валідацію існуючої моделі. Загальна тенденція полягає в тому, що процес верифікації і валідації все більше інтегрується в цикл розробки програмного забезпечення: від фази написання коду (через модульне тестування числовими методами) до фази випуску (через серію регресійних завдань для приймального тестування).

4. Оцінка невизначеності та статистичні методи для валідації моделі. Сучасні програмні пакети оснащені інструментами для аналізу чутливості та невизначеності, які тісно пов'язані з валідацією. При порівнянні моделі з експериментом необхідно не тільки визначити різницю, але й оцінити, чи знаходиться ця різниця в межах допустимого діапазону, враховуючи похибки вимірювань і розрахунків. Для цього необхідні статистичні стандарти та показники. Наприклад, стандарт ASME VVUQ 20.1 надає індикатор для кількісної оцінки узгодженості розподілу результатів моделювання з експериментальними результатами (індикатор багатовимірної валідації) [2]. Модулі для аналізу Монте-Карло, кількісної оцінки невизначеності параметрів і побудови довірчих інтервалів для вихідних даних усе частіше інтегруються

в програмні засоби. Наприклад, платформа DAKOTA (розроблена Sandia Laboratories) може бути підключена до різних симуляторів для виконання аналізу невизначеності та досліджень параметрів, генеруючи статистичні оцінки точності моделі. Іншим прикладом є модуль UQ у Simcenter STAR-CCM+, який дозволяє користувачам вивчати, як зміна вхідних параметрів (таких як моделі турбулентності) впливає на результати розрахунків CFD, тим самим підтверджуючи надійність прогнозів. Отже, кількісна оцінка невизначеності стала невід'ємною частиною процесу валідації моделі в програмних пакетах.

5. Урахування критичності моделі та ризик-орієнтоване V&V. Ще однією характерною особливістю є поява підходів, які враховують ризик використання моделі під час планування глибини оцінки та верифікації. Не всі моделі вимагають однакової ретельної перевірки: якщо модель використовується для допомоги в оцінці, і її результати мало залежать від неї, обсяг оцінки та верифікації може бути невеликим; навпаки, моделі, що впливають на безпеку або критичні рішення, повинні бути ретельно перевірені. Цей підхід, заснований на ризиках, чітко визначений у стандарті ASME V&V 40 (для медичних виробів) і посібнику ABS 2024. По суті, на початку проекту необхідно визначити критичність або важливість моделі для середовища її використання та відповідно вибрати ступінь серйозності оцінки та верифікації. Відповідні документи рекомендують класифікувати модель відповідно до ризику та критичності й «оптимізувати» діяльність з оцінки та верифікації до цього рівня. Результати оцінки та верифікації потім розглядаються як частина загальної оцінки достовірності моделі [8]. Наприклад, для медичних симуляторів, що використовуються для імплантів (від яких залежить схвалення регуляторних органів), потрібен найвищий рівень валідації моделі (усі ключові припущення перевіряються, помилки кількісно визначаються, а результати підтверджуються кількома експериментами). На противагу цьому, моделі, що використовуються лише в попередніх дослідженнях, можуть не вимагати значної формальної валідації. Сучасні програмні засоби підтримують цей підхід: наприклад, вони можуть зберігати метадані про проведені дослідження верифікації і валідації і автоматично генерувати звіти про достовірність для аудиту або сертифікації. Як результат, користувачі або технічні керівники проектів можуть чітко розуміти достовірність моделі в конкретному середовищі застосування та межі її передбачуваності.

6. Підтримка галузевих стандартів і сертифікації. Розробники комерційного програмного забезпечення все більше стурбовані тим, чи відповідають їхні продукти вимогам галузевої верифікації і валідації. Як згадувалося раніше, Ansys сертифікована за стандартом ISO 9001 для розробки інженерного програмного забезпечення понад 25 років [6]. Це означає, що компанія має систему якості, яка включає тестування та верифікацію програмних компонентів. Для клієнтів в особливо чутливих галузях Ansys також надає спеціальні послуги із забезпечення якості (QA). Наприклад, для ядерної промисловості існує угода про надання послуг з контролю якості, за якою Ansys надає додаткову гарантію якості: сертифікат відповідності коду, повідомлення про всі виявлені помилки (так звані помилки 3-го рівня, які можуть несвідомо призвести до неточних результатів) тощо [6]. Ці заходи пов'язані з нормативними вимогами (наприклад, ядерна промисловість вимагає дотримання положень 10CFR50 Додатку В щодо якості процедур). Аналогічно, в медичній сфері, з появою стандарту ASME V&V 40 і публікацією рекомендацій FDA, моде-

льні дослідження, що подаються до регуляторних органів, повинні бути підтвержені документально оформленою верифікацією та валідацією. Іншими словами, сучасні програмні рішення не існують ізольовано від зовнішніх стандартів: навпаки, вони надають користувачам усі інструменти для виконання вимог стандартів V&V і належного документування процесу верифікації моделі.

Критерії вибору ПЗ для V&V. На практиці інструмент підтримки V&V доцільно обирати не лише за наявністю окремих функцій, а й за здатністю забезпечити відтворюваний і доказовий процес перевірки моделі. До базових критеріїв належать:

1) трасованість і відтворюваність (provenance): збереження вхідних даних, конфігурацій солвера, версій коду/середовища, журналів і артефактів запусків для повторення результатів та аудиту;

2) автоматизація перевірок: можливість запуску MMS/еталонних кейсів, досліджень збіжності (в т.ч. із GCI), регресійних тестів із контрольованими допусками та формалізованими правилами «pass/fail»;

3) підтримка UQ/SA: аналіз чутливості, невизначеності, довірчі інтервали та статистичні метрики узгодженості з експериментом;

4) інтеграція з інфраструктурою проєкту: робота в CI/CD, оркестрація масових прогонів локально/на HPC, стандартизована звітність (PDF/HTML/машиночитні формати);

5) ризик-орієнтованість: можливість масштабувати глибину V&V залежно від критичності застосування моделі (регуляторні сценарії, безпека тощо).

Узагальнення.

У таблиці наведено вичерпний огляд поширених підходів, інструментів V&V та їхнього поточного стану, а також обговорення недоліків і потреб у дослідженнях.

Огляд поширених підходів до верифікації і валідації обчислювальних моделей, їхнього використання та поточні обмеження

Аспекти верифікації і валідації	Загальні методи та інструменти	Сильні сторони/ Застосування	Обмеження та виклики
Перевірка коду <i>Забезпечення правильності реалізації моделі</i>	Аналітичні рішення та бенчмарки: порівняння результатів моделі з аналітичними рішеннями. Метод виготовлених рішень (MMS): вводиться відоме точне рішення, додавши вихідні терміни. Модульне тестування та огляди: систематичне налагодження, рецензування та тестування компонентів коду.	Рано виявляє помилки програмування та помилки реалізації математики. MMS та бенчмарк-тести можуть довести правильність коду для спрощених випадків. Модульні тести та огляди коду використовують експертну думку для підвищення надійності.	Аналітичні рішення можуть існувати лише для простих випадків, а не для складних реальних моделей. MMS вимагає проєкування промислових рішень і може зайняти багато часу для застосування у великих кодах.
Перевірка рішення <i>Забезпечення числових помилок у</i>	Дослідження уточнення сітки/часу: виконується моделювання з уточненою сіткою або меншими часовими кроками для перевірки збіжності (наприклад, екстраполя-	Кількісно визначає числову похибку: Тести на збіжність дають об'єктивні показники похибки дискретизації.	Інтенсивні обчислення: потрібно кілька прогонів з високою роздільною здатністю, особливо в 3D або мультифізичному моделюванні.

Аспекти верифікації і валідації	Загальні методи та інструменти	Сильні сторони/ Застосування	Обмеження та виклики
<i>допустимих межах</i>	<p>ція Річардсона та індекс конвергенції сітки). Оцінювачі помилок: деякі програми для моделювання (наприклад, пакети зі скінченними елементами) надають апостеріорні оцінки помилок для розв'язку. Аналіз чутливості та невизначеності: оцінюється, як числові збурення або зміни параметрів впливають на результати.</p>	<p>Уточнення та показники похибок формулюють впевненість у тому, що рішення наближається до справжньої неперервної моделі. Аналіз чутливості виявляє стійкість розчину по відношенню до змін.</p>	<p>Залежність від користувача: аналітики повинні вирішувати, коли конвергенція є «прийнятною» (немає суворої автоматизації в багатьох інструментах). Не всі комерційні інструменти мають надійну оцінку помилок для всіх сценаріїв; Користувачі можуть ігнорувати або неправильно використовувати ці показники.</p>
Валідація моделі: <i>Перевірка моделі з фізичною реальністю</i>	<p>Експериментальне порівняння: порівнюються результати моделювання з даними лабораторних/польових експериментів або спостережень. Статистичні метрики валідації: використовуються кількісні показники (показники помилок, кореляцію, довірчі інтервали) для оцінки узгодженості. Кількісна оцінка невизначеності (UQ): поширення вхідної невизначеності через модель, щоб побачити, чи охоплюють прогнози спостережувану поведінку (DAKOTA, UQToolkits).</p>	<p>Демонструє реальну актуальність: безпосередньо перевіряє, чи може модель передбачати реальні явища з необхідною точністю. Статистичні метрики надають валідності об'єктивність (наприклад, помилка в межах X% або в межах довірчих меж). UQ-аналіз допомагає відрізнити неадекватність моделі від невизначеності вхідних даних, підвищуючи довіру.</p>	<p>Обмеження даних: високоякісні експериментальні дані можуть бути дефіцитними або дорогими, що обмежує обсяг перевірки. Моделі можуть відповідати даним калібрування, але все одно виходять з ладу поза перевіреними умовами; Не існує строгого методу для висновку про достовірність за межами спостережуваних даних. Природна мінливість і шум вимірювань ускладнюють порівняння, вимагаючи ретельної статистичної обробки.</p>
Формальна верифікація <i>Застосування формальних методів для доведення властивостей моделей</i>	<p>Перевірка моделі: досліджуються усі можливі стани спрощеної моделі для перевірки логічних властивостей (інструменти: SPIN/Promela, PRISM для імовірнісних моделей). Доведення теорем: використання формальної логіки та помічників доведення (Coq, Isabelle) для доведення математичної правильності алгоритмів/рівнянь моделі.</p>	<p>Вичерпний (для даної моделі): може гарантувати дотримання певних властивостей (наприклад, умови безпеки, інваріанти) для всіх випадків у спрощеній моделі. Знаходить крайні випадки або логічні помилки, які можуть бути пропущені під час тестування.</p>	<p>Проблеми масштабованості: страждають від вибуху в просторі станів для складних або безперервних моделей (навіть помірні агентські мережі стають нерозв'язними). Вимагає радикальних спрощень і абстракцій реальних систем, щоб вони відповідали формальним інструментам, потенційно упускаючи важливі динаміки.</p>

Аспекти верифікації і валідації	Загальні методи та інструменти	Сильні сторони/ Застосування	Обмеження та виклики
Інтегровані фреймворки V&V <i>Стандарти, інструкції і комбіновані набори інструментів</i>	Стандарти процесів V&V: наприклад, ASME V&V 10, керівні принципи Міністерства оборони VV&A — окреслюють формальні кроки для планування, виконання та документування V&V. Фреймворки моделювання та симуляції (M&S): такі платформи, як DEVS (Discrete Event System Specification), які інтегрують симуляцію з аналізом, включаючи потенціал для поєднання з перевіркою моделі. Автоматизовані ланцюжки інструментів: нові набори інструментів, які автоматизують кілька етапів V&V (наприклад, Model Verification Toolkit (MVT) для моделей на основі агентів).	Стандарти заохочують строгість і повторюваність, надаючи спільну термінологію та «найкращі практики» для проєктів. Інтегровані фреймворки (DEVS тощо) можуть представляти гібридні системи та підтримувати спільне моделювання, що полегшує тестування складних взаємодій. Автоматизація (як і в MVT) може прискорити V&V і зменшити кількість людських помилок, спрощуючи завдання верифікації для дослідників.	Багато розробників не повністю дотримуються офіційних стандартів через час, вартість або проблеми з обізнаністю. Інтеграція фреймворків залежить від предметної області або ще перебуває на стадії розробки (наприклад, інструменти на основі DEVS). Автоматизовані пакети можуть ще не охоплювати всі аспекти V&V (наприклад, MVT в даний час обробляє детерміновані перевірки, але не має деяких функцій стохастичної перевірки).

Висновки та перспективи

Розвиток обчислювального моделювання був би неможливим без одночасної розробки інструментів верифікації і валідації — це єдиний спосіб забезпечити достовірність числових експериментів. Розробка стандартів і офіційних рекомендацій (NASA, DOD, ASME, FDA тощо) спрямовує розробку таких інструментів та уніфікує методи верифікації якості моделей у різних галузях.

Подальший розвиток галузі вимагає вирішення задачі автоматизації верифікації: створити модульну підсистему, інтегровану з типовими солверами та процесами CI/CD, яка забезпечує відтворюваність, трасованість і формалізовані критерії «pass/fail». Ядро такої підсистеми має включати: а) єдину схему метаданих і збереження артефактів (provenance) для відтворюваності запусків; б) автоматизований запуск MMS/еталонних кейсів і досліджень збіжності (з оцінкою порядку збіжності та GCI); в) регресійні тести з порівнянням із еталонними результатами та узгодженими допусками; г) оркестрацію масових прогонів локально/HPC і стандартизовану звітність, придатну для аудиту за бажаними стандартами (ISO, ДСТУ, тощо). Окремими викликами залишаються перевірка багатофізичних і багатомасштабних моделей, верифікація інтегрованих «цифрових двійників» складних об'єктів, керування якістю в сценаріях швидкої зміни версій солверів і середовищ, а також уніфікація форматів даних і метрик між різними інструментами.

Підсумовуючи, слід наголосити, що ключем до успішного застосування числового моделювання є прозорість і ретельність процедур його валідації. Сучасні програмні рішення надають усі необхідні для цього інструменти — від бібліотек тестових задач до інструментів оцінки невизначеності — і постійно вдосконалюю-

ться. Ця тенденція сприяє підвищенню довіри до комп'ютерних моделей, розширенню їхнього застосування в науці та техніці, а також дозволяє приймати обґрунтовані рішення на основі результатів числових експериментів.

Внесок роботи полягає в узагальненні функціональних вимог до сучасних інструментів V&V/VVUQ і формуванні практичного шаблону впровадження: критерії вибору, мінімальний життєвий цикл перевірок і вимоги до модульної V&V-підсистеми (provenance, автотести, UQ, оркестрація, стандартизована звітність), інтегрованої із CI/CD.

1. Verify Simulations with the Method of Manufactured Solutions. COMSOL Blog. URL: <https://www.comsol.com/blogs/verify-simulations-with-the-method-of-manufactured-solutions> (Last accesses: 18.08.2025).

2. Verification, Validation and Uncertainty Quantification (VVUQ). ASME URL: <https://www.asme.org/codes-standards/publications-information/verification-validation-uncertainty> (Last accesses: 18.08.2025).

3. Standard for Models and Simulations (NASA-STD-7009). NASA Technical Standards Program. URL: <https://standards.nasa.gov/standard/NASA/NASA-STD-7009> (Last accesses: 18.08.2025).

4. United States Department of Defense. DoD Manual 5000.102 Modeling and Simulation Verification, Validation, and Accreditation for Operational Test and Evaluation and Live Fire Test and Evaluation. 9 December 2024. URL: <https://www.esd.whs.mil/Portals/54/Documents/DD/issuances/dodm/5000102m.PDF?ver=9JF3bqGJFcGiF3J3KgSTNg%3D%3D> (Last accesses: 18.08.2025).

5. Center for Devices and Radiological Health (FDA). Method of Manufactured Solutions (MMS) Code Verification source term generation tool. URL: <https://cdrh-rst.fda.gov/method-manufactured-solutions-mms-code-verification-source-term-generation-tool> (Last accesses: 18.08.2025).

6. Ansys, Inc. Quality Assurance: Reliability & Accuracy. URL: <https://www.ansys.com/company-information/quality-assurance> (Last accesses: 18.08.2025).

7. OpenCFD Ltd. OpenFOAM: User Guide: Verification and Validation. URL: <https://www.openfoam.com/documentation/guides/latest/doc/guide-verification-validation.html> (Last accesses: 18.08.2025).

8. American Bureau of Shipping. Guidance Notes on Verification and Validation of Models, Simulations, and Digital Twins. November 2024. URL: https://ww2.eagle.org/content/dam/eagle/rules-and-guides/current/design_and_analysis/348-guidance-notes-on-verification-and-validation-of-models,-simulations,-and-digital-twins-2024/348-vandv-gn-nov24.pdf (Last accesses: 18.08.2025).

9. Anderson A.E., Ellis B.J., Weiss J.A. Verification, validation and sensitivity studies in computational biomechanics. *Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering*. 2007. **10**(3). P. 171–184. DOI: 10.1080/10255840601160484. (PubMed, PMC)

10. Kwaśniewski L. On practical problems with verification and validation of computational models. *Archives of Civil Engineering*. 2009. **55**(3). P. 323–346. (repo.pw.edu.pl).

Надійшла до редакції 14.09.2025