Machine Translated by Google

Энциклопедия

Автор и редактор

ЭльзейнСалах Эльзейн

ЧленIEEE

- Статьи повычислительной технике

Издательство IEEE, Великобритания



Этот контент является конфиденциальным

Machine Translated by Google

вычисление

MDPI

Статья

Количественная оценка компромиссов между здоровьем и экономикой: математическая модель динамики пандемии COVID-19

Дхика Сурья Пангесту [1], Суконо [2,*], Нурсанти Англиани [2] и Наджиб Маджди Якоб [3]

[1] Программа последипломного образования по математике, Университет Паджаджаран, Сумеданг 45363, Западная Ява, Индонезия;
[2] dhika17001@mail.unpad.ac.id Кафедра математики, факультет математики и естественных наук, Университет Паджаджаран, Сумеданг 45363, Западная Ява, Индонезия;
[3] nursanti.anggriani@unpad.ac.id Отдел биостатистики и методологии исследований, Школа медицинских наук, Медицинский кампус Университета Сайнс Малайзия, Кубанг Кериан 16150, Келантан, Малайзия; najibmy@usm.my * Адрес для переписки: sukono@unpad.ac.id

Аннотация: Пандемия COVID-19 создала сложную ситуацию, которая требует баланса между мерами контроля, такими как карантин и смягчение ограничений. Меры контроля могут ограничить распространение вируса, но также могут вызвать экономические и социальные проблемы. Ослабление ограничений может поддержать восстановление экономики, но может увеличить риск передачи вируса. Математические подходы могут помочь решить эти компромиссы путем моделирования взаимодействия между такими факторами, как скорость передачи вируса, меры общественного здравоохранения, а также экономические и социальные последствия. Для определения стоимости лечения COVID-19 было проведено исследование с использованием модели «восприимчивый-инфицированный-восприимчивый» (SIS) с модифицированным дискретным временем. Результаты показали, что без вмешательства правительства число пациентов, отвергнутых медицинскими учреждениями, и стоимость борьбы с пандемией значительно возросли. Вмешательство по изоляции обеспечило наименьшее количество отклоненных пациентов по сравнению с социальным дистанцированием, но затраты на борьбу с пандемией в сценарии изоляции остались выше, чем затраты на социальное дистанцирование. Это исследование показывает, что математические подходы могут помочь выявить критические моменты пандемии, такие как ограниченные возможности системы здравоохранения или высокие темпы передачи инфекции, которые требуют быстрого реагирования и соответствующих действий. Используя математический анализ, лица, принимающие решения, могут разработать более эффективные и гибкие стратегии, учитывая различные факторы, связанные с распространением вируса и его воздействием на обще

Ключевые слова: пандемия; расходы на лечение; эпидемиологические модели; компромиссные модели

check for updates

Цитирование: Пангесту, Д.С.; Суконо; Англиани, Н.; Якоб, Нью-Мексико Количественная оценка экономики здравоохранения Компромиссы: математическая модель Динамика пандемии COVID-19. Расчет 2024, 12, 139. https:// doi.org/10.3390/computation12070139

Научные редакторы: Бабак Ширин и Захра Алиджани

Поступила: 11 мая 2024 г.
Пересмотрено: 21 июня 2024 г.
Принято: 28 июня 2024 г.
Опубликовано: 8 июля 2024 г.

Копирайт: © 2024 авторов. Лицензиат MDPI, Базель, Швейцария. Эта статья находится в открытом доступе. распространяется на условиях и условиях Creative Commons Лицензия с указанием автора (CC BY) (https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

1. Введение

В истории пандемий зафиксировано несколько крупных пандемий, от которых пострадали миллионы людей по всему миру. Некоторые из важных пандемий, случавшихся на протяжении всей истории, включают бубонную пандемию 1331–1353 годов. Эта пандемия распространилась по всему миру и унесла жизни более 75 миллионов человек, или около 30% населения мира на тот момент [1]. Испанская пандемия 1918–1920 гг., вызванная вирусом гриппа, унесла жизни более 50 миллионов человек во всем мире [2]. Пандемия ВИЧ/СПИДа с 1981 года по настоящее время началась в Африке и унесла жизни миллионов людей во всем мире [3]. Пандемия атипичной пневмонии началась в 2002–2004 годах. Вирус атипичной пневмонии был впервые обнаружен в Китае и распространился по всему миру, унеся жизни более 700 человек [4]. Пандемия COVID-19 в 2019 году до сих пор была вызвана вирусом SARS-CoV-2 и продолжается до сих пор, убивая миллионы людей во всем м
Это всего лишь несколько примеров крупных пандемий, случавшихся на протяжении всей истории, и они показывают, насколько важно понимать будущие пандемии и готовиться к ним. Реакция на пандемию варьируется в зависимости от возникшей пандемии и от того, какие страны затронуты. Как правило, правительства и организации здравоохранения предпринимают несколько шагов, чтобы справиться с пандемией, такие как вакцинация, изоляция и карантин, тестирование и отслеживание контактов, изоляция, образование и экономическая помощь [6]. Реагирование на пандемии должно быть адаптировано к условиям и характери

Machine Translated by Google

и часто требуют адаптации и обновления с течением времени [7]. При принятии решений и действий по борьбе с пандемией необходимо учитывать соображения общественного здравоохранения, экономики и прав человека.

Системы финансирования во время пандемии играют важную роль в преодолении экономических и социальных последствий пандемии [8]. Существует несколько способов финансирования действий и программ, необходимых для преодоления пандемии, включая государственное финансирование: правительства часто используют такие источники средств, как налоги и долги, для финансирования государственных программ и экономической помощи частным лицам и предприятиям, пострадавшим от пандемии. Пожертвования. Пожертвования от частных лиц, учреждений и компаний могут помочь в финансировании медицинских и социальных программ, необходимых во время пандемии. Кредиты: Кредиты банков и других финансовых учреждений могут помочь в финансировании государственных и частных программ и мер по борьбе с пандемией. Международная помощь: Помощь других стран международных организаций может помочь финансировать государственные и частные программы и действия по пр
Системы финансирования во время пандемии должны учитывать баланс между финансированием действий, необходимых для борьбы с пандемией, и обеспечением того, чтобы финансовое бремя не оказывало негативного воздействия на общество и экономику в долгосрочной перспективе [10]. Политика и программы финансирования во время пандемии должны быть адаптированы к условиям и характеристикам текущей пандемии и часто требуют адаптации и обновления с течением времени.

Множество дисциплин играют важную роль в управлении пандемией [11]. Роль математических моделей эпидемиологии в управлении пандемиями заключается в предоставлении информации и прогнозов о распространении и воздействии заболевания [12]. Эти модели могут помочь лицам, принимающим решения, сделать осознанный выбор в отношении того, как распределять ресурсы и осуществлять меры по контролю распространения заболевания. Моделируя различные сценарии, эти модели могут обеспечить более точное понимание потенциального воздействия различных стратегий вмешательства, включая потенциальные преимущества и недостатки каждой стратегии. Эту информацию затем можно использовать для определения политики общественного здравоохранения и распределения ресурсов, а также для определения приоритетности вмешательств, которые с наибольшей вероятностью будут эффективными в борьбе с распространением заболеваний [13]. В конечном итоге, использование математических моделей эпидемиологии может сыграть важную роль в снижении количества инфекций и смертей во время пандемии, а также в максимально быстром и эффективном контроле распространения заболеваний [14].

Было проведено несколько исследований, в которых пытались оценить расходы на здравоохранение, необходимые для преодоления COVID-19. Исследования, проведенные Дудином и соавт. (2020) фокусируется на расходах на здравоохранение на страновом уровне. Эти расходы на здравоохранение моделируются с использованием дискретной стохастической модели «восприимчивый-инфицированный-выздоровевший» (SIR) [15]. Затем расходы населения на здравоохранение оцениваются путем умножения числа инфицированных людей, нуждающихся в лечении в медицинских учреждениях. Другие исследования были сосредоточены на расходах на здравоохранение в странах с низкими до Торрес Руэда и др. (2021) оценили расходы на здравоохранение в странах с низкими доходами, используя модель «восприимчивый, подвергшийся воздействию, инфицированный – выздоровевший» (SEIR). Модель SEIR была построена с использованием дискретного подхода, а расходы на здравоохранение оценивались по затратам, необходимым для экстренного реагирования, тестирования и отслеживания положительных случаев, а также затрат, необходимых для лечения активных и умерших случаев COVID-19 [16]. Другое исследование попыталось изучить потенциальное влияние нефармацевтических вмешательств, таких как ограничения социальной активности, на накопление капитала и экономическое развитие в различных временных масштабах [17]. Исследование, проведенное Cook et al. (2020) фокусируется на потенциальном влиянии нефармацевтических вмешательств на накопление моделей и экономическое развитие в различных временных масштабах. Это исследование объединяет модель экономики типа SOLOW с моделью SIR для моделирования потенциального воздействия провидимых экономических вмешательств [18]. Кроме того, этот эпидемиологический модельный подход также используется для исследования влияния неспособности государства ввести ограничения социальной активности на домохозяйства с низкими доходами [18]. В другом исследовании использовался эпидемиологический подход для оценки эффективности вакцинации против COVID-19 в снижении расходов на здравоохранение [19]. В другом исследовании изучалось влияние преждевременной смертности и смертности от инфекций на здоровье и экономику с использованием модели SEIR [20].

В предыдущих исследованиях по моделированию затрат на борьбу с пандемией влияние государственного вмешательства на экономику не обсуждалось. Кроме того, модели, изучающие

Machine Translated by Google

Влияние государственного вмешательства на экономику никогда не обсуждается с финансированием здравоохранения, которое происходит. Несмотря на то, что эти два фактора могут повлиять на общие расходы на борьбу с пандемией, в этом исследовании создается модель для оценки затрат на здравоохранение, необходимых для борьбы с пандемией COVID-19 в стране. Созданная модель учитывает возможность изменения тяжести течения больных COVID-19, что не применялось Дудином с соавт. (2020) [15]. Это более реалистично, учитывая, что тяжесть заболевания пациентов с COVID-19 действительно может меняться на местах . Для этого используется дискретная эпидемиологическая математическая модель восприимчивости-инфекционно-восприимчивости (SIS) с вмешательствами для прогнозирования количества людей, нуждающихся в стационарной помощи с течением времени.

В этом исследовании проводится математическое моделирование для оценки затрат, необходимых для борьбы с пандемией, а также компромиссов. Это исследование всесторонне представляет, сколько это стоит, оценивая возможные изменения в смертности, а также изменения в экономических затратах для каждой необходимой политики. Модель SIS используется из-за ее близости к возникающему явлению, а именно к возможности повторного заражения пациентов, объявленных излечившимися от COVID-19. Модель также учитывает влияние

вмешательства со стороны правительства. Таким образом, каждый предпринятый шаг вмешательства может иметь разный эффект, будь то изоляция, карантин или вакцинация. Затем для каждого предпринятого шага также учитывается его влияние на затраты и потенциальные компромиссы между сокращением количества дел и минимизацией затрат на обработку. Таким образом, модель, разработанная в этом исследовании, оценивает не только борьбу со случаями пандемии с точки зрения количества случаев и скорости распространения, но и ее влияние на экономические условия. Затем эта сумма конвертируется в расходы на здравоохранение. Модель предоставляет информацию о стоимости лечения инфицированного населения, стоимости вмешательства и компромиссе между ними. Таким образом, информация, генерируемая этой моделью, является своеобразной для разработки государственной политики. Информация, предоставляемая моделью, в конечном итоге позволяет распределять средства на управление популяцией, а также на меры по сдерживанию распространения заболевания. Поскольку это исследование носит оценочный характер, ассигнования, полученные в результате этого исследования, можно затем сравнить с расходами, произведенными правительством, а затем оценить их . Есть надежда, что предоставленная информация может помочь правительству снова принять зрелую политику в случае пандемии, чтобы фокус проводимых мер был не только на сокращении их числа в краткосрочной перспективе, но и на сохранении населения в целом на более длительный период.

2. Обзор

2.1. Эпидемиологическая математическая модель

Математические модели эпидемиологии являются инструментами прогнозирования и понимания распространения болезней среди населения [21,22]. Эти модели включают отношения между инфицированными людьми, людьми, восприимчивыми к инфекции, и людьми, которые выздоровели или имеют иммунитет к заболеванию. Математические модели эпидемиологии могут помочь исследователям и политикам прогнозировать распространение болезней, оценивать эффективность стратегий профилактики и лечения и планировать соответствующие ответные меры общественного здравоохранения [23,24]. Математические модели эпидемиологии обычно базируются на системах дифференциальных уравнений, описывающих изменение численности людей в разных группах с течением времени. Например, модель SIR (восприимчивые-инфицированные-выздоровевшие) является одной из наиболее часто используемых математических моделей эпидемиологии. Модель SIR предполагает, что население разделено на три группы: восприимчивые люди (S), инфицированные люди (I) и люди, которые выздоровели или имеют иммунитет к заболеванию (R). Дифференциальное уравнение, используемое для модели SIR, выглядит следующим образом:

$$N(t) = S(t) + I(t) + R(t) \quad (1)$$

Базовая модель SIR

1. Скорость изменения восприимчивых к инфицированным в единицу времени

$$\frac{dS}{dt} = \beta SI \quad (2)$$

Machine Translated by Google

2. Скорость изменения инфицированных на выздоровевших в единицу времени

$$\frac{dI}{} = \beta SI \quad \alpha I\, dt \tag{3}$$

3. Скорость восстановления излечения в единицу времени

$$\frac{dP}{dt} = \alpha I \tag{4}$$

где β — скорость передачи, α — уровень излечения или смертности, а t — время. Исследование Wearing et al. (2005) дают подробное объяснение эпидемиологических математических моделей, включая модель SIR и другие модели, используемые в эпидемиологии [25]. Они обсуждают применение эпидемиологических математических моделей для прогнозирования распространения инфекционных заболеваний, таких как грипп, корь и ВИЧ, а также оценки воздействия вакцинации и других профилактических мер. Они также обсуждают численные методы решения дифференциальных уравнений и использование эмпирических данных для проверки модели.

Помимо модели SIR, существует также модель SIS (susceptible-infected-susceptible). В модели SIS предполагается, что инфицированная популяция не имеет долговременного иммунитета, и люди снова становятся восприимчивыми, что допускает повторное заражение. Дифференциальное уравнение, используемое для модели SIS, выглядит следующим образом:

$$N(т) = S(т) + I(т) \tag{5}$$

Помимо моделей SIR и SIS, существуют и другие эпидемиологические математические модели, такие как модель SEIR (восприимчивый-экспонированный-инфицированный-выздоровевший) и более сложная сегментная модель. Однако все математические модели эпидемиологии преследуют одну и ту же цель: помочь понять и контролировать распространение болезней среди населения.

2.2. Дискретная эпидемиологическая математическая

модель. Дискретные эпидемиологические математические модели используются для моделирования распространения заболевания в отдельных популяциях. Эти модели часто используются в эпидемиологии для прогнозирования распространения заболевания среди людей в отдельных популяциях. Некоторыми примерами часто используемых дискретных эпидемиологических математических моделей являются модель SIR (восприимчивые-инфицированные-выздоровевшие) и модель SEIR (восприимчивые-экспонированные-инфицированные-выздоровевшие). В обеих моделях люди в популяции делятся на классы в зависимости от их статуса с точки зрения инфекции. При эпидемиологическом моделировании большинство разрабатываемых моделей обычно используют непрерывный подход [26]; это потому, что математически непрерывные м Однако в действительности существующие эпидемиологические данные обычно собираются через дискретные промежутки времени. Таким образом, это делает дискретные модели более подходящими для использования при рассмотрении способа сбора данных. Кроме того, дискретные модели эпидемии гораздо более интуитивны и их легче реализовать нематематикам из-за сходства способов регистрации данных. Это облегчает принятие и внедрение дискретных моделей нематематиками.

На данный момент проведено несколько исследований с использованием дискретных моделей передачи заболеваний [27–29]. Для простейших дискретных моделей эпидемии используются уравнения (6)–(8). Таким образом, в дискретной форме уравнение принимает следующий вид:

$$St+1 = St \quad \beta StIt \tag{6}$$

$$It+1 = It + \beta StIt \quad \alpha It \tag{7}$$

$$Rt+1 = Rt + \alpha It \tag{8}$$

где t — время, α — уровень излечения, β — уровень инфицирования, а N — общая численность населения.

Machine Translated by Google

2.3. Марковская цепь

Цепи Маркова широко используются для оценки динамических изменений, включающих переходы между наблюдаемыми пространствами конечных состояний. Методика интуитивно понятна и проста в применении, особенно для ситуаций, когда разные этапы определяют не только развитие ситуации, но и состояние наблюдения. Следовательно, эта идея широко признана в исследованиях и приложениях в эпидемиологии [30]. Дискретная цепь Маркова утверждает, что текущее состояние наблюдения полностью зависит от состояния предыдущего временного шага в дискретном интервале наблюдения. Математически это означает, что вероятность перехода наблюдаемого состояния i в момент времени t в состояние j в момент времени t + 1 обозначается следующим образом:

$$pi,j(t) = Pr[I(t + 1) = j \mid я(т) = я] \quad (9)$$

где I(t) — идентификация наблюдаемого состояния в момент времени t. Вероятность одношагового перехода определяется как pi,j(t), или ее также можно назвать ежедневной вероятностью перехода.
Для вероятности перехода t-шаг в перед по наблюдениям обозначается как pi,j(t).

2.4. Средняя абсолютная процентная ошибка (MAPE)

При прогнозировании необходимо оценить результаты модели, чтобы гарантировать точность модели при составлении прогнозов. До сих пор использовались различные меры, и наиболее распространенными из них являются абсолютная процентная ошибка (APE) и средняя абсолютная процентная ошибка (MAPE); формулы расчета APE и MAPE следующие:

$$\text{ОБЕЗЬЯНА} = \frac{Xt \quad X\hat{}_{т}}{X\ т}, \quad (10)$$

$$MAPE = \frac{\sum_{т=1}^{н} \frac{|Xt \quad X\hat{}t|}{X\ т}}{н} \times 100\%, \quad (11)$$

Качество прогнозирования попадает в категорию хорошей точности, когда полученные значения APE и MAPE составляют менее 20% [31].

3. Материалы и методы

3.1. Материалы

Объектом модели в данном исследовании является модель определения затрат на борьбу с пандемией. Эта модель уникальным образом включает в себя такие компоненты, как стоимость лечения инфицированного населения, стоимость вмешательства и компромисс между ними. Затраты на лечение инфицированных групп населения, участвующих в этом исследовании, включают затраты на лечение, затраты на добавление медицинских учреждений, затраты на смертность и затраты на отслеживание. Издержки государственного вмешательства, задействованные в этом исследовании, — это затраты на социальное дистанцирование и затраты на изоляцию. Наконец, необходимо найти компромиссы, чтобы получить более полную картину общих расходов на б
Стоимость борьбы с пандемией моделируется с использованием дискретной модели SIS с учетом вмешательств и демографических данных, а затем результаты прогнозирования модели объединяются с моделью затрат на основе ингредиентов. Учитывается демографический аспект, поскольку COVID-19 в своем путешествии по Индонезии существует уже около 3 лет, поэтому для повышения точности модели учитывается демографический аспект.

Данные, использованные в этом исследовании, представляют собой количество случаев COVID-19 в Западной Яве. В данном исследовании используются положительные случаи, выздоровевшие, умершие и активные. Используемые данные относятся к периоду с марта 2020 г. по август 2022 г. во время пандемии COVID-19. Набор данных содержит 3632 записи, по 908 записей для каждого случая [32]. Затем для медицинских учреждений используются данные индонезийского коэффициента занятости коек (BOR). Данные были получены от оперативной группы по борьбе с COVID-19. Этот набор данных относится к периоду с марта 2020 г. по август 2022 г. [33]. Для получения данных о стоимости государственного вмешательства в этом исследовании использовались официальные рекомендации ВОЗ по политике и мерам реагирования на COVID-19, чтобы определить набор вмешательств, применяемых в стране.

Перед использованием данные проверялись на качество. Что касается сданных о случаях COVID-19, данные были проверены на согласованность путем сравнения количества совокупных случаев между

Machine Translated by Google

t и t + 1. Совокупные данные о случаях называются согласованными, если количество случаев в t + 1 количество случаев в t. Кроме того, по активным случаям данные проверяются путем сравнения с существующими данными источника и данными, рассчитанными исследователями. Если обнаружена ошибка или разница, она будет сверена с источником данных перед проведением дальнейшего анализа.

3.2. Методы

В этом исследовании выполняются два этапа, а именно этап разработки модели и этап анализа численных иллюстраций, которые описываются следующим образом: во-первых, этап разработки модели осуществляется путем углубленного изучения, особенно исследований, проведенных Дудиноми др. . [15], в котором обсуждается формулировка модели расчета затрат на борьбу с COVID-19 с использованием модели SIR. Существующая модель была затем модифицирована в этом исследовании, добавив возможность перехода тяжести симптомов у пациентов, инфицированных COVID-19. Формулировка модели для определения стоимости борьбы с COVID-19 осуществляется с использованием подхода возможностей перехода с дискретным временем. Во-вторых, проводится этап анализа численных иллюстраций, чтобы показать, как было реализовано применение модели для определения стоимости борьбы с COVID-19, и описать, как происходила динамика численности населения во время пандемии COVID-19 на основе модель создана. Для анализа численной иллюстрации параметры, используемые в модели, оцениваются на основе существующих данных.

Блок-схема этого исследования представлена на рисунке 1.

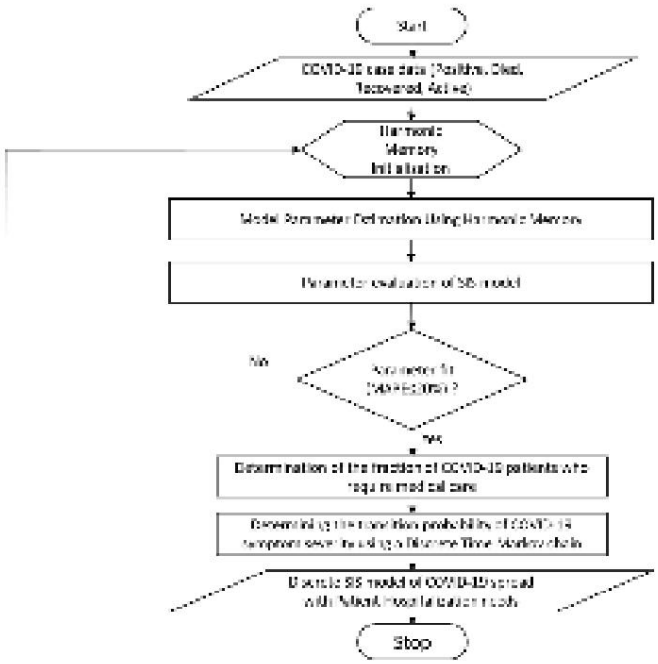


Рисунок 1. Этапы моделирования.

Моделирование популяционной динамики распространения COVID-19 с учетом потребностей в госпитализации пациентов проводится путем предварительного ввода имеющихся данных о случаях пандемии. В данном случае доступные данные — это данные о COVID-19. Затем данные используются для оценки параметров модели SIS, сформированной в этом исследовании. Параметры, используемые для этого дискретного моделирования SIS, включают: Число людей, предположительно имеющих иммунитет в момент t = 0, равно 0. Продолжительность заражения равна k. Поскольку существует возможность перехода, 1 изменяются так, что kH = 1 / (1-tpr) фракции = 1 / (1 tpr2), kNH и = 1 / продолжительность заражения может (1-trp). Лечит о kRNH представляют собой α. Оценка параметров выполнялась итеративно, и итерация прекращалась, когда параметры были подобраны. Параметры считались подходящими, когда полученный размер ошибки был минимальным при заданном количестве итераций. Используемым критерием ошибки является средняя абсолютная процентная ошибка (MAPE). После подбора параметров определяется доля пациентов с COVID-19, нуждающихся в медицинской помощи, и вероятность перехода

Machine Translated by Google

оценивается тяжесть симптомов у пациентов с COVID-19. Модель также учитывает влияние различных вмешательств и мер контроля на распространение вируса. Регулируя такие параметры, как скорость передачи и скорость выздоровления, модель может моделировать различные сценарии для принятия решений в области общественного здравоохранения. В целом этот подход представляет собой ценный инструмент для прогнозирования траектории пандемии и оценки потенциальных стратегий по смягчению ее воздействия.

4. Результаты

В этом разделе описаны результаты, полученные в этом исследовании. В этом исследовании были получены два результата, а именно результаты моделирования и результаты численного моделирования.

4.1. Результат моделирования.

В данном исследовании сформирована модель распространения COVID-19, учитывающая возможность перехода выраженности симптомов у инфицированных пациентов, а также возможность повторного заражения. Сформированная модель имеет три отсека: восприимчивый (S), инфицированный (I) и восприимчивый (S). Созданная эпидемиологическая математическая модель используется для моделирования пандемии COVID-19 в различных сценариях.

В уравнении (5), где S(t) — количество восприимчивых популяций в момент времени t, а I(t) — количество инфицированных популяций в момент t. Схематическая диаграмма распространения COVID-19, упомянутая в этом исследовании, представлена на рисунке 2.

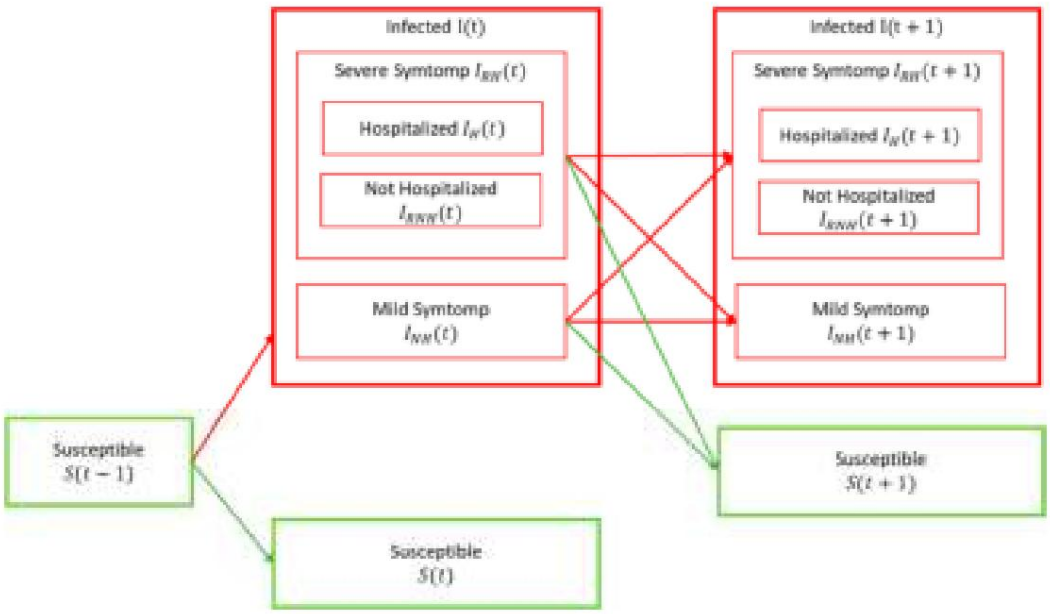


Рисунок 2. Динамика пациентов с COVID-19.

Пояснения к рисунку 2 следующие: 1 (1) • Человек, восприимчивый в период t 1; S(t 1) может быть заражен в следующем периоде ( ) ( ). COVID-19 в инфицированную группу I(t) или оставаться восприимчивыми к S(t). Инфицированный человек I(t) может иметь легкие симптомы INH(t) или тяжелые симптомы IRH(t). ( ), ( ). Для INH(t) предполагается, что пациенту не требуется лечение в медицинском учреждении, например в больнице. В то время как для IRH(t) предполагается, что пациенту требуется лечение в медицинском учреждении. ( ) • Из-за ограниченных возможностей медицинских учреждений не все пациенты с тяжелыми симптомами ИРГ (t) могут получать лечение в медицинских учреждениях. В результате образуется группа леченых тяжелых симптомов IH(t) и группа нелеченых тяжелых симптомов IRNH(t). ( ) • Могут наблюдаться изменения степени тяжести симптомов между IRH(t) и INH(t). Поскольку IRH(t) состоит из IH(t) и IRNH(t), изменение степени тяжести симптомов описано на рисунке 3.

Machine Translated by Google

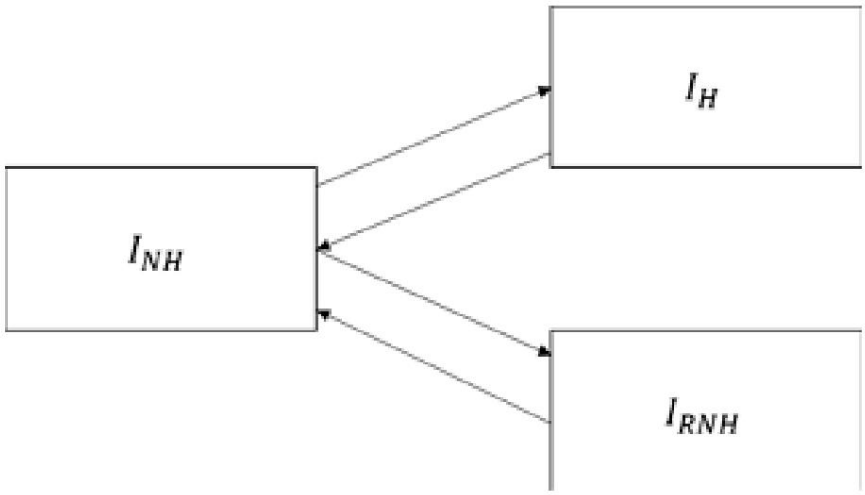


Рисунок 3. Диаграмма изменения серьезности симптомов.

На основе этого пояснения и рисунка 3 известно, что отсек I разделен на три части, а именно:

- Не требует лечения в медицинском учреждении (INH). Предполагается, что в каждый момент времени периоде только часть членов компартмента I нуждается в лечении, чтобы остальные могут самоизолироваться без необходимости лечения в медицинских учреждениях , таких как больницы Для групп с положительным результатом на COVID-19, но не требующих интенсивной терапии в больнице, используется обозначение INH .
- Требовалось лечение в медицинском учреждении, но не получило его, IRNH. Предполагается, что здесь В каждом районе имеются медицинские учреждения, но их возможности ограничены, в результате чего возникает возможность пациентов, которые нуждаются в лечении, но не могут быть вылечены из-за этой проблемы. Для группы, которые имеют положительный результат на COVID-19 и нуждаются в интенсивной терапии, но не получают ее, используется обозначение IRNH . Уравнение (12) описывает IRNH.

$$IRNH(t) = |\min\{0, B(t) \quad IRH(t)\}|. \tag{12}$$

- Госпитализирован И Г. Это группа, которая нуждается в медицинской помощи и получает ее. IH(t) показано в уравнении (13).

$$IH(t) = \min\{IRH(t), B(t)\}, \tag{13}$$

и в любой момент времени t применяется уравнение (14).

$$I(t) = IH(t) + IRNH(t) + INH(t), \tag{14}$$

Далее моделируется ограничение пропускной способности медицинских учреждений. Количество коек для лечение пациентов с COVID-19 в начале пандемии B(0) показано в уравнении (15).

$$B(0) = v \cdot B0, \tag{15}$$

где v — доля коек для лечения COVID-19 в начале пандемии, а B0 общее количество больничных коек. Со временем количество больных Covid-19 будет увеличение, что представляет собой ситуацию, когда количество существующих больничных мощностей требует быть увеличено. В любой момент времени t, если количество коек B(t 1) меньше числа IRH(t - 1), то емкость слоя будет увеличена на основе IRNH(t - 1). Существование ограничения по производительности делают добавление коек возможным только для n фракций IRNH(t - 1), таким образом, количество доступных коек в момент времени t показано уравнением (16).

$$B(t) = \min\{B(t \quad 1) + nIRNH(t \quad 1), B(0) + (b \quad 1) \cdot B0\}, \tag{16}$$

Machine Translated by Google

на каждую дополнительную койку предполагается соотношение числа коек с медицинским персоналом и врачи остаются такими же, как и в уравнениях (17) и (18).

$$\frac{TP0}{(1 \quad v)B0} = \frac{TP(t)}{B(t)}, \tag{17}$$

$$\frac{TD0}{(1 \quad v)B0} = \frac{TD(t)}{B(t)}, \tag{18}$$

где TP — количество медсестер, а TD — количество врачей. TP0 и TD0 количество медсестер и врачей в период 0 или в начале пандемии. Кроме того, на рисунке 3 ранее была показана динамика COVID-19 с количеством пациенты, нуждающиеся в медицинской помощи. Предполагается, что шансы пациента на выздоровление и Смерть зависит от тяжести симптомов и того, получает ли пациент лечение. Это показано уравнениями (19) и (20).

$$dNH < dH < dRNH, \tag{19}$$

$$pHG > pG > pPHG, \tag{20}$$

где d — вероятность смерти, а r — вероятность выздоровления пациента с COVID-19.
После этого обозначим k вероятность того, что пациент покинет отделение I.
Вероятность того, что это произойдет, - если пациент выздоровеет или умрет. k - отношения для INH, IH, и IRNH нахо дятся в уравнениях (21)–(23).

$$kHX = dNH + rNH, \tag{21}$$

$$kH = dH + rH, \tag{22}$$

$$kPHG = dPHG + pPHG. \tag{23}$$

У пациентов могут наблюдаться изменения в тяжести симптомов, и это сохраняет пациента в отсеке I, но меняется только выраженность симптома. Если p обозначает вероятность перехода, то вероятность того, что переход не произойдет или пациент уйдет отсек I определяется уравнением (24).

$$1 \quad p = k, \tag{24}$$

и это применимо к IH, IRNH и INH, если уравнение (24) заменить уравнениями (21)–(23), тогда уравнения (25)–(27) будут следующими:

$$pb = 1 \quad kNH, \tag{25}$$

$$pp = 1 \quad kH, \tag{26}$$

$$pp2 = 1 \quad kPHX, \tag{27}$$

Связь между вероятностью перехода p и вероятностью пациента в их одной отсек I изображен на рисунке 4.

Machine Translated by Google

=1- ,

=1- ,

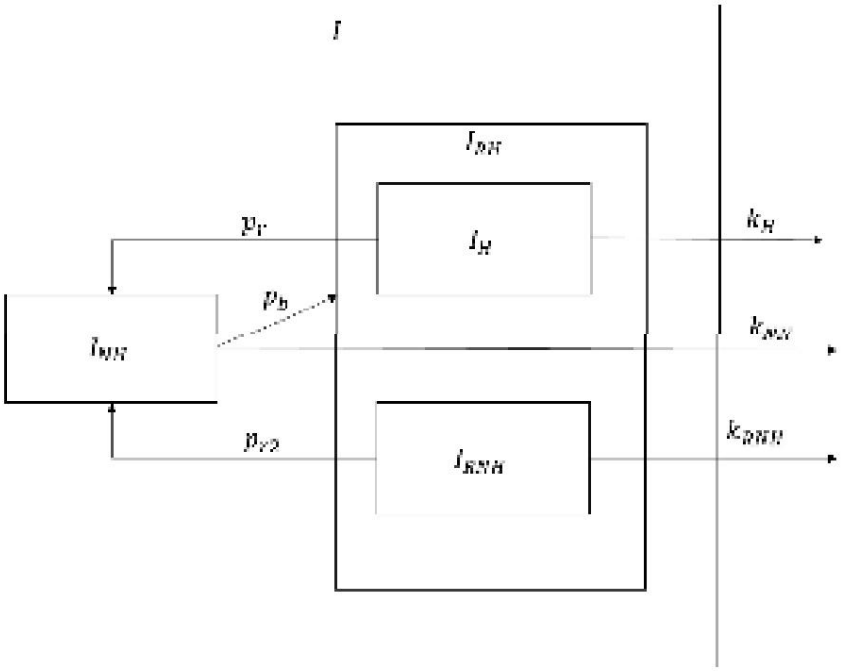


Рисунок 4. Схема пик в отсеке I.

Кроме того, из-за возможного изменения тяжести симптомов у пациентов, инфицированных COVID-19, продолжительность лечения может быть разной. Следовательно, время от времени необходимо учитывать k, как в уравнении (28).

$$k(t) = \frac{(S(t \quad 1))}{I(t \quad 1)\, rH} = \frac{IH(t \quad 1)+rRNH\, IRNH(t \quad 1)+rNH\, INH(t \quad 1)+dH\, IH(t \quad 1))+dRNH\, IRNH(t-1)+dNH\, INH(t-1)}{я(т-1)} = kH + kRNH + kNH\, I(t \quad 1) \quad \frac{ИРНХ\,(т-1)}{я(т-1)} \quad \frac{INH(t \quad 1)}{Я(т-1)}. \quad (28)$$

Далее количество больных, которые уже не могут заразить других, соответствует Числу умерших и выздоровевших от Covid-19. Следовательно,

$$S(t) = rH\, IH(t \quad 1) + rRNH\, IRNH(t \quad 1) + rNH\, INH(t \quad 1) + dH\, IH(t \quad 1) + dRNH\, IRNH(t \quad 1) + dNH\, INH(t \quad 1) \quad (29)$$

$$S(t) = k(t)I(t \quad 1). \quad (30)$$

Предположим теперь, что β(t) — это среднее число людей, заразив их сяодним человеком в единицу времени t, а R0(t) — число людей, заразив их сязаразным человеком за время его заражения. Таким образом, оно становится уравнением (31).

$$R0(t) = \frac{\beta(т)}{k(t)}, \quad (31)$$

На основании данного объяснения количество новых инфекций каждый раз t определяется уравнением (32).

$$1) - \alpha IH(t - 1)) \cdot \cdot \beta(t) - in(t), \quad \frac{S(t - 1)}{H(т)} \quad I(t) = (I(t - 1^{н} \quad (32)$$

Machine Translated by Google

I(t) всегда положителен, β(t) $\sum_{1}^{н}$ in(t), где i — тип государственного вмешательства, а α — доля инфицированного населения, которое должным образом помещено в карантин, так что для компартментов S, I, S сформировались уравнения(33)–(37) применять.

$$S(t) = S(t \quad 1) + \quad S(t) \quad I(t), \tag{33}$$

$$I(t) = (1 \quad k(t))I(t \quad 1) + \quad I(t), \tag{34}$$

$$IRH(t) = z \cdot I(t) + pb(t)INH(t \quad 1), \tag{35}$$

$$IRNH(t) = |\min\{0, B(t) \quad IRH(t)\}|, \tag{36}$$

$$IH(t) = \min\{IRH(t), B(t)\}, \tag{37}$$

После моделирования распространения COVID-19 и количества пациентов, нуждающихся в лечении, проводится моделирование затрат на борьбу с пандемией COVID-19. В этом исследовании стоимость борьбы с пандемией COVID-19 учитывает три типа финансирования. Первый тип — это стоимость лечения пациентов, у которых наблюдаются тяжелые симптомы ИГ(t). Между тем, второй тип — это затраты на дополнительные медицинские учреждения для пациентов с тяжелыми симптомами, которым отказывают на том основании, что существующие медицинские учреждения полностью соответствуют IRNH(t). Затем последнее — это стоимость вмешательств, осуществленных в течение периода времени t. В этом исследовании стоимость лечения Ср пациента с COVID-19 формулируется в уравнении (38):

$$Cp(t) = cpTp(t) + cdTd(t) + cm\ IH(t), \tag{38}$$

где ср — стоимость оплаты медсестер, cd — стоимость оплаты врачей, а cm — стоимость администрации и лекарств, необходимых для лечения пациентов с COVID-19 в течение 1 недели.

Между тем, стоимость добавления медицинских учреждений Cb формулируется в уравнении (39):

$$Cb = cb \cdot \text{макс } 0, \underset{т}{\text{макс}}\{B(t) \quad B0\} + c \quad . \frac{\text{макс } 0, \underset{т}{\text{макс}}\{B(t) \quad B0\}}{100}, \tag{39}$$

где . — функция пола, с — стоимость строительства медицинского учреждения, cb — стоимость добавления одной новой койки f, а B(t) — количество коек для лечения COVID-19, доступных в момент времени t. Кроме того, стоимость вмешательства рассчитывается с использованием уравнения(40).

$$CI = C1t1 + C2t2 + C3t3 + \ldots + \text{Конт}$$

$$\text{ДИ} = \sum_{я=1}^{н} \text{Чи ти} \tag{40}$$

Существуют различные вмешательства, которые можно проводить за один временной интервал. Интер-

Мероприятия также могут осуществляться одновременно между вмешательством 1, вмешательством 2, вмешательством 3 и так далее. Таким образом, стоимость вмешательства рассчитывается с использованием уравнения(40).

На основании уравнений (38)–(40) общую стоимость обработки КТ пациента с COVID-19 необходимо рассчитать по уравнению (41):

$$CT = t \cdot Cp(t) + Cb + CI. \tag{41}$$

4.2. Результаты оценки параметров

В этом исследовании используемые параметры были оценены с использованием реальных данных, чтобы обеспечить результаты моделирования, максимально приближенные к реальным явлениям на местах. В этом исследовании используется 11 параметров. Десять параметров являются расчетными, а один предполагается, поскольку данные отсутствуют. В данном исследовании предполагаемым параметром является параметр n, который представляет собой долю пласта, которую можно добавить в течение следующей недели. В данном исследовании мы использовали значение n = 0,05. Мы используем это значение, учитывая используемый временной интервал; одна неделя — это короткий срок, а это означает, что, хотя у правительства есть средства, все же существует срок, который может ограничить количество коек, которые можно добавить. Кроме того, для остальных расчетных параметров мы используем реальные данные.

Machine Translated by Google

связанные с определением этих параметров. Все результаты оценки параметров в этом исследовании суммированы в таблице 1.

- Параметр v оценивается с использованием данных о количестве больничных коек Западной Явы в 2019 году.
- Параметр dNH оценивался с использованием ежедневных данных о смертности от COVID-19. ДХ , Параметры dRNH калибруются по параметрам dNH с использованием случаев смерти, произошедших во время карантина.
- Параметр rNH оценивался с использованием ежедневных данных о выздоровлении от COVID-19. Для параметров rH, rRNH калибровали по параметру rNH с использованием излечений, произошедших во время карантина.
- Параметр k оценивается с использованием параметров d и r с использованием уравнений (21)–(23).
- Параметр p оценивается с использованием параметра k и уравнений (25)–(27).

Таблица 1. Результаты оценки параметров.

Параметр	Определение	Ценить	Подробности
н	Расширяемая фракция слоя	0,05	Предполагаемый
в	Фракция коек, доступная в начале пандемии	0,1481	Оцененный
дХ	Вероятность смерти пациентов с тяжелыми симптомами, которые лечатся в медицинских учреждениях	0,0011	Оцененный
дРНГ	Вероятность смерти пациентов с тяжелыми симптомами, которые не лечатся в медицинском учреждении	0,0017	Оцененный
дНГ	Вероятность смерти пациента, не нуждающегося в лечение в медицинском учреждении	0,0006	Оцененный
——	Вероятность выздоровления для пациентов с тяжелыми симптомами которые лечатся в медицинских учреждениях	0,0654	Оцененный
рРНХ	Вероятность выздоровления для пациентов с тяжелыми симптомами которые не лечатся в медицинских учреждениях	0,0327	Оцененный
рНХ	Вероятность выздоровления для пациентов, не нуждающихся в лечение в медицинском учреждении	0,0981	Оцененный
к	Вероятность выхода пациента из отделения I	0,0665	Оцененный
пб	Вероятность перехода от легких симптомов к тяжелым.	0,0095	Оцененный
пр	Вероятность перехода от тяжелых симптомов к легким.	0,0221	Оцененный

Параметры, представленные в таблице 1, затем используются в данной работе для численного моделирования модели распространения COVID-19. Результаты оценки параметров подтверждены перед использованием в численном моделировании, оценивая правильность модели по сравнению с используемые данные. Процесс проверки гарантирует, что модель точно отражает реальную ситуацию. сценариев и может предоставить надежные прогнозы распространения COVID-19. Этот строгий подход повышает достоверность и полезность результатов моделирования для информирования общественности. медицинские вмешательства и принятие решений. Это осуществляется графически, показывая моделирование модели, созданной с использованием параметров, перечисленных в таблице 1. Рисунки 5 и 6 изобразите график прогнозов модели в сравнении с данными о случаях COVID-19 в Западной Яве.

На рисунке 5 сравниваются прогнозы модели и реальные данные об уязвимости или уязвимости (S). населения. На основе графика известно, что параметры, использованные в данном исследовании, подходит для использования в численном моделировании, о чем свидетельствуют идентичные формы модели графики прогнозирования и реальные данные. График показывает, что прогнозы модели точны по сравнению с исходными данными, а параметры подходят для численного моделирования. Закрытие соответствие прогнозов модели и фактических данных предполагает, что модель эффективна в фиксации динамики случаев заболевания COVID-19 на Западной Яве. Эта проверка параметров Использование повышает надежность численного моделирования, проведенного в этом исследовании. Рисунок 6 сравнивает прогнозы модели с реальными данными о зараженной (I) популяции.

Machine Translated by Google

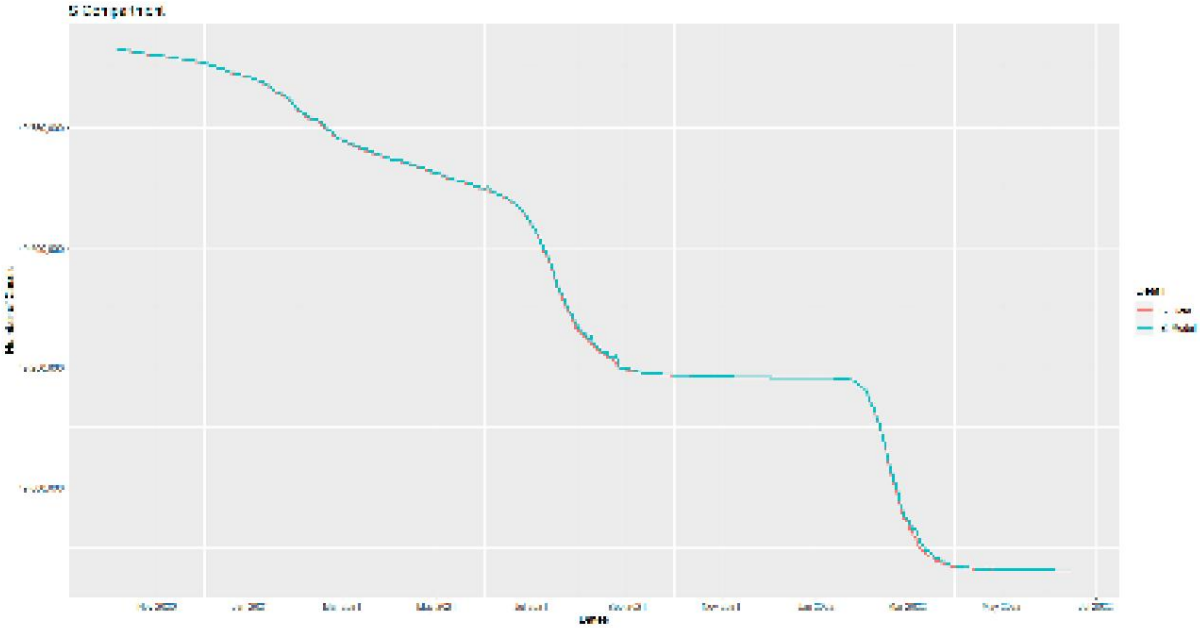


Рисунок 5. Сравнение прогнозов модели и данных в отсеке S.

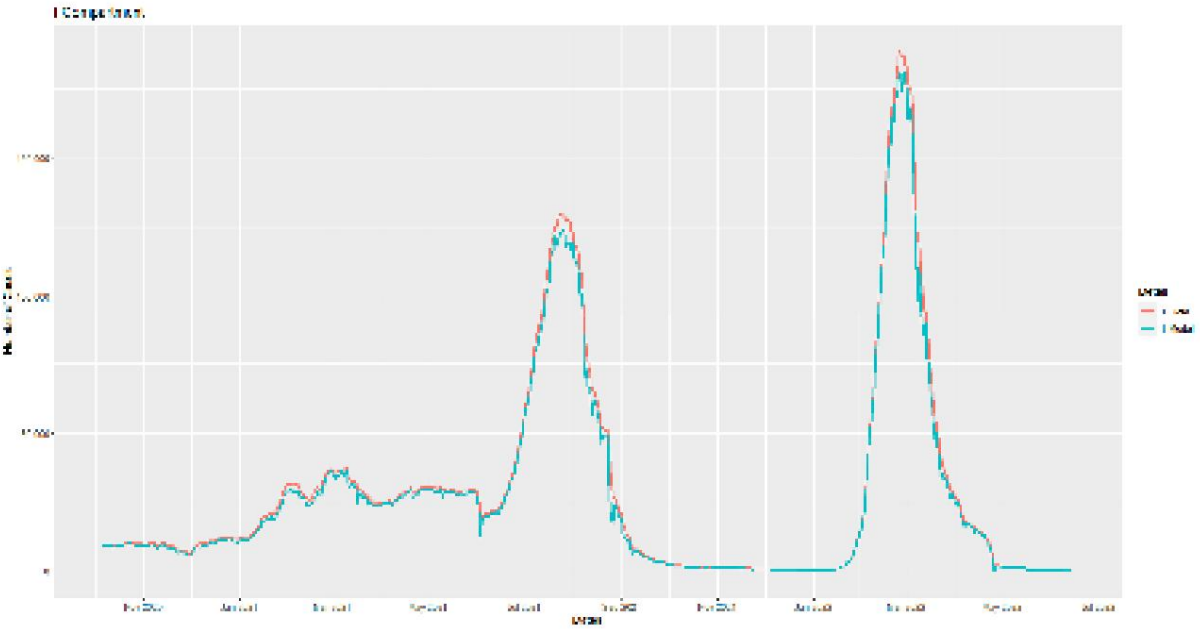


Рисунок 6. Сравнение прогнозов модели и данных в отсеке I.

Чтобы получить график прогнозирования модели в I, используется уравнение (34). По графику известно, что результаты прогнозирования модели соответствуют реальным данным. Это видно из графика моделирования, который идентичен исх одным данным. Такое соответствие прогнозов модели и фактических данных подтверждает точность параметров, использованных в исследовании. Согласованность графика моделирования с реальными данными дополнительно повышает надежность проведенного численного моделирования. Это означает, что прогнозы модели точны по сравнению с исх одными данными, а параметры подх одят для численного моделирования. ффВ целом, близкое соответствие между результатами моделирования и реальными данными указывает на то, что модель является надежным инструментом для прогнозирования результатов в аналогичных сценариях. Успешная проверка параметров, использованных в исследовании, повышает достоверность проведенного численного моделирования.

Machine Translated by Google

4.3. Анализ

чувствительности Прежде чем использовать оцененные параметры в численном моделировании, для каждого параметра выполняется анализ чувствительности. Эта процедура помогает понять, как изменения каждого параметра влияют на общий результат модели, тем самым облегчая необходимые корректировки. Рассчитав MAPE в отсеке I, исследователи могут оценить точность модели и внести дальнейшие уточнения для повышения надежности. Анализ чувствительности проводился с использованием метода «по одному» (OAT), при котором каждый параметр систематически варьировался индивидуально, сохраняя при этом остальные постоянными. Этот метод позволяет провести четкую и изолированную оценку влияния каждого параметра на выходные данные модели. Регулируя по одному параметру за раз и наблюдая за соответствующими изменениями в показателях производительности модели, таких как средняя абсолютная процентная ошибка (MAPE), становится возможным определить параметры, оказывающие наиболее существенное влияние на модель. Такой комплексный подход способствует глубокому пониманию чувствительности модели к различным параметрам, тем самым помогая ее уточнению для повышения точности и надежности. Кроме того, метод OAT помогает выявить потенциальные взаимодействия между параметрами, гарантируя, что модель останется стабильной и надежной в различных условиях .

Этот анализ предполагает изменение оцениваемых параметров на ±10%. Затем проводится моделирование и рассчитывается средняя абсолютная процентная ошибка (MAPE) для отсека I. Результаты анализа чувствительности, изображенные на рисунке 7, иллюстрируют влияние изменений параметров на базовый уровень MAPE.

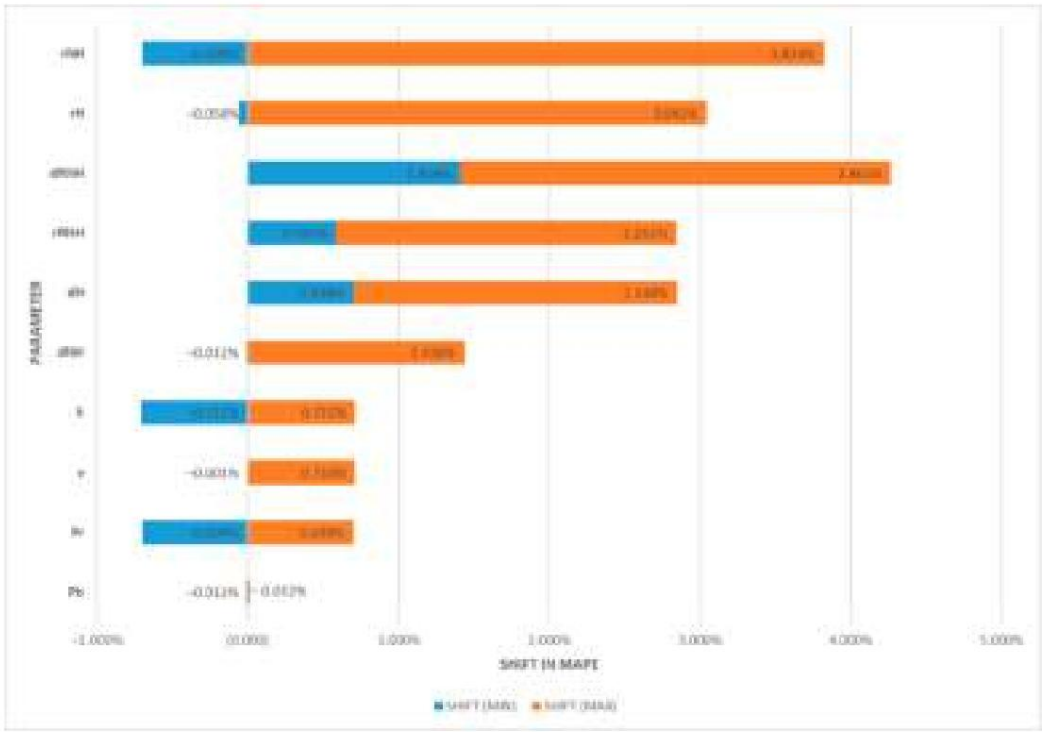


Рисунок 7. Изменение MAPE.

Судя по рисунку 7, данный параметр вызывает наиболее существенное изменение MAPE, составляющее 3,824%. Далее следует параметр rH , который приводит к изменению MAPE на 3,042%. Примечательно, что параметры перехода оказывают минимальное влияние на MAPE; например, параметр изменяет MAPE на -0,012%, а параметр вызывает изменение на 0,699%. Рисунок 7 также показывает, что общие изменения в MAPE относительно скромны.

При базовом значении MAPE, равном 7,12%, при максимальном отклонении значение MAPE по-прежнему остается в пределах 10%. Это свидетельствует о том, что, несмотря на вариации параметров, значение MAPE остается в пределах допустимого порога, поскольку максимальный критерий MAPE для данного исследования установлен на уровне 20%. В целом результаты показывают, что параметры переходаоказывают относительно незначительное влияние на значения MAPE, сохраняя изменения в допустимых пределах .

Machine Translated by Google

Это говорит о том, что модель надежна и может эффективно учитывать изменения этих параметров без значительного ущерба для точности.

4.4. Результаты численного моделирования

Цель этого численного моделирования — отобразить динамику населения во время пандемии COVID-19. Чтобы получить график моделирования каждого сегмента населения, примените уравнения (33)–(37). График моделирования обеспечит визуальное представление того, как каждый сегмент населения меняется с течением времени на основе предоставленных уравнений. Это позволит лучше понять динамику пандемии COVID-19 и поможет принять обоснованные решения относительно мер общественного здравоохранения. При численном моделировании в этой работе используются параметры, представленные в таблице 1. На рисунках 8–10 изображена структура населения COVID-19 в Западной Яве с различными сценариями.

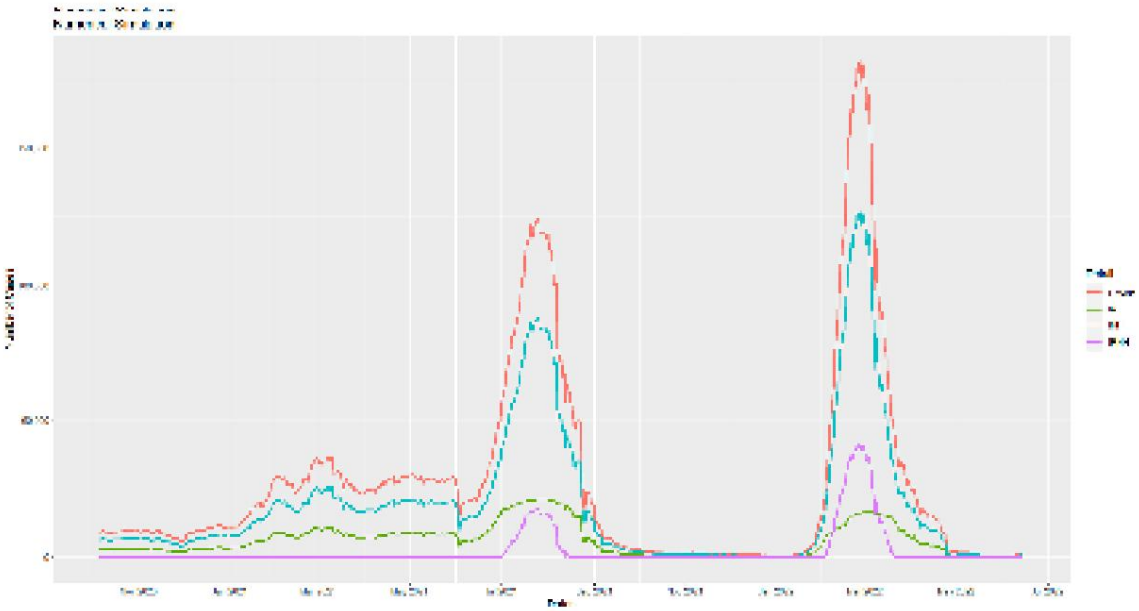


Рисунок 8. Результаты численного моделирования без сценария вмешательства.

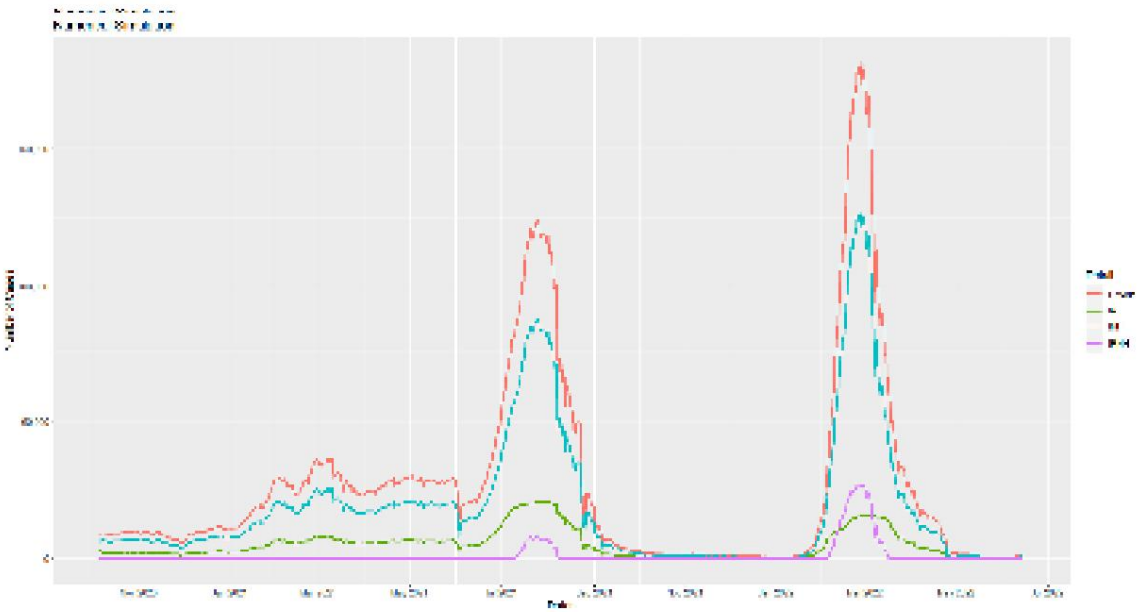


Рисунок 9. Результаты численного моделирования сценария социального дистанцирования.

Machine Translated by Google

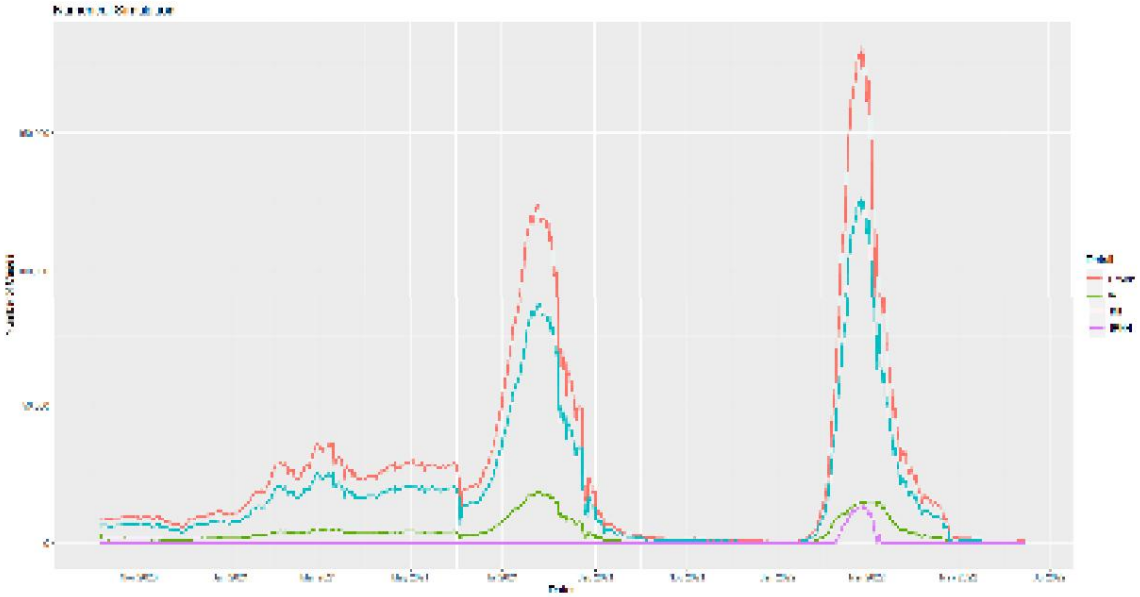


Рисунок 10. Результаты численного моделирования сценария блокировки.

На рис. 8 представлены результаты численного моделирования распространения инфицированного COVID-19 населения с использованием сформированной модели. На рисунке 8 использован сценарий без вмешательства. Моделирование иллюстрирует быстрый рост числа инфицированных людей с течением времени, подчеркивая важность принятия мер по контролю распространения вируса. Эти результаты подчеркивают потенциальное влияние профилактических мер на смягчение последствий пандемии. На рисунке 8 показано, что без вмешательства количество зарегистрированных случаев COVID-19 очень велико. Кроме того, в сценарии без вмешательства правительства было обнаружено, что отказ пациентов произошел дважды, а именно в августе 2021 года и феврале 2022 года. Это указывает на то, что без вмешательства система здравоохранения на Западной Яве может оказаться перегруженной, что приведет к отказу пациентов. Поэтому крайне важно, чтобы власти приняли строгие меры, такие как карантин, обязательное использование масок и социальное дистанцирование, чтобы предотвратить такой сценарий. Реализация этих мер может помочь снизить нагрузку на медицинские учреждения и в конечном итоге спасти жизни. Данные на рисунке 8 подчеркивают важность принятия эффективных мер по контролю за распространением COVID-19, чтобы предотвратить такое большое количество случаев и потенциальную нагрузку на систему здравоохранен

На рис. 9 представлены результаты численного моделирования распространения инфицированного COVID-19 населения с использованием сформированной модели. На рисунке 9 использован сценарий с вмешательством по социальному дистанцированию. Результаты моделирования указывают на значительное сокращение числа инфицированных по сравнению со сценариями без мер социального дистанцирования. Это подчеркивает эффективность внедрения мер социального дистанцирования в борьбе с распространением COVID-19. На рисунке 9 показано, что благодаря мерам социального дистанцирования количество случаев заболевания COVID-19 снизилось по сравнению с отсутствием вмешательства. Кроме того, в сценарии с вмешательством социального дистанцирования было обнаружено, что отказ пациента произошел дважды, а именно в августе 2021 года и феврале 2022 года, с меньшим количеством отказов по сравнению с отсутствием вмешательства. Эти результаты показывают, что меры социального дистанцирования сыграли решающую роль в снижении нагрузки на системы здравоохранения, предотвращая рост заболеваемости. Данные подчеркивают важность продолжения соблюдения этих мер для смягчения последствий пандемии. Эти результаты показывают, что внедрение мер социального дистанцирования может эффективно снизить распространение COVID-19 и уменьшить количество отказов пациентов. Результаты подчеркивают важность превентивных мер в борьбе с пандемией и минимизации нагрузки на систему здравоохранения.

Machine Translated by Google

На рисунке 10 представлены результаты численного моделирования распространения инфицированного COVID-19 населения с использованием сформированной модели. На рисунке 10 использован сценарий с вмешательством в целях блокировки. На рисунке 10 показано, что благодаря мерам по изоляции количество случаев заболевания COVID-19 снизилось по сравнению с отсутствием вмешательства и социальным дистанцированием. Кроме того, в сценарии с вмешательством по изоляции было обнаружено, что отказ пациента произошел только один раз, в феврале 2022 года, с меньшим количеством отказов по сравнению с отсутствием вмешательства и социальным дистанцированием. В целом результаты показывают, что внедрение карантинных мер может эффективно снизить распространение COVID-19 и свести к минимуму отказы пациентов. Это подчеркивает важность строгих мер по борьбе с пандемией и защите здоровья населения.

На основании рисунков 8–10 установлено, что в целом число пациентов с тяжелыми симптомами, нуждающихся в лечении, равно 0, а это означает, что в большинстве временных интервалов все пациенты с тяжелыми симптомами COVID-19 будут получать лечение, несмотря на увеличение в инфицированных случаях. Это говорит о том, что система здравоохранения Западной Явыспособна эффективно справляться с притоком тяжелых случаев COVID-19. Данные этого моделирования могут быть ценными для политиков при определении эффективности различных мер общественного здравоохранения. Однако если всплеск числа инфицированных случаев окажется слишком высоким, например, в июне 2021 года и январе 2022 года, это приведет к тому, что больница не сможет справиться с резким ростом числа случаев, а пациенты с COVID-19 будут отклонены или не получат лечения. При рассмотрении использованного сценария было обнаружено, что в сценарии социального дистанцирования количество отказов пациентов было меньше, чем без вмешательства, тогда как в сценарии блокировки отказы были только в период января 2022 года. Это подчеркивает важность принятия своевременных и эффективных мер общественного здравоохранения для предотвращения перегрузки систем здравоохранения в
Это также подчеркивает необходимость постоянного мониторинга и корректировки стратегий на основе результатов моделирования для обеспечения оптимальных результатов. Чтобы определить, как необходимо подготовить влияние на затраты на здравоохранение, используются уравнения (40) и (41). График затрат, которые необходимо подготовить правительству, представлен на рисунках 11–13.

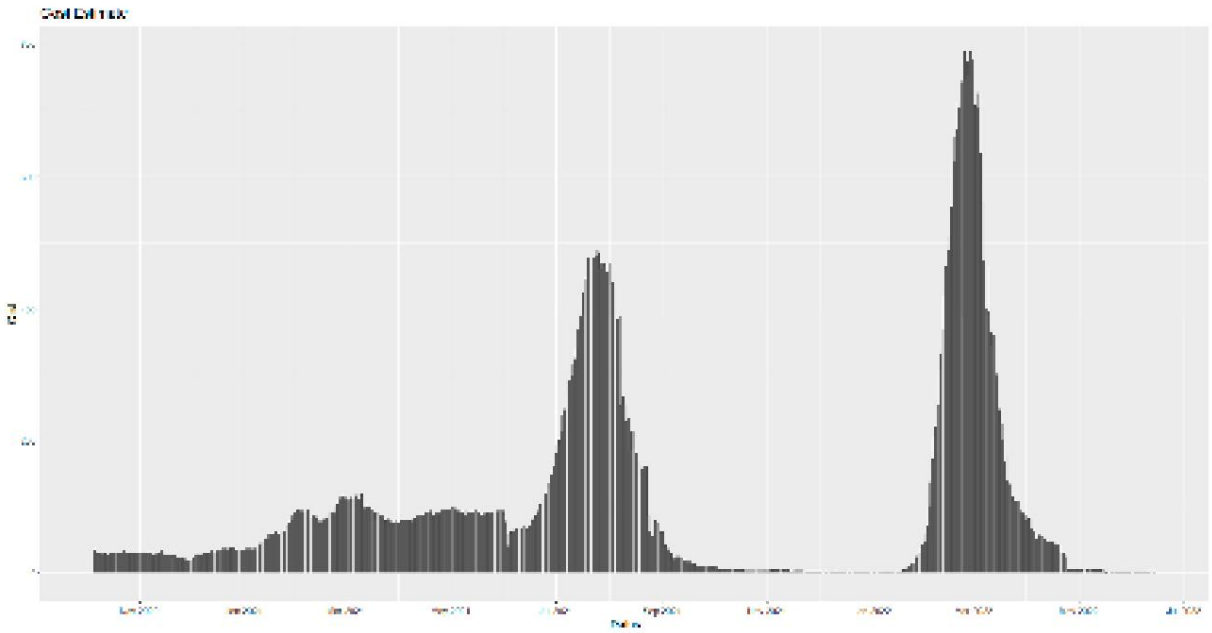


Рисунок 11. Результаты оценки затрат без сценария вмешательства.

Machine Translated by Google

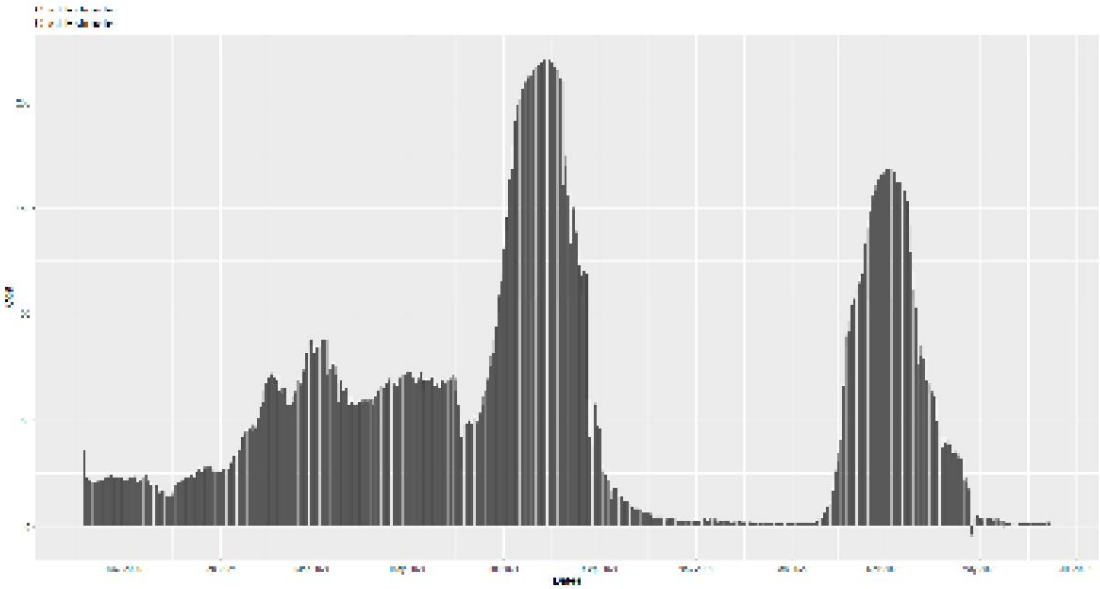


Рисунок 12. Результатыоценки затрат при сценарии социальногодистанцирования.

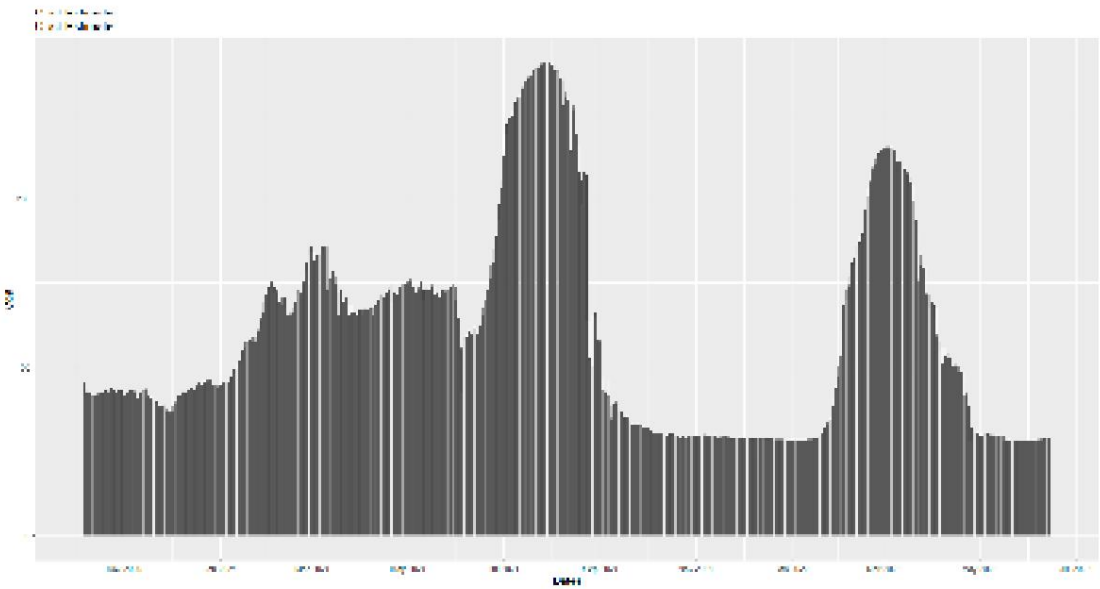


Рисунок 13. Результатыоценки затрат при сценарии блокировки.

На рисунке 11 показаны расчетные затратына борьбу с пандемией COVID-19, основанные на результатах моделирования. Прогнозызатрат учитывают различные факторы, такие как расходына здравоохранение, экономические последствияи мерыреагированияправительства. Важноотметить, чтоэти оценки могут быть изменены в зависимости от развивающегосяхарактера пандемии и эффективности усилий посдерживанию. На рисунке 11 показано, чтов период с августа 2021 года по февраль 2022 года наблюдается резкий рост затрат на лечение. На рисунке 11 показано, чтоза тот же период также наблюдалсявсплеск случаев заболеванияCOVID-19 и отказов пациентов. Эти скачки затрат на лечение совпадают с пиками случаев заболеванияCOVID-19 и показателями отказов от лечения пациентов, чтоуказывает на прямую корреляцию между ними. Эта информацияможе помочь политикамтт тт

а поставщики медицинских услуг лучше прогнозируют и распределяют ресурсывовремябудущих всплесков пандемии . Этопоказывает, чтоотказ от пациентов с COVID-19 может увеличить расходы, которые должно понести правительство. Этосвязано с тем, чтоправительство должно принять всех пациентов с COVID-19, а в случае возникновенияслучаев отказа необходимоувеличить количествокоек , а этоприводит к резкому увеличению затрат на борьбу с пандемией COVID-19.

Machine Translated by Google

На рисунке 12 показаны расчетные затраты на борьбу с пандемией COVID-19, основанные на результатах моделирования. Судя по рисунку 12, затраты, которые необходимо понести для борьбы с пандемией при сценарии социального дистанцирования, меньше, чем без какого-либо вмешательства. Это говорит о том, что реализация мер социального дистанцирования может помочь снизить финансовое бремя, связанное с борьбой с пандемией. Для политиков крайне важно учитывать эти оценки затрат при принятии решений о вмешательствах в области общественного здравоохранения. Кроме того, на рисунке 12 показано, что в период с августа 2021 года по февраль 2022 года наблюдается всплеск затрат на обработку, причем меньший по сравнению со сценарием без какого-либо вмешательства. На рисунке 9 показано, что за тот же период также наблюдался всплеск случаев заболевания COVID-19 и отказов от лечения пациентов . Это показывает, что отказ от пациентов с COVID-19 может увеличить расходы, которые должно понести правительство. Это связано с тем, что правительство должно принять всех пациентов с COVID-19, а в случае возникновения случаев отказа необходимо увеличить количество коек , а это приводит к резкому увеличению затрат на борьбу с пандемией COVID-19. Таким образом, снижение неприятия пациентов может помочь смягчить финансовую нагрузку на правительство и систему здравоохранения. Реализация стратегий по борьбе с отказом пациентов, таких как улучшение связи и координации между медицинскими учреждениями, может привести к более эффективному использованию ресурсов и, в конечном итоге, к снижению затрат на борьбу с пандемией.

На рисунке 13 показаны расчетные затраты на борьбу с пандемией COVID-19, основанные на результатах моделирования со сценарием блокировки. Ориентировочная стоимость включает расходы на здравоохранение, экономические потери и пакеты государственных стимулов. Крайне важно, чтобы политики учитывали эти прогнозы при принятии решений относительно мер общественного здравоохранения и планов восстановления экономики. Судя по рисунку 13, затраты, которые необходимо понести для борьбы с пандемией при сценарии блокировки, меньше, чем без какого-либо вмешательства. Кроме того, на рисунке 13 показано, что в период с августа 2021 года по февраль 2022 года наблюдается всплеск затрат на обработку , причем меньший размер по сравнению со сценарием без вмешательства. Это говорит о том, что введение карантина может помочь смягчить общие затраты, связанные с пандемией. Однако важно тщательно взвесить экономические последствия таких мер и их потенциальные выгоды с точки зрения общественного здравоохранения и долгосрочного восстановления. На рисунке 10 показано, что за тот же период также наблюдался всплеск случаев заболевания COVID-19 и отказов от лечения пациентов. Это показывает, что отказ от пациентов с COVID-19 может увеличить расходы, понесенные правительством. Это связано с тем, что правительство должно принять всех пациентов с Covid-19, а в случае возникновения случаев отказа необходимо увеличить количество коек; это вызывает резкий рост затрат на борьбу с пандемией COVID-19. Это приводит к перегрузке ресурсов и финансирования других важных инициатив общественного здравоохранения. Крайне важно, чтобы правительства оперативно решали проблемы отказа пациентов, чтобы обеспечить эффективное распределение ресурсов и предотвратить ненужную нагрузку на систему здравоохранения. Реализуя стратегии по снижению уровня отказов от лечения пациентов, правительства смогут лучше управлять финансовым бременем пандемии COVID-19 и расставлять приоритеты в финансировании различных инициатив общественного здравоохранения.

На основании рисунков 11–13 было обнаружено, что стоимость лечения COVID-19 увеличивается, когда также увеличивается число существующих пациентов с COVID-19. Кроме того, было также обнаружено, что после того, как произошел всплеск, стоимость лечения случаев COVID-19 снизилась и имела тенденцию оставаться низкой до тех пор, пока не произошел следующий всплеск. Поэтому правительству крайне важно внимательно следить за количеством существующих пациентов с COVID-19, чтобы предвидеть потенциальный рост расходов на здравоохранение и подготовиться к нему. Используя уравнения (40) и (41) и анализируя график на рисунках 8–10, политики могут принимать обоснованные решения для эффективного управления и распределения ресурсов для борьбы со случаями COVID-19. Это говорит о том, что после резкого роста числа случаев повышается осведомленность общественности, что приводит к сокращению числа случаев COVID-19, так что люди снова начинают чувствовать себя в безопасности и ослабляют медицинские протоколы, что приводит к увеличению числа случаев COVID-19. снова. Крайне важно, чтобы политики внимательно следили за тенденциями и закономерностями в случаях COVID-19, чтобы своевременно принимать меры и предотвращать перегрузку систем здравоохранения. Путем постоянного мониторинга и корректировки стратегий на основе анализа данных можно свести к минимуму влияние потенциальных скачков расходов на здравоохранение . На основании рисунков 11–13 показано, что самые высокие об

Machine Translated by Google

сценарий 3 с мерами по локализации — 73 млрд индонезийских рупий; за самой высокой стоимостью следует сценарий 1 без вмешательства, стоимость которого составляет 67,42 млрд индонезийских рупий; а наименьшие затраты приходится на сценарий 2, стоимость которого составляет 32,872 млрд индонезийских рупий. Эти результаты показывают, что реализация мер по блокировке может привести к более высоким общим затратам по сравнению со сценариями без мер вмешательства. Крайне важно, чтобы политики тщательно рассмотрели экономические последствия различных стратегий борьбы со вспышками COVID-19.

5. Обсуждение

Целью данного исследования является разработка модели расчета затрат для пациентов с COVID-19, включая (а) пациентов, получающих лечение до тех пор, пока они не выздоровеют, и (б) дополнительное количество больничных коек, когда это необходимо. Формулировка модели определения стоимости лечения COVID-19, которая предполагает возможность перехода тяжести симптомов в данном исследовании, была успешно проведена, результаты которой представлены в уравнениях (33)–(37).
Модель учитывает различные факторы, такие как продолжительность пребывания в больнице, тяжесть симптомов и необходимые медицинские вмешательства, чтобы обеспечить комплексную оценку затрат. Включив эти переменные, поставщики медицинских услуг смогут лучше понять финансовые последствия лечения пациентов с COVID-19 и эффективно распределять ресурсы. Модель, представленная уравнением, может быть использована для определения количества затрат, которые необходимо подготовить правительству для лечения инфицированных пациентов и увеличения мощностей. Кроме того, модель учитывает потенциальные колебания состояния пациентов, обеспечивая более точную оценку затрат. Используя эту комплексную модель расчета затрат, политики могут лучше распределять ресурсы и планировать потенциальный рост числа случаев COVID-19. В конечном итоге это поможет оптимизировать ресурсы здравоохранения и обеспечить своевременное и эффективное реагирование на пандемию. Кроме того, модель может быть адаптирована к будущим вспышкам или другим чрезвычайным ситуациям в области общественного здравоохранения для улучшения стратегий готовности и реагирования.

На основе проведенного моделирования мы обнаружили, что со временем восприимчивая популяция будет продолжать уменьшаться. Ситуация возникает из-за продолжающегося возникновения случаев заражения COVID-19 с последующим последующим выздоровлением среди населения в течение определенного периода времени. Именно это приводит к тому, что уязвимое население продолжает расти с течением Обратное верно для выздоровевшей популяции — со временем эта популяция будет продолжать расти. Интересная вещь произошла с зараженным населением. В этой популяции были обнаружены колебания, в том числе в июне 2021 года и январе 2022 года. В эти месяцы наблюдался значительный рост случаев заболевания COVID-19, что привело к резкому увеличению числа инфицированных . Однако при принятии надлежащих мер и вмешательств число инфицированных постепенно снова уменьшилось. В этот период произошел значительный скачок, а затем он продолжил снижаться, пока не вернулся к стабильному минимуму. Это увеличение влияет как на понесенные расходы, так и на количество пациентов, которым отказывают в госпитализации в больнице. Для медицинских учреждений важно внимательно отслеживать эти колебания, чтобы эффективно распределять ресурсы и оказывать своевременную помощь нуждающимся. Понимая тенденции среди инфицированного населения, больницы могут лучше подготовиться к потенциальному росту числа случаев и соответствующим образом скорректировать свою пропускную способность. Кроме того, отслеживание этих тенденций также может помочь больницам выявлять любые потенциальные вспышки в обществе и принимать профилактические меры для сдерживания распространения вируса. Этот упреждающий подход может в конечном итоге помочь спасти жизни и предотвратить перегрузку систем здравоохранения. Крайне важно, чтобы медицинские учреждения сотрудничали с агентствами общественного здравоохранения и использовали анализ данных , чтобы оставаться на шаг впереди в борьбе с пандемией. Используя технологии и прогнозное моделирование, больницы могут принимать обоснованные решения, определяющие приоритетность ухода за пациентами и их безопасности в эти нестабильные времена.

На основе моделирования мы обнаружили, что, хотя число инфицированных случаев время от времени увеличивается, эти инфицированные случаи всегда будут получать лечение в медицинских учреждениях , как показано на рисунке 10. Однако, когда наблюдается значительный рост случаев (например, в июне 2021 г. и январе 2022 г.), существующие медицинские учреждения не могут справиться с резким ростом числа случаев, что приводит к отказу в приеме пациентов с COVID-19. Для решения этой проблемы необходимо стратегическое планирование . Больницы могут реализовать планы реагирования на чрезвычайные ситуации, чтобы расширить возможности и ресурсы в периоды высокого спроса. Заблаговременно готовясь к потенциальному всплеску

Machine Translated by Google

В таких случаях больницы могут гарантировать, что все пациенты получат необходимую помощь во время пандемии. Кроме того, больницы могут сотрудничать с другими медицинскими учреждениями для координации транспортировки пациентов и оптимизации наличия коек. Эти скоординированные усилия могут помочь снизить нагрузку на отдельные больницы и гарантировать пациентам возможность получать своевременную и соответствующую помощь. Это увеличило количество расходов на здравоохранение, как показано на рисунках 11–13, и количество смертей. Основываясь на этих выводах, есть две вещи, на которых правительству необходимо сосредоточиться в борьбе с COVID-19. Во-первых, правительству необходимо принять политику, которая сможет стабилизировать количество новых случаев заражения каждую неделю. Конечно, снизить количество ежедневных новых заражений до 0 невозможно, учитывая нынешний статус COVID-19, который стал эндемичным. Второе направление должно быть направлено на укрепление и расширение существующих медицинских учреждений, чтобы принять растущее число случаев. Это подчеркивает, что правильные инвестиции в дополнительные койки в медицинских учреждениях помогут снизить нагрузку на больницы и предотвратить отказ от пациентов с Covid-19, что в конечном итоге приведет к снижению затрат на здравоохранение и уровня смертности.

Кроме того, инвестирование в кампании по просвещению и повышению осведомленности в области общественного здравоохранения может помочь в продвижении профилактических мер и ответственного поведения среди населения. Подчеркивая важность вакцинации, ношения масок и социального дистанцирования, мы можем коллективно работать над эффективным контролем распространения вируса. Однако удается ли подавить количество новых случаев на стабильно низком уровне. Если это удастся сделать, случаев отказа пациентам в госпитализации не будет. Второе направление – добавление медицинских учреждений; чем больше у правительства возможностей добавлять койки за период, тем меньше вероятность того, что поставщики медицинских услуг не смогут принять пациентов. В этом исследовании мы использовали параметр n = 0,05, означающий, что если возможности правительства добавить койки больше, чем это число, количество пациентов, которым было отказано в госпитализации, уменьшится, когда произойдет всплеск, или, возможно, оно может быть равно 0. Однако, если если возможности правительства меньше, то число случаев отказа в въезде будет еще больше. Пациентами, которым отказывают в медицинской помощи, часто являются пациенты с тяжелыми симптомами, требующими соответствующего лечения в медицинском учреждении.
Эти люди требуют срочного внимания для эффективного управления своим состоянием. Когда большое количество таких пациентов получают отказ, это может привести к критической ситуации, когда их здоровье быстро ухудшается. Без своевременного медицинского вмешательства их шансы на выздоровление значительно уменьшаются. Такое увеличение числа нелеченых тяжелых случаев может существенно повысить уровень см
Поэтому система здравоохранения должна обеспечить получение необходимой помощи пациентам с тяжелыми симптомами. Невыполнение этого требования не только влияет на индивидуальные показатели здоровья, но и способствует более высокому общему уровню смертности в обществе.

Это подчеркивает важность стратегического планирования и инвестиций в инфраструктуру здравоохранения для обеспечения адекватного потенциала в периоды повышенного спроса. Это также подчеркивает потенциальные последствия неадекватного вмешательства государства в управление системой здравоохранения.

6. Выводы

В этом исследовании была разработана дискретная модель «восприимчивый-инфицированный-восприимчивый» (SIS) для прогнозирования количества пациентов, нуждающихся в госпитализации. Модель учитывает возможность перехода тяжести симптомов пациента от легкой к тяжелой или наоборот. Результаты показали, что раннее вмешательство и эффективные меры сдерживания могут значительно снизить нагрузку на системы здравоохранения. Этот динамичный подход к моделированию результатов лечения пациентов может помочь в распределении ресурсов и разработке стратегий общественного здравоохранения во время вспышек заболеваний. Точно прогнозируя потребности в госпитализации, медицинские учреждения могут лучше подготовиться к резкому увеличению числа пациентов и эффективно распределять ресурсы. Такой упреждающий подход может в конечном итоге спасти жизни, гарантируя своевременное получение пациентами надлежащего уровня помощи. Кроме того, в нем подчеркивается важность принятия профилактических мер по борьбе с распространением инфекционных заболеваний. Этот упреждающий подход может в конечном итоге спасти жизни и предотвратить перегрузку системы здравоохранения. Результаты прогнозируемого количества пациентов затем используются для определения стоимости лечения и дополнительных коек в соответствии с положениями, установленными правительством Индонезии. Это позволяет

Machine Translated by Google

для эффективного планирования и составления бюджета, чтобы гарантировать, что больницы имеют необходимые ресурсы для размещения прогнозируемого притока пациентов.

Используя эту модель, медицинские учреждения могут оптимизировать свою реакцию на потенциальное увеличение количества пациентов и обеспечить лучший уход за нуждающимися. Созданная модель смоделирована на данных о COVID-19 из провинции Западная Ява. Этот подход, основанный на данных, помогает больницам предвидеть и подготовиться к резкому увеличению числа пациентов, что в конечном итоге улучшает общее качество предоставляемой помощи. Кроме того, анализируя тенденции и закономерности данных, медицинские учреждения могут принимать обоснованные решения для повышения своего потенциала и стратегий реагирования. Это исследование показало, что сценарий социального дистанцирования дал лучший результат в борьбе с COVID-19. Социальное дистанцирование сокращает количество госпитализированных, сохраняя при этом разумную стоимость. Полученная в результате расчетная стоимость лечения пациентов с COVID-19 может быть использована в качестве исходных данных для политики и в качестве предупреждения правительству о расходах, которые могут возникнуть в различных сценариях. Эта информация может помочь медицинским учреждениям и политикам принимать обоснованные решения о распределении ресурсов и планировании будущих вспышек. Анализируя данные этого исследования, власти смогут принять эффективные меры по контролю распространения вируса и минимизировать экономическое воздействие на систему здравоохранения. Кроме того, понимание финансовых последствий госпитализации может помочь в разработке стратегий для обеспечения адекватного финансирования и поддержки систем здравоохранения во время кризиса. Эти данные также могут быть полезны для прогнозирования потенциального финансового бремени для отдельных лиц и семей, пострадавш

Это исследование подчеркивает исключительную важность эффективного управления уровнем заражения и адекватной подготовки к оказанию помощи пациентам в случае пандемии. Пандемия COVID-19 оказала глубокое воздействие как на население, так и на экономику, продемонстрировав необходимость разработки надежных планов действий в чрезвычайных ситуациях, чтобы обеспечить лучшую готовность к будущим пандемиям. Первоначальные меры правительства сыграли решающую роль в сдерживании распространения вируса. Чтобы предотвратить перегрузку системы здравоохранения новыми инфекциями, были приняты быстрые меры, такие как изоляция, ограничения на поездки и требования социального дистанцирования Одновременно правительство предприняло значительные усилия по увеличению коечного фонда в медицинских учреждениях, включая быстрое строительство временных больниц, преобразование существующих учреждений в центры лечения COVID-19, а также закупку дополнительного медицинского оборудования и расходных материалов. Эти меры были разработаны для устранения возможных наихудших сценариев, связанных с внезапными существенным ростом уровня заражения. Проактивные стратегии необходимы для минимизации уровня смертности и сохранения человеческих жизней. Расширяя потенциал здравоохранения, правительства могут обеспечить доступность адекватной медицинской помощи для всех пациентов, тем самым снижая нагрузку на существующие ресурсы и поддерживая функциональность системы здравоохранения для оказания основных услуг, помимо лечения COVID-19. Это исследование показывает, что комплексный подход, включающий как инфекционный контроль, так и расширение потенциала здравоохранения, имеет первостепенное значение для смягчения пагубных последствий пандемий. Эффективное управление уровнем инфицирования посредством целенаправленных мер в сочетании со стратегическим улучшением инфраструктуры здравоохранения может значительно снизить воздействие на общественное здравоохранение и экономику. Это исследование выступает за непрерывную разработку и совершенствование планов готовности к пандемиям для защиты от будущих вспышек и обеспечения устойчивости системы здравоохранения, способной эффективно и действенно реагировать

В этом исследовании мы использовали параметр n = 0,05, означающий, что если возможности правительства добавить койки больше, чем это, то количество отказов в госпитализации уменьшит способность правительства добавлять койки больше, чем это число пациентов. Во время всплеска отказов в приеме количество отказов в приеме уменьшится или, возможно, будет равно 0. Однако, если возможности правительства будут меньшими, то количество случаев отказа в приеме будет еще больше. Это подчеркивает важность стратегического планирования и инвестиций в инфраструктуру здравоохранения для обеспечения адекватного потенциала в периоды повышенного спроса. Это также подчеркивает потенциальные последствия неадекватного вмешательства государства в управление системой здравоохранения. Ограничением этого исследования является то, что оно рассматривает только динамику между компонентами финансирования пандемического вмешательства, не обращая внимания на его влияние на макроэкономику в ц

Machine Translated by Google

финансирование и макроэкономика также важны, учитывая, что устойчивость общества в ситуации пандемии зависит от того и другого.

В будущих исследованиях точная оценка этого параметра даст более точные результаты относительно затрат, связанных с борьбой с пандемией COVID-19. При правильно оцененном значении параметра n больницы могут сократить количество пациентов, от которых им приходится отказываться, и уменьшить расходы, связанные с расширением больничной вместимости. Это связано с тем, что точная оценка n позволит определить оптимальное количество дополнительных коек, необходимых правительству. Следовательно, это сводит к минимуму разницу между текущим количеством имеющихся коек и количеством новых инфекций, обеспечивая более эффективное распределение ресурсов и лучшую готовность к будущим

Вклад автора: концептуализация, DSP и S.; методология, NA; программное обеспечение, ЦСП; валидация, DSP, S. и NMY; формальный анализ, С.; расследование, NA и NMY; ресурсы, нет данных ; курирование данных , DSP; письмо — подготовка первоначального черновика, DSP; написание — обзор и редактирование, С. и НМИ; визуализация, DSP; надзор, NA; администрация проекта, С.; приобретение финансирования, С. Все авторы прочитали и согласились с опубликованной версией рукописи.

Финансирование: Данное исследование финансировалось за счет гранта стипендии последипломного образования Паджаджарана (BUPP) № 2203/UN6.3.1/PT.00/2022.

Заявление о доступности данных . Исходные данные, представленные в исследовании, находятся в открытом доступе на Github по адресу https://github.com/DhikaSuryaP/SIS-DATASET.

Благодарности: Авторы выражают благодарность декану факультета математики и естественных наук Университета Паджаджарана и Дирекции исследований и общественных услуг (DRPM), предоставившей грант: Pendidikan Magister Menuju Doktor Bagi Sarjana Unggul (ПМДСУ/БУПП).

Конфликты интересов: Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Ссылки

1. Валлё Л. З. Средневековая и современная бубонная чума: некоторые клинические преемственности. Мед. Х ист. 2008, 52, 59–73. [Перекрестная ссылка]
2. Тампи, ТМ; Баслер, CF; Агилар, ПВ; Цзэн, Х .; Солорсано, А.; Суэйн, Делавэр; Кокс, Нью-Джерси; Кац, Дж М; Таубенбергер, Дж К.; Палезе, П.; и др. Х арактеристика реконструированного вируса пандемии испанского гриппа 1918 года. Наука 2005, 310, 77–80. [Перекрестная ссылка] [ПабМед]
3. Сабин, Калифорния; Лундгрен, JD Естественная история ВИЧ-инфекции. Курс. Мнение. ВИЧ СПИД 2013, 8, 311. [CrossRef]
4. Лам, В .К.; Чжун, Н.С.; Тан, WC Обзор атипичной пневмонии в Азии и мире. Респирология 2003, 8, С2–С5. [Перекрестная ссылка] [ПабМед] 5. Чиотти, М; Чиккоцци, М; Терринони, А.; Цзян, туалет; Ван, СВ; Бернардини, С. Пандемия COVID-19. Крит. Преподобный Клин. Лаб. наук. 2020, 57, 365–388. [Перекрестная ссылка] [ПабМед]
6. Хейл, Т.; Ангрист, Н.; Гольдшмидт Р .; Кира, Б.; Петерик, А.; Филлипс, Т.; Вебстер, С.; Кэмерон-Блейк, Э.; Халлас, Л.; Маджумдар, С.; и др. Глобальная панельная база данных по политике борьбы с пандемией (Оксфордский трекер правительственных мер реагирования на COVID-19). Нат. Х м. Поведение. 2021, 5, 529–538. [Перекрестная ссылка] [ПабМед]
7. Идзуми, Т.; Сух вани, В .; Суржан, А.; Шоу, Р. Управление пандемиями и реагирование на них в высших учебных заведениях : начальный этап учиться на примере COVID-19. Межд. Дж Катастрофа Ресил. Построен Энвайрон. 2021, 12, 51–66. [Перекрестная ссылка]
8. Бай, НМ; Заид, А.; Катрин, С.; Ах мед, К .; Ах мед А. Социально-экономические последствия пандемии коронавируса (COVID-19): обзор. Межд. Дж Сург. 2020, 8, 8–17.
9. Рах им, Ф .; Аллен, Р .; Баррой, Х .; Горс, Л.; Куцин, Дж Фонды борьбы с COVID-19 в ответ на пандемию ; Международный валютный фонд: Вашингтон, округ Колумбия, США, 2020 г.
10. Сен-Кроу, Б.; Маккенни, М; Элкбули, А. Финансирование профилактики общественного здравоох ранения и готовности к чрезвычайным ситуациям в Соединенных Штатах : Готовы ли мы к следующей пандемии? Энн. Мед. Х ирург. 2020, 59, 242. [CrossRef]
11. Рудольф, CW; Аллан, Б.; Кларк, М; Х ертель, Г.; Х ирши, А.; Кунце, Ф .; Шокли, К .; Шосс, М; Зонненгаг, С.; Зах ер, Х . Пандемии: последствия для исследований и практики в области промышленной и организационной псих ологии. Индийский орган. Псих ол. 2021, 14, 1–35. [Перекрестная ссылка]
12. Баккер А.; Кай, Дж; Зенгер, Л. Будущие темы исследований в области математического образования: международный опрос до и во время пандемия. Образование. Стад. Математика. 2021, 107, 1–24. [Перекрестная ссылка] [ПабМед]
13. Адига А.; Дубх аши, Д.; Лью ис, Б.; Марат, М; Венкатраманан, С.; Вулликанти, А. Математические модели пандемии Covid-19: сравнительный анализ. Дж Индийский инст. наук. 2020, 100, 793–807. [Перекрестная ссылка] [ПабМед]
14. Джуэлл, Н.П.; Лью нард, Дж.А.; Джуэлл, Б.Л. Прогнозирующие математические модели пандемии COVID-19: основополагающие принципы ценность прогнозов. ЖАМА 2020, 323, 1893–1894 гг. [Перекрестная ссылка] [ПабМед]
15. Дудин П.; Х еллвиг, КП; Джах ан, С. Схема оценки расходов на здравоох ранение в ответ на COVID-19; Международный валютный фонд: Вашингтон, округ Колумбия, США, 2020 г.

Machine Translated by Google

16. Торрес-Руэда, С.; Суини, С.; Боццани, Ф.; Нейлор, Северная Каролина; Бейкер, Т.; Пирсон, К.; Эгго, Р.; Проктер, СР; Дэвис, Н.; Куэйф, М; и др.
Серьезный выбор: изучение затрат сектора здравоохранения на политические меры реагирования на COVID-19 в странах с низкими среднимуровнемдохода.
БМЖ Глоб. Здоровье 2021, 6, e005759. [Перекрестная ссылка] [ПабМед]

17. Кук, МДж; Дри, Г.Г.; Логан, П.; Тан, Дж.Б.; Флахолт, А. COVID-19 Down Under: первый опыт пандемии в Австралии. Межд. Дж
Окружающая среда. Рез. Общественное здравоохранение 2020, 17, 8939. [CrossRef]

18. Маккуэйд, Сент-Луис; Уэйтман, Р.; Меррилл, Нью-Джерси; Ядав, А.; Трела, Э.; Оллред, СР; Пикколи, Б. Борьба со вспышкой COVID-19 с помощью
расширенная модель SEIR. Математика. Модели Методы Прикл. наук. 2021, 31, 2399–2424. [Перекрестная ссылка]

19. Сэмюэл Дж; Синха, С. Оптимальный контроль при пандемиях. Физ. Ред. Е 2021, 103, L010301. [Перекрестная ссылка] [ПабМед]

20. Де Лара-Туприо, Е.П.; Эстуар, MR; Сескон, Джей Ти; Лубангко, СК; Кастильо, Колорадо; Тенг, ТР; Тамайо, LP; Макалалаг, Дж. М; Ведеха, Г.М Экономические потери от случаев COVID-19
на Филиппинах: динамическая модель компромиссов в области здравоохранения и экономической политики.
Гуманит. Соц. наук. Коммун. 2022, 9, 111. [CrossRef]

21. Кюперт, А.; Катриэль, Г. Математическое моделирование и прогнозирование в эпидемиологии инфекционных заболеваний. Клин. Микробиол. Заразить.
2013, 19, 999–1005. [Перекрестная ссылка]

22. Аламо, Т.; Рейна, генеральный директор; Миллан, П. Методы мониторинга, моделирования, прогнозирования и контроля пандемии Covid-19 на основе данных: использование
наука о данных, эпидемиология и теория контроля. arXiv 2020, arXiv:2006.01731.

23. Майалл, А.; Прайс, Дж; Персик, Р.; Аббас, М; Мукерджи, С.; Ахмад, И.; Мин, Д.; Чжу, Нью-Джерси; Рамзан Ф.; Вайсе, А.; и др. Прогнозирование госпитального
появления COVID-19 с использованием сетей контактов с пациентами: обсервационное исследование. Межд. Дж. Заразить. Дис. 2022, 116, С109–С110.
[Перекрестная ссылка]

24. Джордан, Э.; Шин, Делавэр; Лиха, С.; Азарм, С. Оптимизация в контексте прогнозирования и контроля COVID-19: обзор литературы
IEEE Access 2021, 9, 130072–130093. [Перекрестная ссылка] [ПабМед]

25. Ношение, HJ; Рохани, П.; Килинг, МДж Соответствующие модели борьбы с инфекционными заболеваниями. ПЛоС Мед. 2005, 2, с174.
[Перекрестная ссылка] [ПабМед]

26. Брауэр Ф.; Фенга, З.; Кастильо-Чавеса, К. Дискретные модели эпидемий. Математика. Биология англ. 2010, 7, 1–15. [ПабМед]

27. Аллен, Эл Джей; Бургин, А.М Сравнение детерминистических и стохастических SIS и SIR. Математика. Биология. 2000, 163, 1–33. [Перекрестная ссылка]
[ПабМед]

28. Аллен, Л.ДжС. Некоторые эпидемические модели SI, SIR и SIS в дискретном времени. Математика. Биология. 1994, 124, 83–105. [Перекрестная ссылка] [ПабМед]

29. Чжоу, Ю; Ма, З. Дискретная эпидемическая модель передачи атипичной пневмонии и борьбы с ней в Китае. Математика. Вычислить. Модель. 2004, 40, 1491–1506.
[Перекрестная ссылка] [ПабМед]

30. Шкуль, Д. Цепи Маркова с дискретным временем и интервальными вероятностями. Межд. Дж. Прибл. Причина. 2009, 50, 1314–1329. [Перекрестная ссылка]

31. Гудвин, П.; Лоутон, Р. Об асимметрии симметричного MAPE. Межд. Дж. Прогноз. 1999, 15, 405–408. [Перекрестная ссылка]

32. Джава Барат, ПП Dashboard Statistik Kasus COVID-19 Provinsi Jawa Barat. Пемеринтах Даэра Провинси Джава Барат; 2024.
Доступно онлайн: https://dashboard.jabarprov.go.id/id/dashboard-pikobar/trace/statistik. (по состоянию на 21 июня 2024 г.).

33. Джава Барат, ПП Кетерисян Темпат Тидур (БОР). Пемеринтах Даэра Провинси Джава Барат; 2024 г. Доступно онлайн: https://dashboard.jabarprov.go.id/id/dashboard-pikobar/treatment/
fasyankes. (по состоянию на 21 июня 2024 г.).

Отказ от ответственности/Примечание издателя: Заявления, мнения и данные, содержащиеся во всех публикациях, принадлежат исключительно отдельному автору(ам) и соавторам(ам),
а не MDPI и/или редактору(ам). MDPI и/или редактор(ы) не несут ответственности за любой вред людям или имуществу, возникший в результате любых идей, методов, инструкций
или продуктов, упомянутых в контенте.

Machine Translated by Google

вычисление

MDPI

Статья

Проектирование и оценка гиперзвукового аппарата Waverider Использование ДСМК

Ангелос Клотакис и Иоаннис К. Николос *

Лаборатория турбомашин и гидродинамики, Школа производственной инженерии и менеджмента, Технический университет Крита, 73100 Ханья, Греция; aklothakis@gmail.com * Переписка: inikolos@tuc.gr

Аннотация: В этой работе исследуются аэродинамические характеристики гиперзвукового волнового аппарата, предназначенного для работы на скорости 7 Маха, с упором на оптимизацию его конструкции с помощью передовых вычислительных методов С помощью метода прямого моделирования Монте-Карло (DSMC) было смоделировано трехмерное поле потока вокруг специально разработанного волнового аппарата, чтобы понять взаимодействие ударных волн тепловую динамику на высоте 90 км. Вычислительный подход включал детальное создание сетки вокруг критических передних кромок корабля и использование трехмерных изоповерхностей Q-критерия для точного отображения ударных и вихревых структур. Дополнительные результаты моделирования показывают, что вейврайдер достиг аэродинамического качества 2,18, что подтверждает эффективные аэродинамические характеристики при угле атаки нулевого градуса. Результаты исследования способствуют более широкому пониманию динамики гиперзвукового полета, подчеркивая важность точного компьютерного моделирования при разработке транспортных средств, способных эффективно работать в ближнем ко

Ключевые слова: гиперзвуковые аппараты; прямое моделирование Монте-Карло; аэродинамические характеристики; вычислительная гидродинамика; гиперзвуковой волновод

1. Введение

Волнолет представляет собой особую конфигурацию гиперзвукового летательного аппарата, предназначенную для поддержания ударной волны, генерируемой аппаратом, прикрепленной к его передней кромке, что дает многочисленные преимущества [1]: (а) эта ударная волна эффективно разделяет поля потока на верхней и нижние поверхности автомобиля, что предотвращает перетекание потока высокого давления с нижней на верхнюю поверхность у передней кромки; б) обеспечивает равномерный поток на нижней поверхности, что оптимально для впуска ГПВРД; (с) конструкция волнового мотоцикла получена путем обратного проектирования на основе известного поля потока вокруг конической формы. Этот подход к проектированию будет подробно рассмотрен в последующих разделах данной работы.

Идея вейврайдера была впервые выдвинута Нонвейлером в 1963 году [2]. В то время имеющиеся технологии не были достаточно развиты для создания гиперзвукового воздушно-реактивного аппарата. Сэндлини Пессен предложили подробное объяснение методологии проектирования вейврайдеров [1]. Широкий анализ существенных проблем проектирования, связанных с гиперзвуковыми летательными аппаратами, обсуждается в работе Широчака и Смита [3], где рассматриваются два типа транспортных средств: гиперзвуковые транспортные средства и космич Хотя они отличаются от вейврайдеров, у них много общих проблем при проектировании и строительстве. Чжан и др. применил трехмерный метод преобразования класса-функции формы (CST) для определения геометрических форм гиперзвуковых планирующих транспортных средств (HGV) [4] Для оценки аэродинамики этих транспортных средств использовались методы невязкого моделирования, основанные на модифицированной теории Ньютона и уравнении Прандтля-Мейера . Использование алгоритма многокритериальной оптимизации NSGA-II помогло создать конструкции с высокими аэродинамическими качествами и значительным объемным КПД. В своей докторской диссертации В своей диссертации К. Контоянnис рассмотрел параметризацию и манипулирование геометрией носовой части вейврайдера, предложив новый трехмерный метод проектирования передней кромки вейврайдера, перехода от обратного к прямому

check for updates

Цитирование: Клотакис, А.; Николос, И.К. Проектирование и оценка гиперзвукового волнового аппарата с использованием DSMC. Вычисление 2024, 12, 140. https://doi.org/10.3390/Computation12070140.

Академический редактор: Джеффри С. Маршалл

Поступила: 17 мая 2024 г.
Пересмотрена: 24 июня 2024 г.
Принята: 3 июля 2024 г.
Опубликована: 9 июля 2024 г.

Копирайт: © 2024 авторов. Лицензиат MDPI, Базель, Швейцария. Эта статья находится в открытом доступе. распространяется на условиях и условиях Creative Commons Лицензия с указанием авторства (CC BY) (https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

Machine Translated by Google

методологии проектирования [5]. Кроме того, Son et al. описал структуру оптимизации для обратного проектирования гиперзвуковых волновых аппаратов [6].

С момента своего появления вейврайдер был в центре внимания исследований. После концептуализации проекта следующим этапом является его аналитическая оценка. Различные методы, такие как инженерные корреляции, летные испытания, испытания в аэродинамической трубе и численное моделирование, используются не только для анализа, но также для проверки концепций и накопления знаний. Хотя эти методы эффективны в дозвуковой области, они показали ограничения в надежности и реализации на гиперзвуковых скоростях. Текущие исследования направлены на совершенствование этих методов для освоения гиперзвуковой области.

Во время первых поисков гиперзвукового полета НАСА спроектировало, построило и испытало гиперзвуковой летательный аппарат [7]. Транспортное средство продемонстрировало, что оно способно развивать скорость до 8 Маха. Однако более пристальный взгляд на данные аэродинамической трубы выявил интересное я Было замечено, что параметр аэродинамических характеристик автомобиля (L/D) уменьшался по мере увеличения числа Маха. Кухеманн зафиксировал тенденцию к снижению максимальной L/D с увеличением числа Маха посредством обширных эмпирических исследований [8], подчеркнув значительную проблему в традиционном аэродинамическом проектировании и методологии в гиперзвуковом режиме. Более того, Боукатт представил междисциплинарный подход к оптимизации конфигураций волновода, добившись относительно более высоких соотношений L/D при более высоких числах Маха [9], что позже было подтверждено другими исследователями [10,11]. Нонвейлер первоначально разработал метод проектирования волновода в 1950-х годах для создания гиперзвукового крыла для целей повторного входа в атмосферу [12]. Несмотря на ранние проблемы, связанные с присущей остротой передней кромки волновода, которая приводила к значительным аэротермодинамическим нагрузкам, и ограниченной объемной эффективностью исходных тонких конфигураций [7], которые не учитывали эффекты вязкости, достижения в численных методах и вычислительных ресурсах в 1980-е годы позволили Боукатту оптимизировать вейврайдеры, предсказав влияние вязкости на их характеристики [9]. Это стимулировало постоянный интерес и исследования конструкций волноводов, хотя практическое применение в производстве действующих гиперзвуковых аппаратов остается проблемой.

С тех пор, как Нонвейлер [2] представил концепцию конструкции волнового аппарата, используя динамику клинового потока для создания первого волнового аппарата в аэрокосмической науке, многочисленные проектные исследования были направлены на уточнение и оптимизацию его первоначальной концепции. В большинстве этих исследований течение моделируется как двумерное и невязкое, плоское или осесимметричное [13–22]. Меньшая подгруппа рассматривала трехмерное невязкое течение как без химических реакций, так и с ними, как в ссылках [23–28] и [29,30] соответственно. Лишь ограниченное количество исследований было посвящено трехмерному вязкому потоку, в клю ч Данное исследование посвящено анализу полного трехмерного поля вязкого течения вокруг спроектированного волнового аппарата.

2. Методика проектирования волноводов

Волноводы создаются с использованием методологии обратного проектирования — процесса, который использует характеристики среды гиперзвукового потока. В этом подходе линии тока поля невязкого потока после толчка используются в качестве основы для проектирования поверхности сжимающегося потока, обычно нижней поверхности геометрии волнового движителя. Конечным результатом является обтекаемая геометрия, оптимизированная для гиперзвуковых потоков. Геометрия нижней поверхности, определяемая набором соседних линий тока, гарантирует, что передняя кромка остается прикрепленной к ударной волне. Ниже приводится краткое описание алгоритма, используемого для создания геометрии волнового движителя:

- Определение и проектирование начального поля потока в направлении потока.
- Решение поля течения с использованием методов вычислительной гидродинамики, таких как уравнение Тейлора-Маккола [32], уравнения Эйлера или Навье-Стокса.
- Определение направлений оптимизации.
- Применение теории соприкасающегося конуса вдоль направления размаха.
- Доработка и доработка проекта модели.

Чтобы указать начальные условия потока, на основе которых получается волновод, сначала проектируется конус с заданным углом δ. Тогда входные граничные условия типа Маха

Machine Translated by Google

Задаются число, давление и температура, и вычисляется результирующее поле потока. После расчета полятечениялинии тока можно вычислить путем численного решения следующего набора обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ):

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= u(x, y, z) \\ \frac{dy}{dz} &= v(x, y, z) \\ \frac{dz}{dz} &= w(x, y, z) \end{aligned} \quad (1)$$

Используяметод Рунге – Кутты, приведенную выше систему уравнений можно проинтегрировать по времени. дляполучениякаждой координатылинии тока.

Схематический обзор линий тока, прослеженных от конического ударного скачка, изображен на рисунке 1. Чтобыустановить геометрию волновода с использованием метода, полученного из конуса, необходимо сначала определить базовую кривую. Затем эта кривая проецируется на скачок уплотнения, параллельный набегающему потоку, образуя переднюю кромку. В последствии линии тока прослеживаются назад от положений передней кромки ударной волны к базовой плоскости, создавая (нижнюю) поверхность сжатия волнолёта. Помимо аналитического уравнения (1), можно использовать альтернативный, более простой метод для отслеживания линий тока, следуя по касательным путям к поверхности базового конуса, что облегчает создание геометрии поверхности сжатия. Уравнение базовой кривой, необходимое для проектирования волновода, показано в округ плоскости симметрии на рисунке 2. Общая ширина волновода обозначается l, где lu представляет собой плоский участок кривой. Изогнутый участок кривой определяется уравнением, изображенным на рисунке 2. Значение b рассчитывается из значений l, lu и h, которые определяются после разрешения исходного поля конического потока.

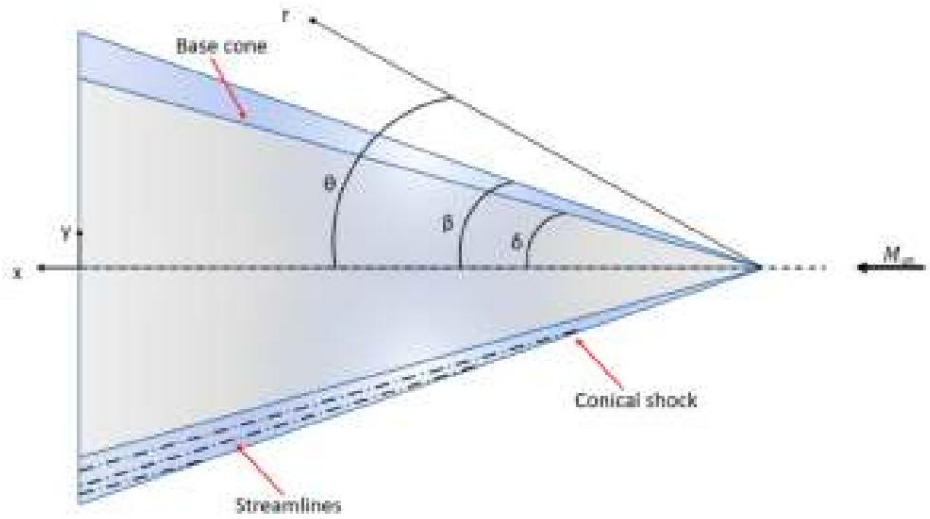


Рис. 1. Схематическое изображение методологии проектирования волновода.

Для практичной конструкции вейврайдера решающее значение имеет острота передней кромки. Таким образом, прагматичная стратегия проектирования включает в себя методы смягчения этой характеристики. Затупление передней кромки и стыков, где сходятся две поверхности потока, смягчает эффекты нагрева и приводит к получению геометрии, более подходящей для производства. Однако затупление действительно отклоняется от идеальной конструкции вейврайдера, допуская некоторую утечку давления с нижней поверхности на верхнюю, что, в свою очередь, увеличивает сопротивление и снижает аэродинамическую эффективность вейврайдера. Исследования [33,34] показали, что, хотя затупление уменьшает тепловой поток, испытываемый транспортным средством, оно отрицательно влияет на аэродинамическое качество (L/D). Несмотря на это, конструкция вейврайдера с затупленной конструкцией по-прежнему может обеспечивать превосходные аэродинамические характеристики по сравнению с другими альтернативными конструкциями. Степень и характер затупления имеют решающее значение и требуют баланса между снижением термических напряжений и оптимизацией аэродинамической эффективности. Учитывая различные возможные конфигурации вейврайдера, существует множество подходов к созданию тупой перед

Machine Translated by Google

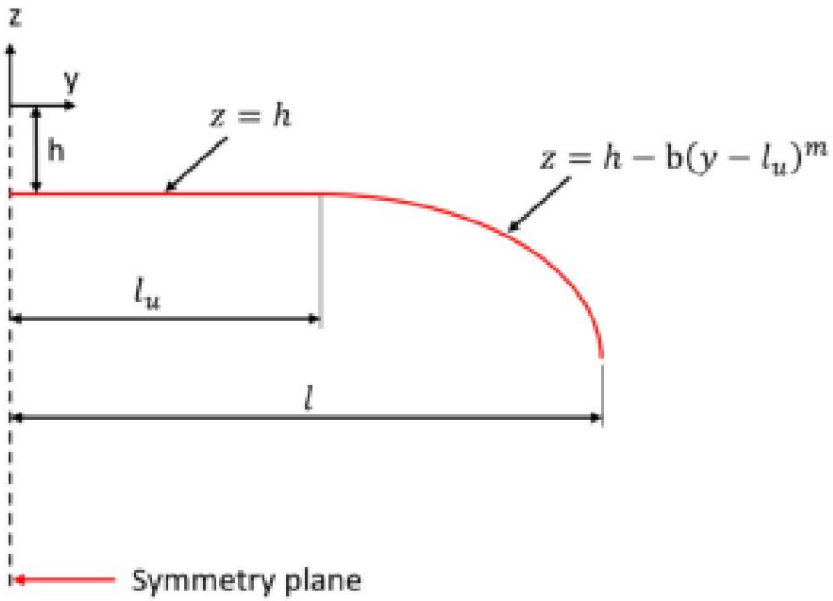


Рисунок 2. Схематическое изображение методологии проектирования волновода.

Существует два основных метода затупления передней кромки вейврайдера: один предполагает удаление материала с кромки, а другой — добавление к ней материала [35]. Тинчер и Бернетт предположили, что добавление материала на переднюю кромку приводит к меньшим аэродинамическим потерям по сравнению с удалением материала [35]. Этот подход предпочтителен, поскольку он позволяет сохранить большую часть исходного аэродинамического профиля, потенциально сводя к минимуму негативное влияние на производительность, связанное с передовыми модификациями.

3. Методика прямого моделирования Монте-Карло (DSMC) tz ффи

Метод прямого моделирования Монте-Карло (DSMC), первоначально разработанный Грэмом Бердом в конце 1960-х годов [36], использует статистический подход на основе частиц для изучения потоков разреженного газа. В отличие от традиционных методов решения уравнений для прогнозирования поведения потока, DSMC моделирует движение и взаимодействие большого количества моделируемых частиц, каждая из которых представляет собой долю реальных молекул в поле потока. Этот метод отделяет движение частиц и рассчитывает межмолекулярные столкновения за короткие интервалы времени. Математически показано, что при достаточном количестве частиц в ячейке ДСМЦ сходится к уравнению Больцмана [37]. Методика DSMC состоит из четырех основных этапов: 1. Изменение положения частиц.

2. Сортировка частиц по соответствующим ячейкам.
3. Расчет межмолекулярных столкновений.
4. Сбор и анализ свойств частиц.

На практике вычислительная область сегментируется на множество ячеек, которые потенциально могут быть дополнительно разделены на подячейки на основе заранее определенной сетки. Первоначально частицы случайным образом распределяются внутри каждой ячейки с определенными начальными положениями, скоростями и энергетическими состояния Эти шаги циклически повторяются для каждого временного шага для моделирования временной эволюции потока . Макроскопические свойства потока, такие как скорость, давление, плотность и температура, получаются из средневзвешенных значений этих микроскопических свойств частиц. Для всех моделей потока , обсуждаемых в этом исследовании, для изучения использовался метод DSMC, подробно описанный Грэмом Бердом [36] и реализованный в стохастическом параллельном анализаторе с точной точностью времени (SPARTA) в Sandia National Laboratories [38]. Характеристики потока.

Machine Translated by Google

4. Применение к конкретной конструкции волновода.

При разработке волновода, рассчитанного на скорость 7 Маха, первым шагом было создание 7-градусного конуса длиной 2 м с тупой передней кромкой 1 см, как показано на рисунке 3. Затем трехмерное поле потока вокруг этого конуса было решено с использованием метода прямого моделирования Монте-Карло (DSMC). Условия моделирования были получены на основе стандартной модели атмосферы США, представляющей характеристики потока на высоте 90 км. Конкретные условия потока и параметры, используемые при моделировании DSMC, подробно описаны в таблицах 1 и 2 соответственно. В настоящем моделировании газ состоит из 79% N2 и 21% O2; числа вращательной и колебательной релаксации считаются константами. Число вращательной релаксации было установлено равным Zrot = 5 как для N2, так и для O2, тогда как использовалось число колебательной релаксации Zvib = 52 600 для N2 и Zvib = 17 900 для O2. Упругие столкновения выполняются с использованием модели переменной мягкой сферы (VSS) [39], а неупругие столкновения выполняются с использованием модели Борднакке-Ларсена [40]. Для выбора партнеров по столкновению мы использовали алгоритм партнера, близкого к столкновению. Этот алгоритм выбирает партнеров по столкновению внутри сферы, радиус которой равен расстоянию, которое частица проходит за один временной шаг. Этот подход позволяет использовать размер ячейки сетки, превышающий одну среднюю длину свободного пробега, сохраняя при этом точность столкновений [41], хотя размер нашей ячейки близок к 1/3 средней длины свободного пробега. Из-за низких температур, возникающих в таких условиях полета, химические реакции не происходят; таким образом, предполагается, что поток находится в тепловом равновесии. Все моделирование проводилось на суперкомп

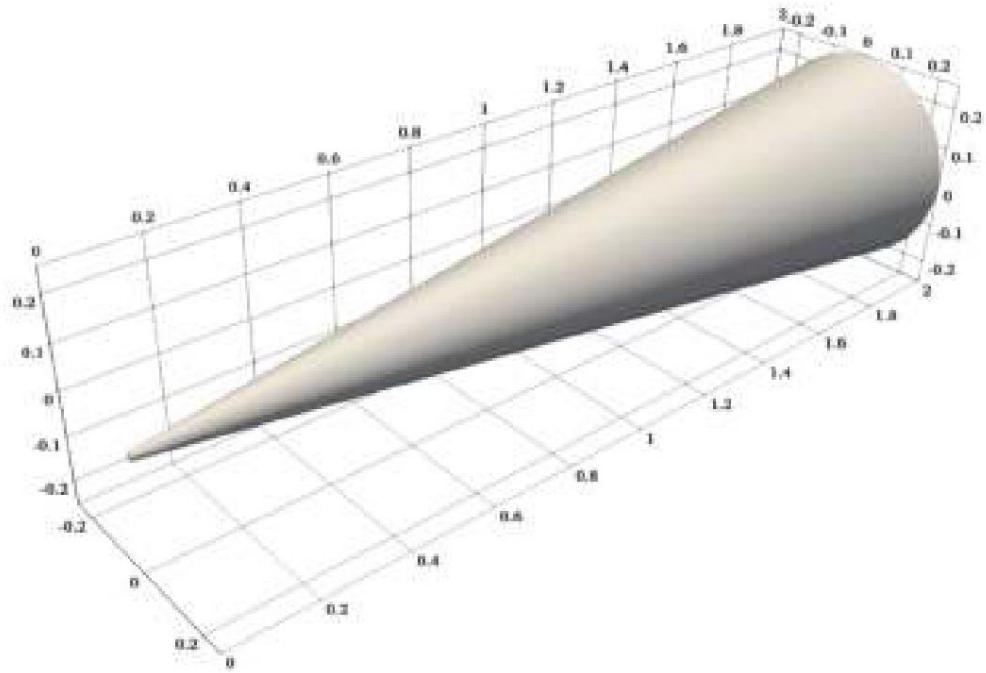


Рис. 3. Геометрия полуконуса с углом наклона 7 градусов, используемого для расчета начального поля течения.

Как упоминалось ранее, все моделирование проводилось с использованием параллельного DSMC-кода SPARTA с открытым исходным кодом (стохастический параллельный анализатор разреженных газов), который был разработан в Sandia National Laboratories [38]. После расчета трехмерного поля потока вокруг 7-градусного конуса были выделены линии тока в определенных параллельных плоскостях, чтобы очертить границы ударной волны. На рис. 4 представлена визуализация рассчитанных линий тока поля потока. Границы скачка различимы по изгибу линий тока как в боковой, так и в верхней плоскостях, а также по изменению цвета поля продольной скорости течения в задней плоскости за к

Machine Translated by Google

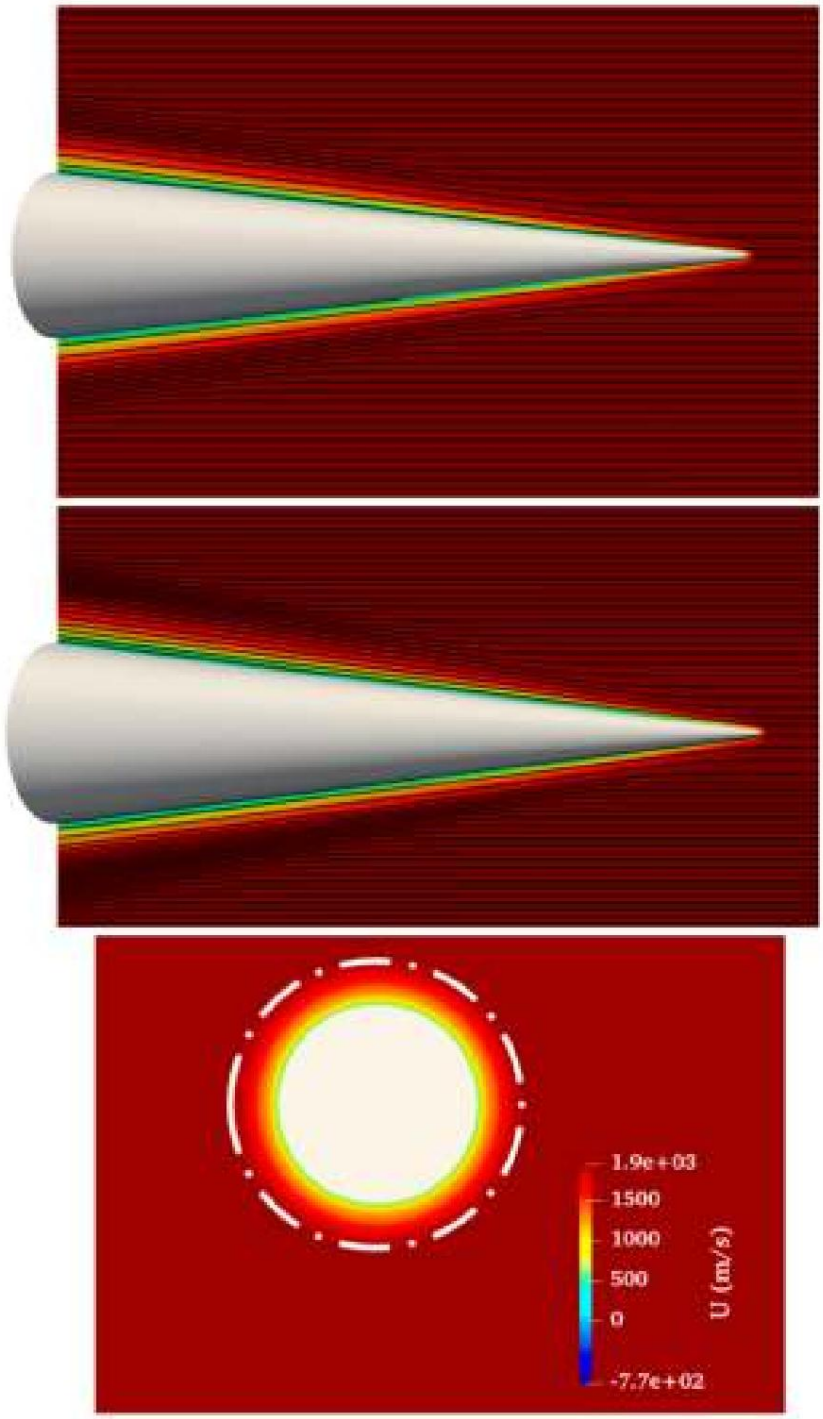


Рис. 4. Линии тока трех мерного полятечениявокруг 7-градусного конуса. Вид сбоку (сверх у), вид сверх у (посередине), вид сзади (снизу).

ТТ

После полученияплоскостей потока в результате моделированияDSMC они импортируются в программу компьютерного проектирования(САПР) (SolidWorks 2021), чтобыточноопределить геометрию волновода. Процесс проектированияначинаетсяв задней части автомобиля, создавакривые, которые касаютсянаблюдаемой круглой формыамортизатора, причемпервое характерное поперечное сечение показанона рисунках 5 (внизу) и 6. Как видноиз таблицы1, из-за при низкомчисле Рейнольдса течение попадает в ламинарный режим.

Machine Translated by Google

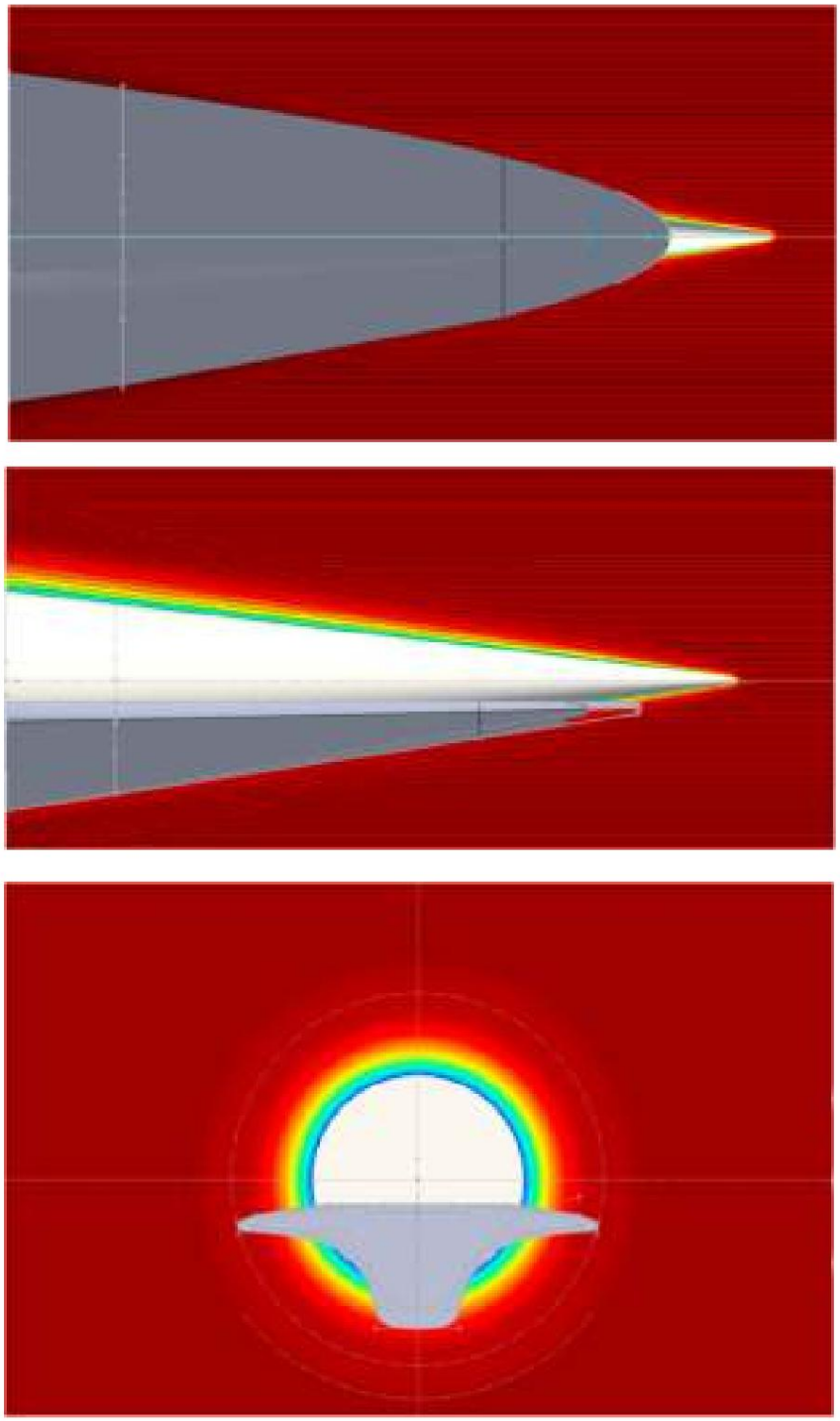


Рис. 5. Поверхность волнового удара вдоль линий тока в сравнении с исходным конусом. Вид сверху (сверху), вид сбоку (посередине) и вид сзади (снизу). [77]

Чтобы конструкция оставалась практичной для реальных применений, передние кромки вейврайдера сделаны тупыми, а не острыми. Чтобы точно контролировать притупление передней кромки, для формирования профиля передней кромки используется четырехточечная кривая Безье . Этот метод обеспечивает гибкость, позволяющую точно регулировать кривизну и, таким образом, адаптировать аэродинамические и термические свойства кромки. Аналогично, дополнительные секции вдоль продольной оси вейврайдера проектируются с интервалом каждые 30 см. Верхняя и нижняя поверхности волнового удара определяются границами ударной волны, генерируемой изначально заданной геометрией конуса с углом 7 градусов. Такой подход обеспечи

Machine Translated by Google

что окончательная конструкция волнового аппарата оптимизирована в пределах ограничений, установленных исходным потоком условия и аэродинамические потребности гиперзвукового полета.

Таблица 1. Параметры потока со скоростью 7 Маха на высоте 90 км.

Число Маха, Ма	7
Рейнольдс, Re	2873
Скорость набегающего потока, U (м/с)	1965 год
Число Кнудсена, Кн	0,6
Угол атаки, α (градусы)	0
Плотность набегающего потока, ρ (кг/м3)	9,62 × 10 6
Давление набегающего потока, р (Па)	0,55
Температура набегающего потока, Т (К)	196
Температура стенки, Tw (K)	300
Газ	Воздух

Таблица 2. Расчетные параметры DSMC для потока со скоростью 7 Маха на высоте 90 км.

Численная плотность, Nd (#/м3)	2,00 × 1020
Временной шаг (с)	3,0 × 10 7
Переход один период	40 000
Период выборки	100 000
Количество частиц	10,5 × 109
Количество ячеек	183 664 000
Время настенных часов (часы процессора)	195 840

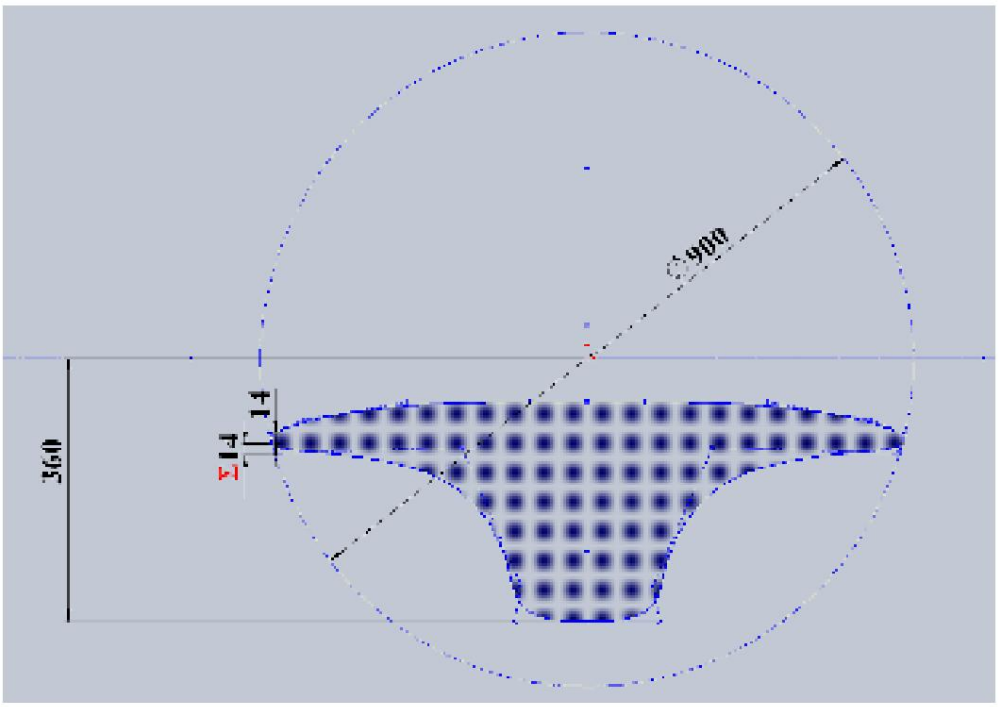


Рисунок 6. Задняя часть вейврайдера (единицы измерения в мм).

На рисунке 7 показано визуальное представление различных секций вейврайдера.

геометрия, х от ядля обеспечения ясности отображают сяне все разделы. По завершении

При проектировании всех секций используется лофт-операция с ограничениями касания.

сгенерировать поверхности вейврайдера. Чтобы упростить процесс проектирования и использовать возможности

симметрия полятечения, изначально проектируется только половина окончательной геометрии. Эта половина

затем зеркально отражается вокруг плоскости симметрии, чтобы создать полную конструкцию автомобиля.

Machine Translated by Google

Методология соприкасающихся конусов, описанная ранее, служит надежной вычислительной основой для проектирования гиперзвуковых волновых аппаратов. Гиперзвуковая аэродинамика предполагает работу с экстремальными температурами, высокими давлениями и сложными взаимодействиями ударных волн, что делает процесс проектирования по своей сути сложным. Разбив методологию на отдельные этапы, этот подход позволяет подробно сосредоточиться как на теоретических, так и на практических аспектах создания этих передовых гиперзвуковых аппаратов. Этот структурированный процесс проектирования гарантирует учет каждого аспекта характеристик и структурной целостности транспортного средства, что приводит к разработке эффективных и действенных гиперзвуковых волновых ап

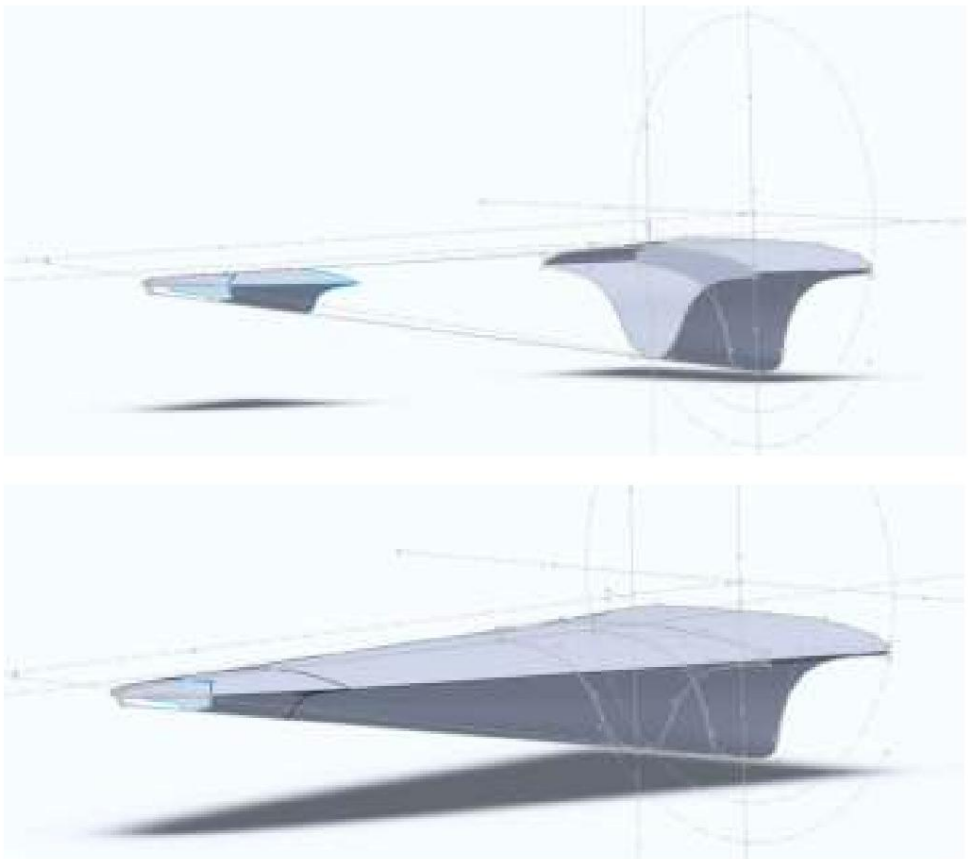


Рисунок 7. Чердаки поверхности вдоль профилей автомобиля (вверху). Обзор автомобиля без носовой части (внизу). тт

Процесс проектирования гиперзвукового волнохода предполагает тщательный и структурированный подход, имеющий решающее значение для достижения аэродинамической эффективности и структурной целостности в экстремальных условиях. Ниже приводится подробное описание каждого этапа процедуры проектирования. Шаг 1. Начало работы на заднем конце конуса.

Процесс проектирования начинается на заднем конце конуса, который имеет решающее значение для задания начальных условий поля потока. Здесь границы ударной волны тщательно определены и показаны пунктирными белыми линиями на рисунке 4 (внизу). Этот основополагающий шаг имеет решающее значение, поскольку он создает первый профиль вейв райдера. Конструкция гарантирует, что и передняя кромка, и нижняя поверхность этого профиля тангенциально выровнены с границами ударной волны, что минимизирует сопротивление и повышает аэродинамическую эффективность.

Шаг 2. Последовательное профилирование поперечного сечения

Двигаясь вперед, плоскости поперечного сечения берутся с интервалом примерно 30–40 см по длине конуса. Каждая плоскость представляет собой шаблон для формирования сегмента кузова транспортного средства, адаптированного к конкретным аэродинамическим условиям этого сегмента. Этот шаг

Machine Translated by Google

это сродни созданию отдельных частей автомобиля, каждая из которых оптимизирована для своей конкретной динамики потока.

Шаг 3: Операция лофтинга

Отдельные профили, созданные на шаге 2, затем соединяются между собой посредством операции лофтинга. Этот метод объединяет профили, чтобы сформировать непрерывную внешнюю обшивку вейврайдера, как показано на рисунке 7. В операции используются методы интерполяции, чтобы обеспечить плавный переход контуров между секциями. Однако профили сужаются по мере приближения к вершине конуса, что создает проблемы с поддержанием структурной и аэродинамической непрерывности.

Шаг 4: Работа с областью носа

В области носа, где профили становятся чрезвычайно тонкими, традиционные методы лофтинга менее эффективны. Для решения этой проблемы вводятся граничные поверхности, соответствующие кривизне исходного конуса. Как показано на рисунке 8, эти поверхности образуют внешнюю обшивку носовой части, плавно интегрируясь с приподнятыми секциями для поддержания аэродинамической целостности.

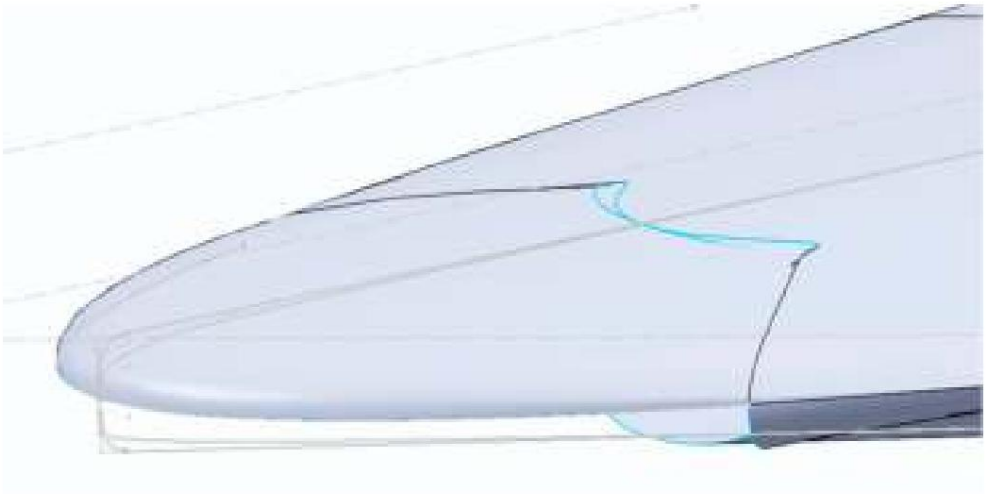


Рисунок 8. Носовая часть с верхней граничной поверхностью.

Шаг 5. Связывание поверхностей для моделирования жидкости

После проектирования носовой и основной частей корпуса выполняется операция вязания, позволяющая объединить все сегменты поверхности в единую водонепроницаемую конструкцию. Эта интеграция имеет решающее значение для точности последующего моделирования гидродинамики, гарантируя отсутствие пробелов или несоответствий, которые могут поставить под угрозу стабильность или точность модели. В результате этого этапа создается полная геометрия автомобиля, показанная на рисунке 9.

Шаг 6: Операция зеркального отображения

Чтобы повысить эффективность проектирования и снизить вычислительные требования, первоначально моделируется только половина автомобиля. Другая половина создается посредством операции зеркального отражения вдоль плоскости симметрии. Эта стратегия не только упрощает процесс построения, но и способствует более быстрым итерациям уточнениям на этапе проектирования, эффективно сокращая вдвое необходимые вычислительные ресурсы.

Machine Translated by Google



Рис. 9. (Вверху): сечения Waverider и полная геометрия. (Внизу): Блок-схема проектирования. методология.

Machine Translated by Google

Шаг 7: Усовершенствованный передовой дизайн

Этот шаг в методологии проектирования волновых аппаратов подчеркивает важность оптимизации передних кромок, которые играют решающую роль в общих характеристиках и живучести аппарата в гиперзвуковых условиях. В отличие от типичных гиперзвуковых конструкций, которые имеют острые передние кромки для минимизации сопротивления и максимизации скорости, этот подход учитывает компромиссы, которые приносят такие острые кромки, включая высокие концентрации напряжений и снижение термической устойчивости. Эти факторы могут привести к разрушению конструкции при воздействии сильной жары и давления во время гиперзвукового полета.

Чтобы решить эти проблемы, в конструкцию включены трехточечные кривые Безье, которые притупляют передние кромки. Этот метод позволяет точно контролировать кривизну и касание кромок, что позволяет адаптировать их специально к требованиям высокоскоростной аэродинамики и управления термическими нагрузками. Кривые Безье не только помогают сгладить переход потока над автомобилем, но и повышают термическую устойчивость за счет более равномерного распределения напряжений и тепла по поверхности. Использование кривых Безье в этом контексте обеспечивает баланс между аэродинамической эффективностью и структурной целостностью, гарантируя, что передние кромки не только эффективны в минимизации аэродинамического сопротивления, но и способны выдерживать суровые условия гиперзвукового полета. Результатом такого детального подхода является передовая конструкция, одновременно геометрически оптимизированная и термодинамически прочная, устанавливающая новый стандарт проектирования гиперзвуковых транспортных средств. Благодаря этим шагам конструкция волнового мотоцикла разрабатывается с высокой точностью, отвечая как высоким требованиям гиперзвуковых путешествий, так и практическим аспектам производства и моделирования транспортных средств.

Методика соприкасающихся конусов представляет собой сложную структуру, основанную на областях аэродинамики, вычислительной гидродинамики (CFD) и прикладной математики. Этот подход формирует целостный и углубленный путь проектирования гиперзвуковых волноплавающих аппаратов, эффективно решая сложные проблемы, связанные с гиперзвуковыми потоками и структурной динамикой. Интеграция этих междисциплинарных областей гарантирует, что полученная в результате конструкция волновода достигает не только аэродинамической эффективности, но также демонстрирует повышенную термическую и структурную надежность.

На первом этапе этого вычислительного исследования решающее значение имеет создание точной вычислительной сетки. Эта сетка помогает точно передать сложные геометрические детали волновода, особенно в областях высокой чувствительности, таких как передние кромки. Точность моделирования этих кромок имеет первостепенное значение, поскольку даже небольшие неточности могут привести к значительным аэродинамическим последствиям. Такая тщательность в проектировании сетки необходима для воспроизведения предполагаемых геометрических особенностей и обеспечения того, чтобы моделирование отражало истинное аэродинамическое поведение вейврайдера. Расчетная поверхностная сетка, используемая в методе прямого моделирования Монте-Карло (DSMC), специально разработана с учетом уникальных характеристик конструкции волнового аппарата, как показано на рисунке 10. Эта сетка позволяет детально и точно моделировать динамику потока вокруг волновод, улавливающий существенные взаимодействия между поверхностью транспортного средства и гиперзвуковым потоком. Метод DSMC, известный своей способностью эффективно моделировать динамику разреженного газа, особенно хорошо подходит для анализа аэродинамических свойств транспортных средств, работающих в верхних границах атмосферы, где традиционные методы CFD могут оказаться неэффективными. Для моделирования окончательной конструкции волновода мы использовали программу SPARTA DSMC, соответствующую моделированию исходного конуса, генерирующего уда
Такая последовательность сохранялась, поскольку условия полета не менялись. Как показано на рисунке 11 (внизу), число Кнудсена попадает в верхний предел режима скольжения или в переходный режим.

Machine Translated by Google

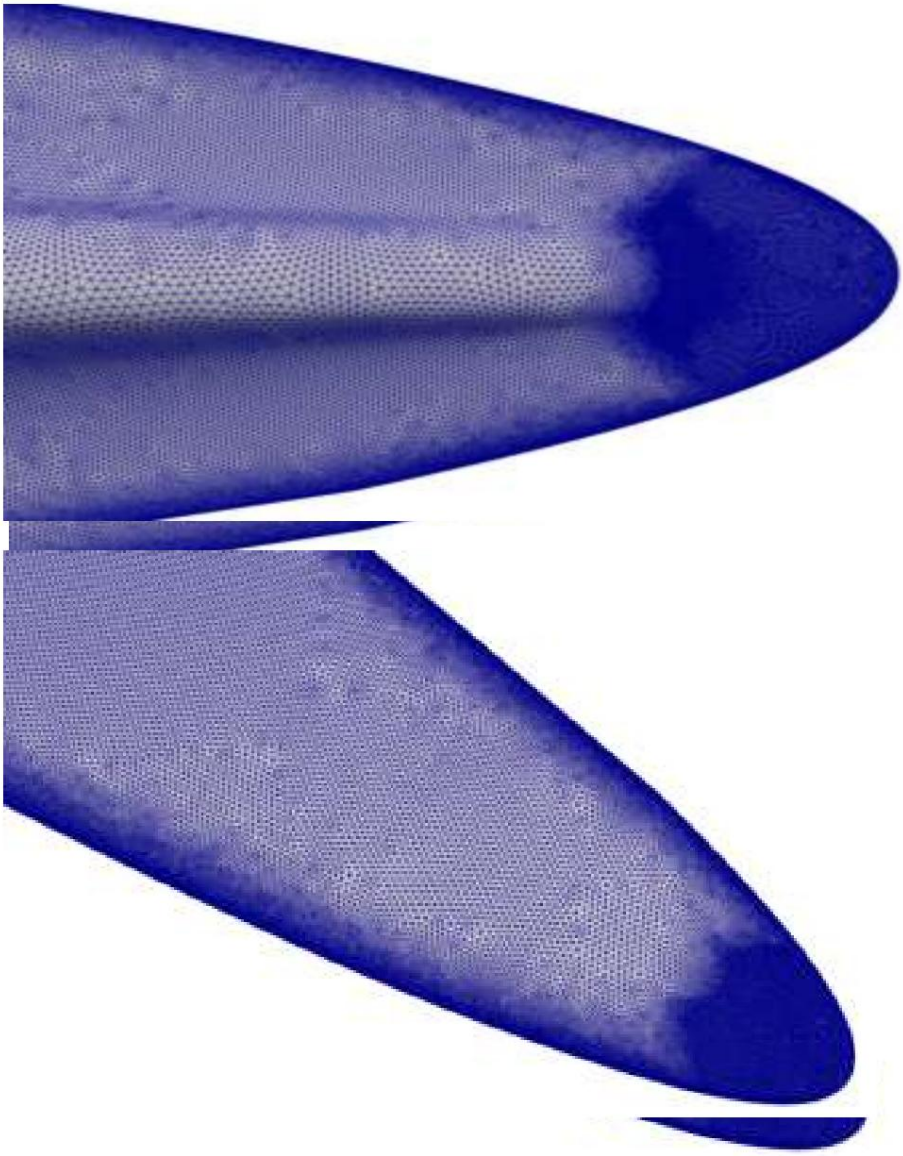


Рисунок 10. Используемая поверхностная сетка. Нижняя поверхность (вверху) и изометрический вид (внизу).

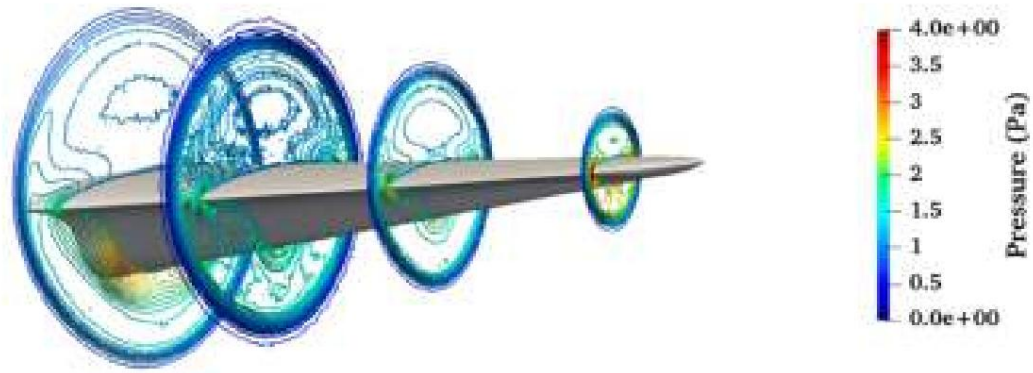


Рисунок 11. Продолжение.

Machine Translated by Google

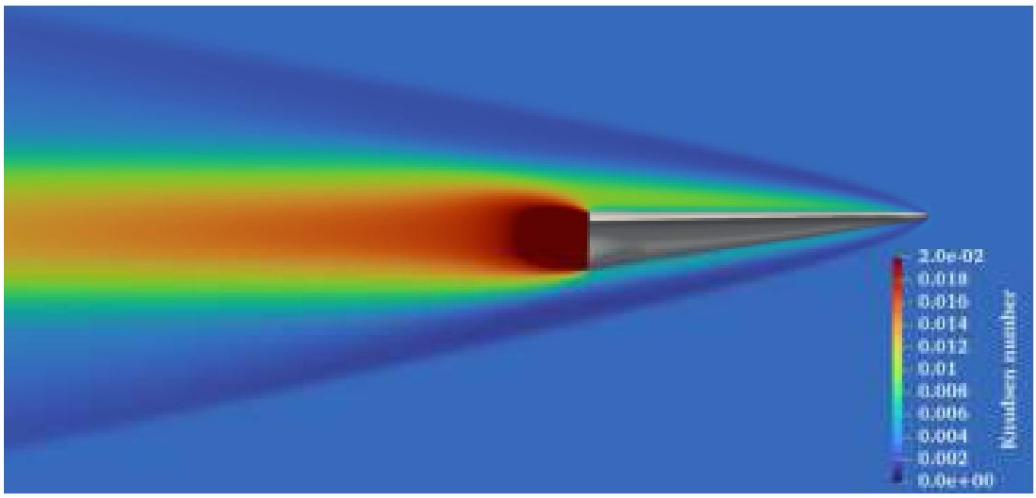


Рис. 11. Контуры давления вокруг аппарата (вверху), число Кнудсена полятечения в зависимости от длины волновода (внизу).

5. Результаты моделирования

Из-за больших вычислительных требований, связанных с моделированием гиперзвуковых течений, реализовано несколько стратегий для оптимизации использования вычислительных ресурсов. Одним из эффективных методов является моделирование только половины геометрии волновода, при этом результирующее поле потока затем симметрично отражается в заранее заданной плоскости. Такой подход существенно снижает вычислительную нагрузку без ущерба для точности результатов. Основная цель этого моделирования — подтвердить правильное расположение ударной волны относительно передних кромок транспортного средства. Эта проверка проводится путем анализа контуров давления и графиков Q-критерия, которые показаны на рисунках 11 и 12 соответственно.

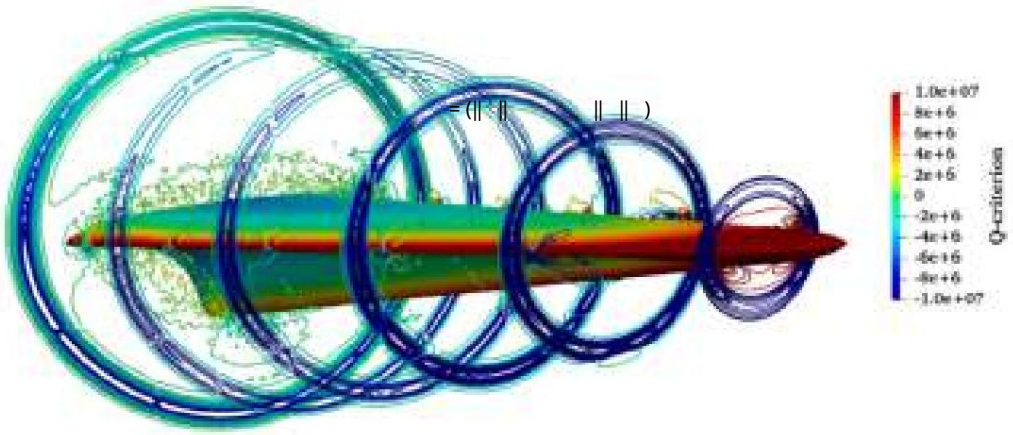


Рис. 12. Контуры Q-критерия вокруг автомобиля.

Q-критерий, рассчитанный с использованием уравнения (2), включает в себя Ω, антисимметричную составляющую градиента скорости, представляющую завихренность, и S, симметричную составляющую, представляющую скорость деформации.

$$K = \frac{1}{2}\left(\Omega^2 - S^2\right) \quad (2)$$

Согласно установленным критериям, положительные значения Q-критерия обозначают области внутри полятечения, где преобладает завихренность, что указывает на области вращательного течения. И наоборот, отрицательные значения указывают на доминирование скорости деформации или вязких напряжений [42,43]. Этот критерий является важным диагностическим инструментом для анализа характеристик потока вокруг



Machine Translated by Google

волновод. Например, на рисунке 13 отрицательные значения Q-критерия, наблюдаемые ниже передней кромки, сигнализируют о наличии толчка в этой области. Соответствующие графики контура давления, показанные на рисунке 11, показывают отчетливое нарастание давления вокруг передних кромок вейврайдера, подтверждая эффективное присоединение ударной волны к геометрии транспортного средства.

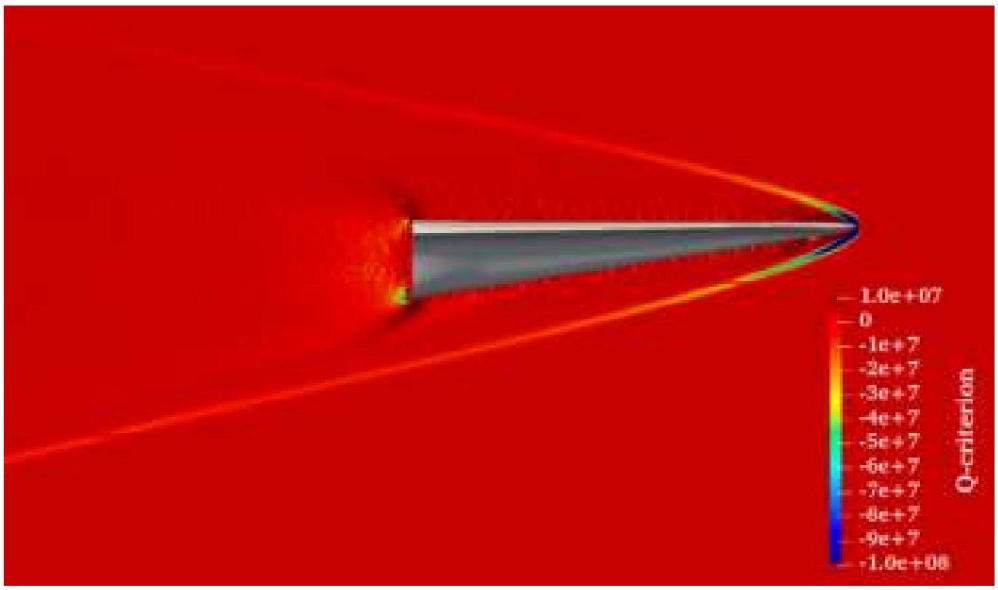


Рис. 13. Контуры Q-критерия на плоскости симметрии.

Более того, на рисунке 11 графически изображено распределение давления на поверхности вейврайдера. Как и ожидалось, повышенные уровни давления заметны вокруг передних кромок и носовой части, что подтверждает наличие прикрепленной ударной волны. Такая интеграция различных видов компьютерной диагностики — от оптимизации сетки до подробного анализа давления и Q-критерия — позволяет провести тщательную оценку аэродинамических характеристик вейврайдера. Эти результаты подчеркивают строгость вычислений и физическую обоснованность конструкции волновода, особенно в отношении прикрепления ударных волн к передним кромкам. На рисунке 13 изображены контуры Q-критерия на плоскости симметрии, а на рисунке 14 показаны соответствующие контуры на вертикальной плоскости в задней части автомобиля, где концентрированные синие области на законцовках крыла и под фюзеляжем обозначают присоединенные ударные нагрузки, далее демонстрируя аэродинамическую эффективность конструкции.

На рисунках 15 и 16 представлены контуры продольной скорости и температурное поле вокруг аппарата. Эти цифры имеют решающее значение для понимания того, как транспортное средство взаимодействует с потоком на высоких скоростях. В частности, моделирование выявляет важную тепловую динамику их характеристики потока жидкости. Для конкретных условий потока, применяемых в этом исследовании, температурное поле вокруг автомобиля демонстрирует значительные температурные изме Пиковая температура в 1400 Кельвинов наблюдается прямо перед носовой частью вейврайдера, что указывает на области, где аэродинамический нагрев наиболее интенсивен из-за быстрого торможения потока. Эта информация жизненно важна для оценки термического сопротивления и структурной целостности вейврайдера в эксплуатационных условиях.

Machine Translated by Google

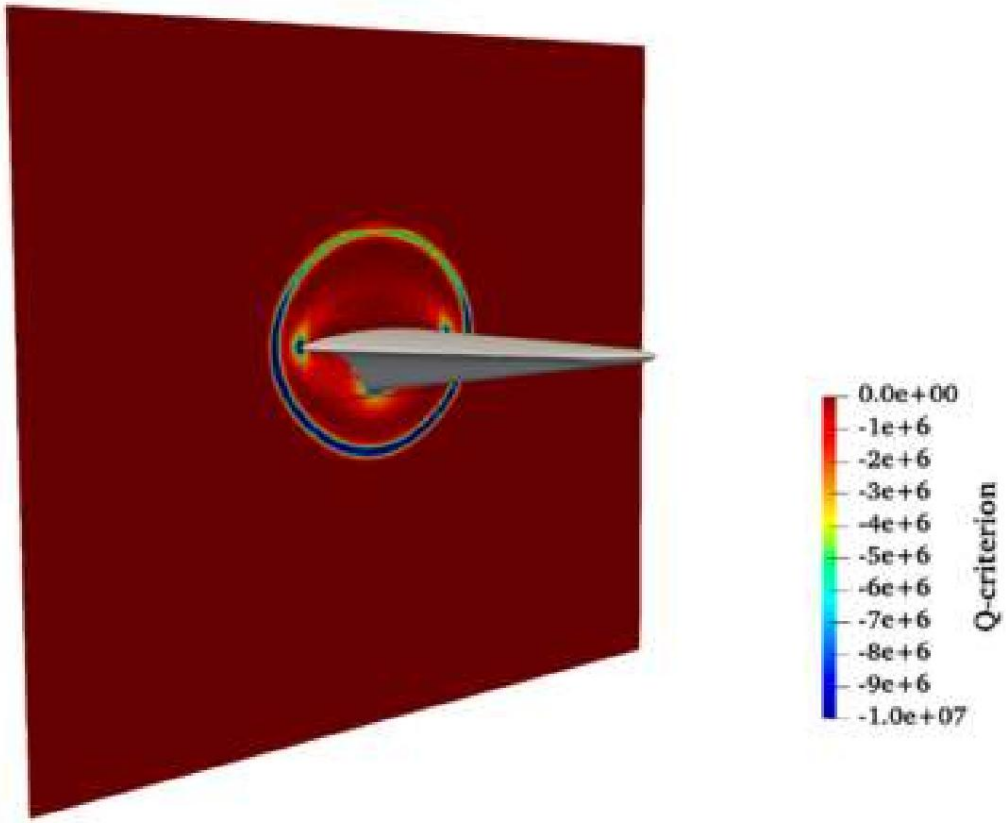


Рис. 14. Изолинии Q-критерия на вертикальной плоскости.

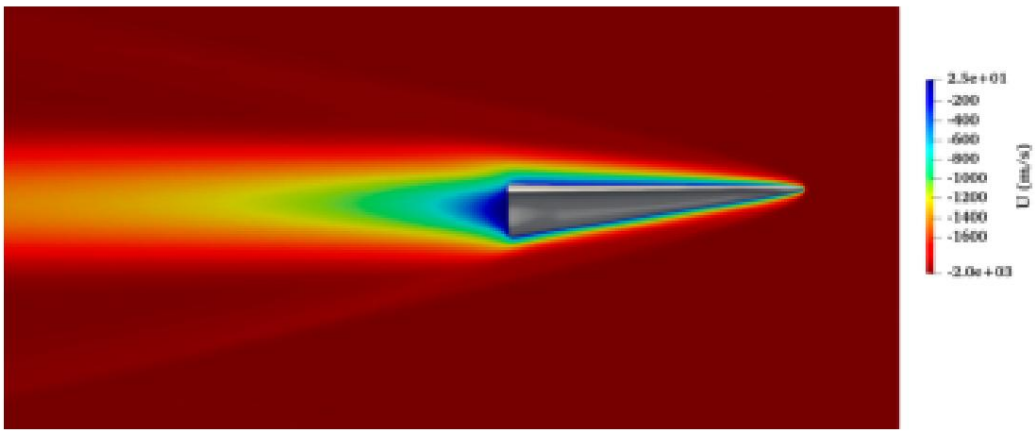


Рис. 15. Изолинии продольной скорости на плоскости симметрии волновода.

На рисунках 17–20 различные свойства потока показаны на плоскости, параллельной вейв ридеру , при этом поверх ность транспортного средства отчетливо выделяется изменениями поверх ностного давления. В частности, на рисунке 17 показаны контуры давления на этой плоскости, что дает четкое представление о том, как давление меняется в зависимости от формы и аэродинамики транспортного средства. Примечательно, что, учитывая, что давление набегающего потока установлено на уров не 0,55 Па, вокруг носовой части вейв райдера наблюдается значительное увеличение давления, которое на порядок прев ышает окружающие условия. Кроме того, давление вокруг передних кромок волновода примерно в четыре раза выше, чем давление набегающего потока. Это детальное карт ирование распределения давления имеет решающее значение для оценки аэродинамических х арактеристик и структурных напряжений, испытываемых волновым райдером во время работы.

Machine Translated by Google

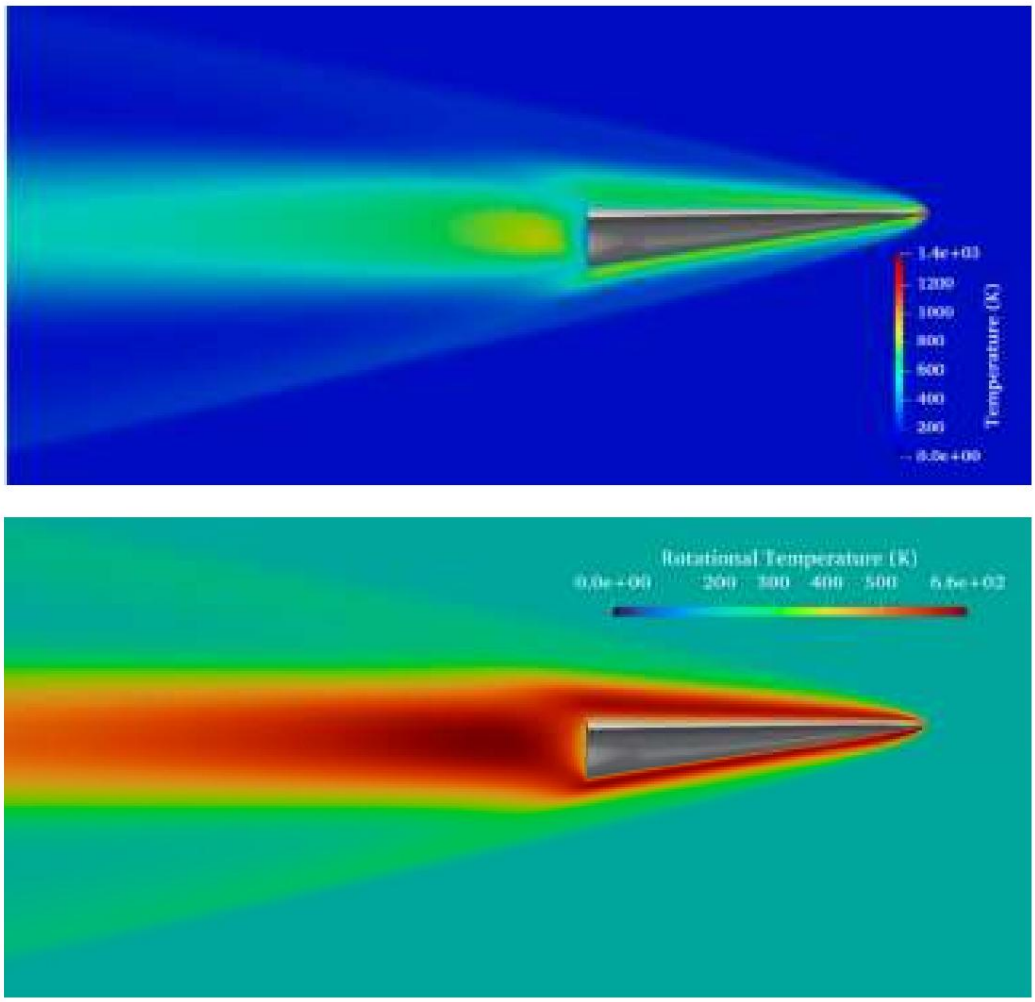


Рисунок 16. (Вверху): поле общей температуры вокруг автомобиля. (Внизу): вращательное температурное поле (на плоскости симметрии волновода).

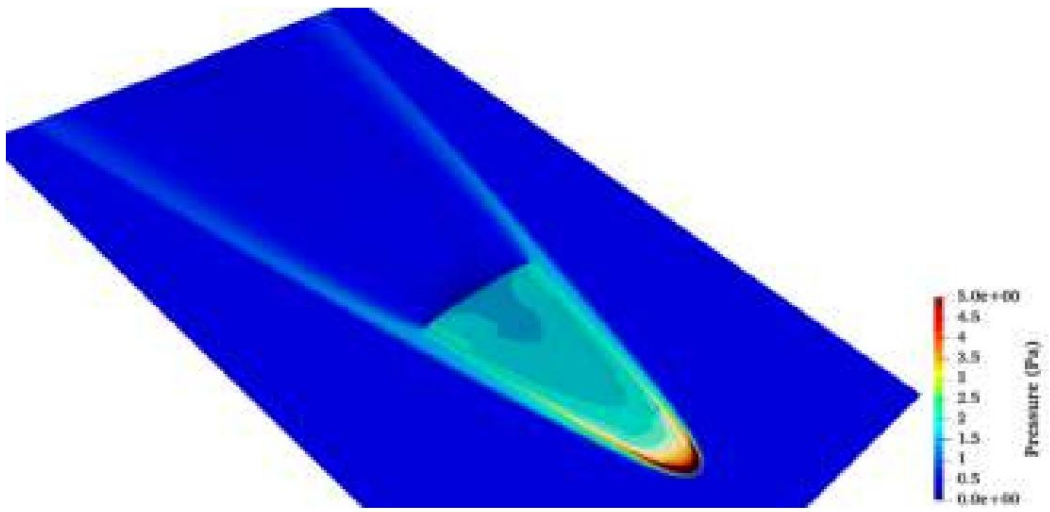


Рис. 17. Контуры давления на горизонтальной плоскости, параллельной автомобилю.

Machine Translated by Google

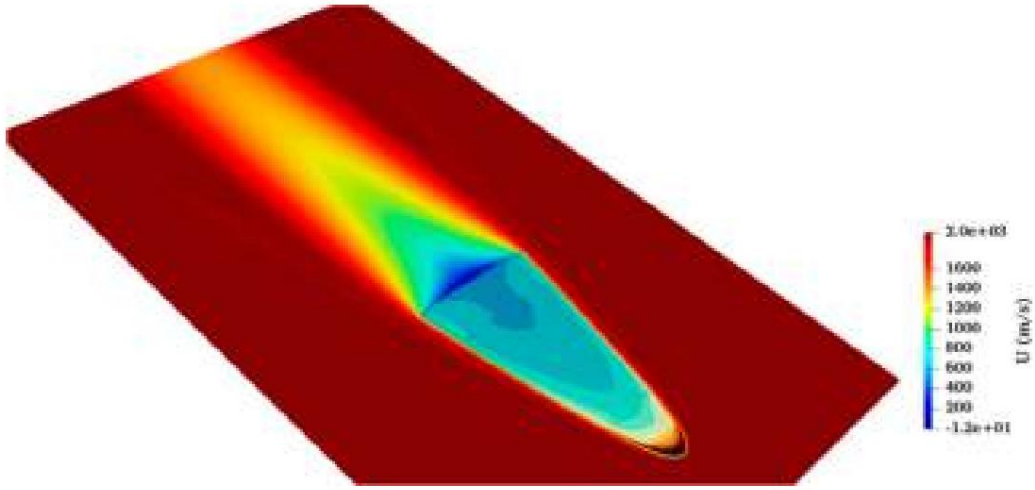


Рис. 18. Изолинии продольной скорости на горизонтальной плоскости, параллельной аппарату.

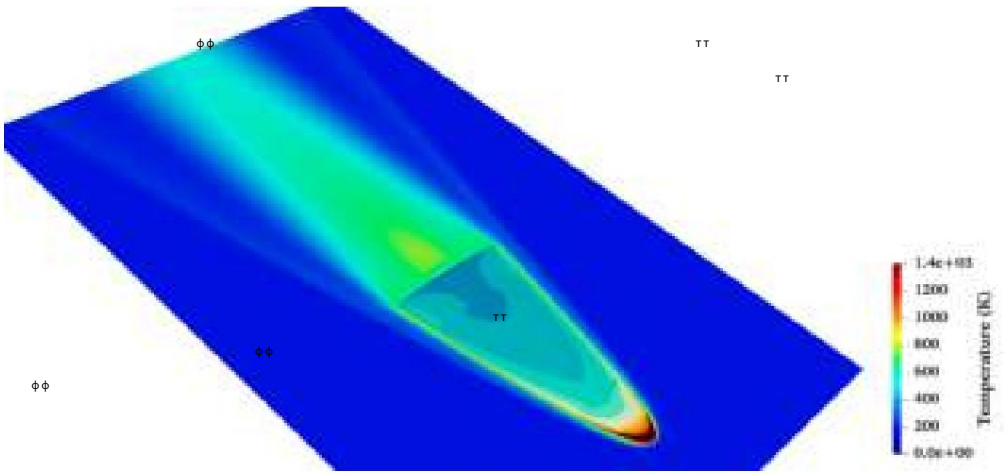


Рис. 19. Кривые температурына горизонтальной плоскости, параллельной автомобилю.

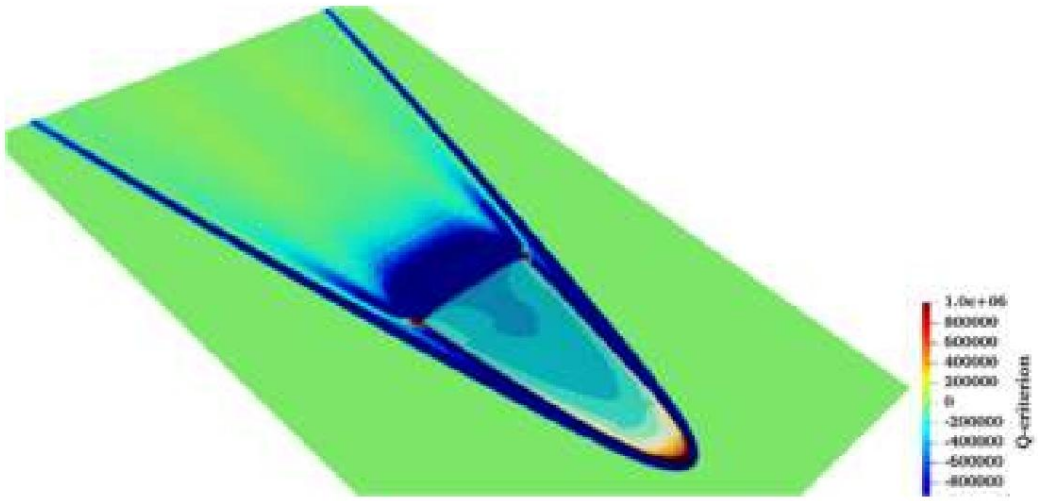


Рис. 20. Изолинии Q-критериянa горизонтальной плоскости, параллельной транспортному средству.

Machine Translated by Google

На рис. 18 показаны изолинии скорости в одной плоскости. На этом рисунке хорошо видно крепление амортизатора к передней кромке и носу автомобиля.
Как можно видеть на рисунке 19, температура вокруг передних кромок составляет 800 К, что примерно в четыре раза выше, чем температура набегающего потока, равная 196 К (с пиком около 1400 К в носовой части транспортного средства).

На рисунке 20 Q-критерий тщательно проиллюстрирован в той же плоскости, параллельной волнообразованию, эффективно захватывая все поле присоединенной ударной волны. Эта визуализация подчеркивает точные области, где амортизатор остается прикрепленным к поверхности вейврайдера, что является критическим аспектом его аэродинамической конструкции. Кроме того, положительные значения Q-критерия на этом рисунке указывают на образование двух отдельных вихрей, расположенных симметрично, по одному с каждой стороны, на законцовке задней части автомобиля. Эти вихри имеют решающее значение для понимания динамики потока в задней части вейврайдера, особенно того, как они влияют на общую устойчивость и управляемость транспортного средства на высоких скоростях. Для более детального наблюдения за этими вихрями на рис. 21 представлен улучшенный вид, на котором изображена завихренность в задней части вейврайдера. На этом рисунке два вихря отчетливо выделены красным цветом, что резко контрастирует с остальной частью поля потока.
Такая цветовая дифференциация не только подчеркивает расположение и интенсивность вихрей, но также помогает проанализировать их структуру и взаимодействие с окружающим потоком. Изображение этих вихрей в таких ярких деталях имеет решающее значение для инженеров и дизайнеров, чтобы оценить действующие аэродинамические взаимодействия и усовершенствовать конструкцию вейврайдера для достижения оптимальных характеристик.

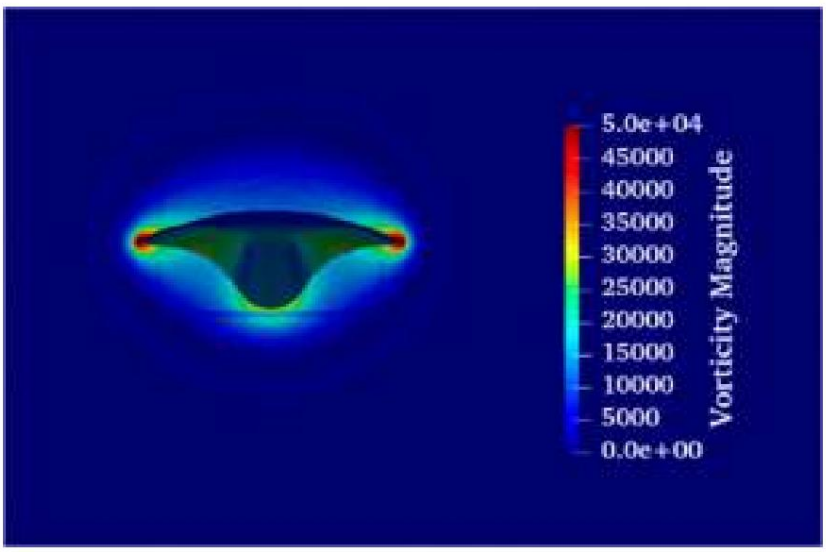


Рисунок 21. Величина завихренности в задней части автомобиля.

Учитывая сложную конструкцию волнового аппарата, было сочтено необходимым использовать трехмерные изоповерхности Q-критерия, чтобы полностью уловить сложные пространственные характеристики толчков и структурированных вихрей, окружающих аппарат. На рисунке 22 показаны эти трехмерные контуры Q-критерия, охватывающие транспортное средство, причем контуры окрашены в зависимости от величины завихренности, чтобы подчеркнуть изменения в поведении вращательного потока. Прозрачные серые изоповерхности отчетливо очерчивают внешнюю форму ударных волн, обеспечивая полное представление об их трехмерной форме. Примечательно, что на том же рисунке также видны части ударной волны, расположенные рядом с поверхностью сжатия, что дает детальное представление о том, как ударная волна взаимодействует с конструкцией транспортного средства.

Machine Translated by Google

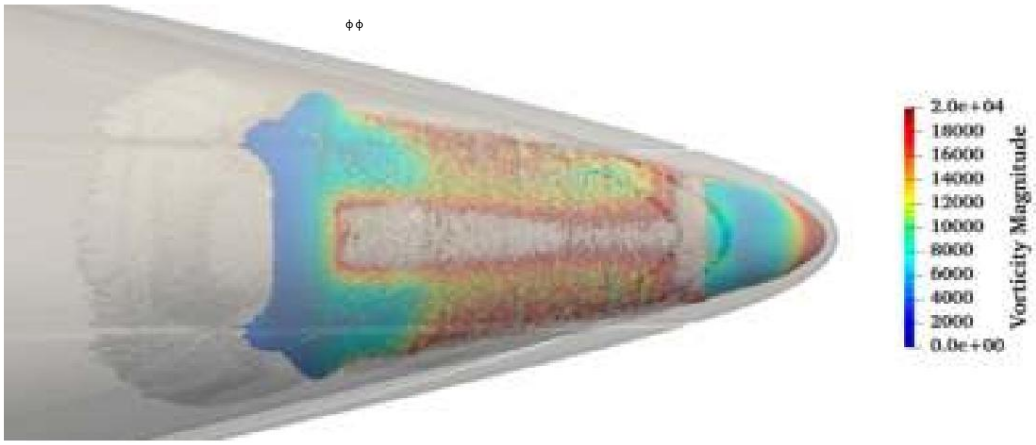


Рис. 22. Трехмерные контурыQ-критерия, окрашенные по величине завихренности.

На рисунке 23 эти контурыпостроеныаналогичным образом, но вместо этого они окрашеныв зависимости от величиныскорости, чтобыподчеркнуть различияв скорости потока. Как показано на этом рисунке, примерно в 30 смниже по потоку от носовой части автомобиля, где поверхность сжатиястановится круче, вихри отрываются от основного потока и продолжают двигаться вниз по потоку к областям более высокого давленияв задней части автомобиля. Это разделение имеет решающее значение дляпониманияаэродинамического поведенияв вейврайдера. Кроме того, по мере увеличенияугла поверхности сжатияпо направлению к задней части автомобиляпроисходит заметный рост давления, и скорость потока значительно снижается, замедляясь примерно на 1000 м/с всего за несколько сантиметров. Эти подробные визуализации и анализ динамики потока необходимыдляоценки влиянияконструкции транспортного средства на производительность в эксплуатационных условиях .

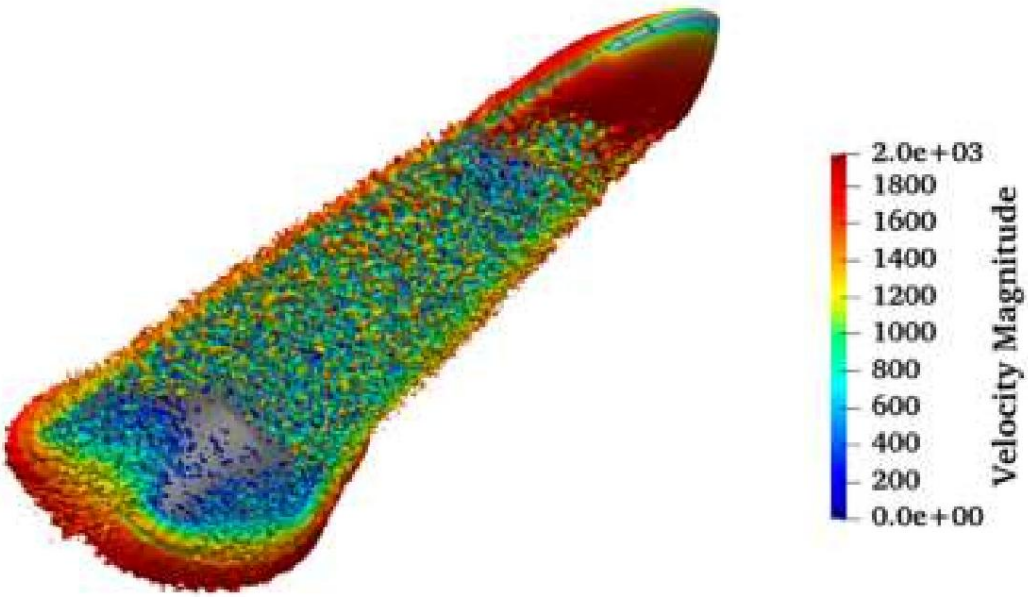


Рис. 23. Обзор трехмерных контуров Q-критериявокруг автомобиля, раскрашенных по величине скорости.

Дляопределенияаэродинамических сил, действующих на волнокод, были тщательно рассчитаны сдвиговые напряженияи компонентыдавленияна его трехмерной поверхности.
Эти расчетыоблегчают точное измерение подъемной силыи сил сопротивленияна единицу площади поверхности, результатыпоказанына рисунке 24. Анализ этого рисунка показывает, что максимальное сопротивление в основном возникает на кончике носа, в то времякак значительная подъемнаясила приходится на кончик носа. генерируетсяв области чуть ниже носа. Интегрируясилы, измеренные повсем

Machine Translated by Google

Для ячеек поверхности были рассчитаны общая подъемная сила и сопротивление волновода, в результате чего отношение подъемной силы к аэродинамическому сопротивлению (L/D) составило 2,18. Согласно существующим исследованиям, такое соотношение L/D типично для вейврайдера, работающего под углом атаки 0 градусов [44], что указывает на то, что значение выше 2,0 свидетельствует об эффективных аэродинамических характеристиках в выбранных расчетных условиях.

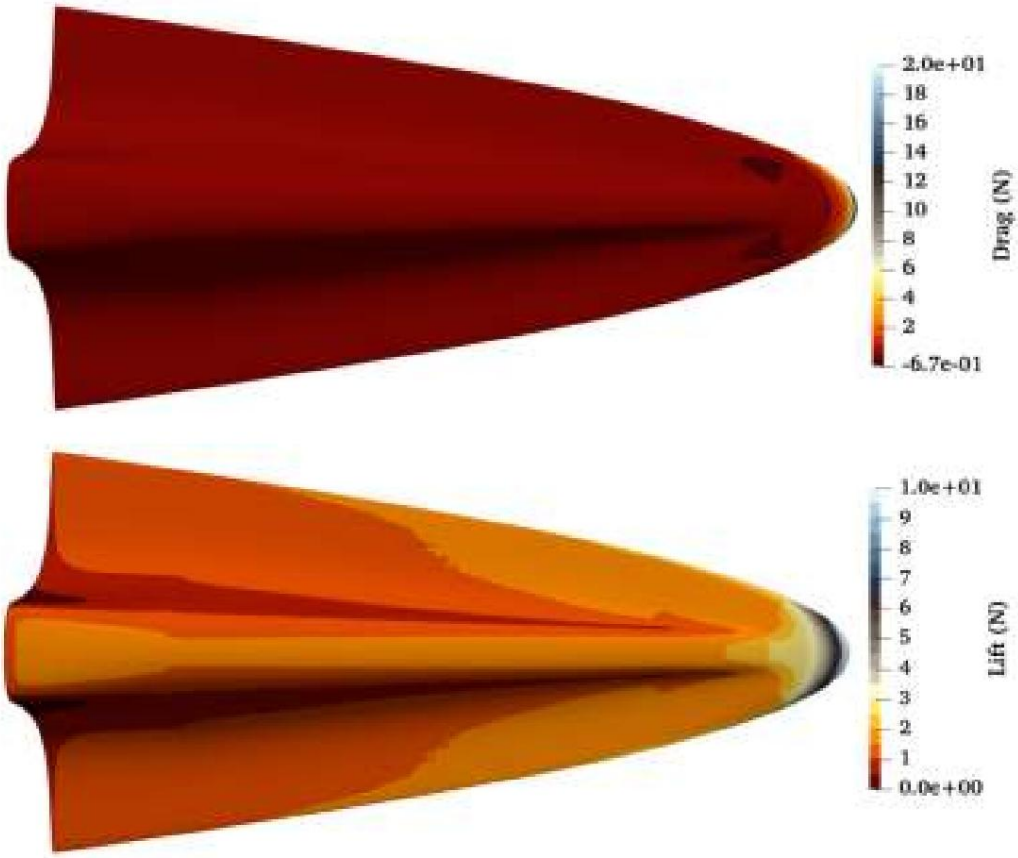


Рисунок 24. Обзор подъемной силы (внизу) и сопротивления (вверху) на единицу поверхности, действующей на нижнюю поверхность вейврайдера.

Контуры числа Кнудсена, основанные на длине волновода, изображены на рисунке 11 (внизу), а контуры числа Маха в плоскости симметрии изображены на рисунке 25. Как показано, число Кнудсена вокруг транспортного средства находится в пределах перехода диапазона, что оправдывает использование метода DSMC.

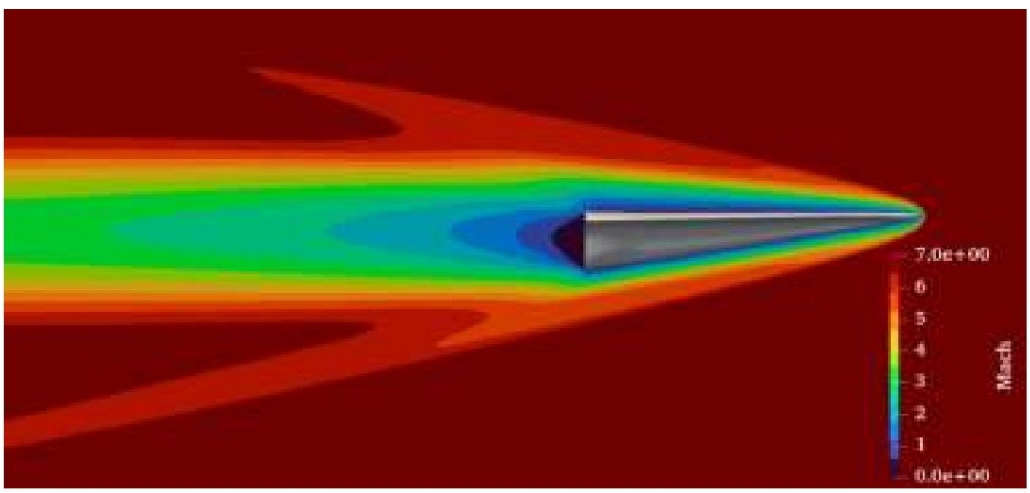


Рисунок 25. Контуры числа Маха вокруг автомобиля в плоскости симметрии.

Machine Translated by Google

В этом исследовании был исследован только один угол атаки; однако авторы работы[44] предполагают, что небольшое увеличение угла атаки потенциально может увеличить соотношение L/D в два-три раза, тем самым значительно улучшив производительность. Примечательно также, что в открытой литературе вейверайдеры обычно анализируются на высотах от 25 до 40 км, в отличие от высоты 90 км, рассматриваемой в данной работе. Повышенная высота влияет на создание подъемной силы из-за различной динамики жидкости, что требует большей поверхности сжатия, чем та, которая обычно наблюдается у вейверайдеров, работающих на более низких высотах.

Эта адаптация представляет собой важнейшую модификацию конструкции, улучшающую характеристики автомобиля в разреженных атмосферных условиях, встречающихся на больших высотах.

6. Выводы

При комплексном проектировании и анализе волнового аппарата, развивающего скорость 7 Маха, использовались сложные вычислительные методики для точного моделирования аэродинамических свойств аппарата. После применения методологии соприкасающегося конуса для определения геометрии вейверайдера была построена точная расчетная сетка, позволяющая ватить сложную геометрию поверхности, особенно вокруг критических передних кромок вейверайдера. Для расчета трехмерного поля потока вокруг автомобиля использовался передовой метод моделирования, метод прямого моделирования Монте-Карло (DSMC). Это моделирование не только детализировало давление и тепловые условия, окружающие волновод, но также выдвинуло на первый план структурные взаимодействия ударных волн, подтвержденные посредством визуализации продольных полей скорости и температуры.

Дальнейшее усовершенствование имитационной модели включало создание трехмерных изоповерхностей Q-критерия для сложного отображения ударных и вихревых структур вокруг волновода. Это позволило углубленно изучить динамику потока, в частности прикрепление ударных волн и образование вихрей на критических участках корабля. Такой подробный анализ был необходим для подтверждения аэродинамической эффективности конструкции. Кроме того, использование методов построения многослойной сетки способствовало точному обнаружению явлений пограничного слоя, что имеет решающее значение для оценки характеристик транспортного средства в экстремальных условиях гиперзвукового полета.

Кульминацией этого обширного моделирования стал расчет подъемной силы и сил сопротивления, где коэффициент подъемной силы был определен равным 2,18, что свидетельствует об эффективных аэродинамических характеристиках волнового мотоцикла при угле атаки нулевого градуса. Эти результаты важны, поскольку они не только демонстрируют возможности вейверайдера в предусмотренных расчетных условиях, но и предполагают потенциальные улучшения для будущих проектов. Например, регулировка угла атаки может дополнительно оптимизировать характеристики автомобиля. Результаты этого исследования в области высотной аэродинамики, где различная динамика жидкости требует таких модификаций, как увеличение поверхностей сжатия, открывают путь для усовершенствованных конструкций будущих гиперзвуковых аппаратов, работающих в ближнем космос

Вклад автора: концептуализация, АК и ИКН; методика, АК и ИКН; программное обеспечение, АК; валидация, АК и ИКН; ресурсы, АК; письменность – подготовка оригинального черновика, АК; написание-рецензирование и редактирование, ИКН; визуализация, АК; надзор, ИКН; администрация проекта, ИКН; финансирование приобретения, IKN. Все авторы прочитали и согласились с опубликованной версией рукописи.

Финансирование: Это исследование финансировалось Центром передового опыта интегрированной противовоздушной и противоракетной обороны (IAMD COE), и любая интеллектуальная собственность, возникшая в результате работы, охваченной этим исследованием, будет собственностью IAMD COE. Этот документ отражает только политику IAMD COE и позиции его автора(ов) и не предназначен для создания каких-либо юридических обязательств, а также не отражает политику или позиции НАТО или каким-либо образом вовлекает НАТО.

Заявление о доступности данных: данные, представленные в этом исследовании, доступны по запросу у соответствующего автора, поскольку этот проект финансировался НАТО IAMD-COE, и для обмена данными требуется их явное разрешение.

Благодарности: Авторы хотели бы поблагодарить UKTC и EPSRC за время, потраченное на вычисления на британской суперкомпьютерной установке ARCHER2 в рамках проектов EP/R029326/1 и EP/X035484/1.

Machine Translated by Google

Конфликтыинтересов: Авторызаявляют об отсутствии конфликта интересов.

Ссылки

1. Сэндлин, Д.Р.; Пессин, Д.Н. Аэродинамический анализ гиперзвукового самолета-волнолета; НАСА-CR-192981; НАСА: Вашингтон, округ Колумбия, США, 1993 год.
2. Нонвейлер, TRF Дельта-крыльяформы, поддающиесяточной теории ударных волн. JR Аэросп. Соц. 1963, 67, 39. [CrossRef] 3. Широчак, Д.; Смит, Х. Обзор проблем проектирования, характерных длягиперзвуковых летательных аппаратов. Прог. Аэросп. наук. 2016, 84, 1–28. [Перекрестнаяссылка]
4. Чжан, Т.Т.; Ван, З.Г.; Хуанг, В.; Ян, Л. Параметризацияи оптимизацияконфигураций гиперзвуковых планирующих аппаратов. во времяконцептуального проектирования. Аэросп. наук. Тех нол. 2016, 58, 225–234. [Перекрестнаяссылка]
5. Контоянnис, К. Оразработке эффективных моделей параметрической геометрии длягиперзвуковых летательных аппаратов на базе волновых лайнеров. доктор философии Диссертация, Саутгемптонский университет, Саутгемптон, Великобритания, 2017.
6. Сон, Дж; Сон, К.; Йи, К. Новаяструктура прямой оптимизации дляметодов обратного проектированиягиперзвукового волновода. Аэрокосмическаяпромышленность 2022, 9, 348. [CrossRef]
7. Флауэр, Дж.У. Конфигурации длявысоких сверхзвуковых скоростей, полученные из простых ударных волни расширений. Р. Аэронавт. Соц. Дж. 1963, 67, 287–290. [Перекрестнаяссылка]
8. Кухеманн, Д. Аэродинамический дизайнсамолета: подробное введение в современные аэродинамические знанияи практическое руководство. к решению задач проектированиялетательных аппаратов; Pergamon Press: Оксфорд, Великобритания, 1978.
9. Боукатт, К.Г. Междисциплинарнаяоптимизациявоздушно-реактивных гиперзвуковых аппаратов. Дж. Пропуль. Власть 2001, 17, 1184–1190. [Перекрестнаяссылка]
10. Кокрелл, К.Э., младший. Интерпретацияданных опроизводительности волноплавателяс использованием вычислительной гидродинамики. Дж. Эйркр. 1994, 31, 1095–1100. [Перекрестнаяссылка]
11. Корда, С.; Андерсон Дж. Младший. Гиперзвуковые волноводы, оптимизированные повязкости, сконструированные на основе осесимметричных полей потока. В материалах 26-е совещание поаэрокосмическим наукам, Рино, Невада, США, 14 января 1988 г.
12. Нонвайлер, Т.Р.Ф. Аэродинамические проблемыпилотируемых космических аппаратов. Р. Аэронавт. Соц. Дж. 1959, 63, 521–528. [Перекрестнаяссылка]
13. Зубин М.А.; Остапенко Н.А. Экспериментальное исследование некоторых особенностей сверхзвукового обтеканияV-образных крыльев. ЖидкостнаяДин. 1975, 10, 647–652. [Перекрестнаяссылка]
14. Остапенко, Н. А. Аэродинамические характеристики V-образных крыльев с отрывомударных волнот передних кромок на гиперзвуке. скорости. ЖидкостнаяДин. 1993, 28, 545–552. [Перекрестнаяссылка]
15. Максимов Ф.А.; Остапенко Н. А. V-образные крыльяс угломраскрытия, превышающимπ, при сверх- и гиперзвуковых скоростях потока. Докл. Физ. 2016, 61, 412–417. [Перекрестнаяссылка]
16. Мажул, II; Рахимов Р.Д. Численное исследование нерасчетных режимов обтеканиястепенных волноводов на основе течет за плоскими скачками уплотнения. ЖидкостнаяДин. 2003, 38, 806–814. [Перекрестнаяссылка]
17. Мажул, II; Рахимов Р.Д. Гиперзвуковые степенные волнопланы. Дж. Эйркр. 2004, 41, 839–845. [Перекрестнаяссылка]
18. Мажул И.И. Нерасчетные режимыобтеканияволноводов на основе течений изоэнтропического сжатия. ЖидкостнаяДин. 2003, 45, 271–280. [Перекрестнаяссылка]
19. Джонс, Дж.Г.; Мур, К.К; Пайк, Дж; Роу, П.Л. Метод проектированияподъемных системдлявысоких сверхзвуковых скоростей с использованием осесимметричные полятечения. Инж-арх. 1968, 37, 56–72. [Перекрестнаяссылка]
20. Манхен, Б.; Бенай, Р.; Чанец, Б.; Чпоун, А. Оптимизациявязких волноводов, полученных на основе осесимметричного степенного течениязатупленного тела. Дж. Спейсер. Ракета. 2006, 43, 990–998. [Перекрестнаяссылка]
21. Корда, С. Гиперзвуковые волноводы, оптимизированные длявязкости, спроектированные на основе обтеканияконусов и тел с минимальным сопротивлением. доктор философии Диссертация, Университет Мэриленда, КолледжПарк, Мэриленд, США, 1988 г.
22. Дин, Ф.; Лю, Дж; Шен, СВ; Хуанг, В. Новый подход к проектированию волнового аппарата, созданного на основе осесимметричного сверхзвука. течет мимозаостренной оживыфон Кармана. Аэросп. наук. Тех нол. 2015, 42, 297–308. [Перекрестнаяссылка]
23. РасмуссенМЛ. Конфигурации подъемных тел на основе сверхзвуковых обтеканий наклонных круговых и эллиптических конусов. В материалах 5-й конференции помеханике атмосферного полета длябудущих космических систем, AIAA Paper, Боулдер, Колорадо, США, 6–8 августа 1979 г.; п. 1665.
24. Расмуссен, МЛ. Конфигурации волноводов, полученные из наклонных круглых и эллиптических конусов. Дж. Спейсер. Ракета. 1980, 17, 537–545. [Перекрестнаяссылка]
25. Расмуссен, МЛ.; Йишке, МС; Дэниел, округ Колумбия. Экспериментальные силыи моментына волнорайдерах с конуснымкорпусомдляm = от 3 до 5. Дж. Космос. Ракета. 1982, 19, 592–598. [Перекрестнаяссылка]
26. Расмуссен, МЛ.; Йишке, МС; Дэниел, округ Колумбия. Экспериментальное поверхностное давление на волнорайдерах с конуснымкорпусомдляM = 3–5. Дж. Спейсер. Ракета. 1983, 20, 539–545.
27. Лин, СК; Расмуссен, М.Л. Конусные волноводыс комбинированной поперечной и продольной кривизной. В материалах 26-е совещание поаэрокосмическим наукам, документ AIAA 88-03714, Рино, Невада, США, 11–14 января 1988 г.
28. Лю, Чехия; Бай, П.; Чен, ВУ; Джи, CQ Быстрое проектирование и оптимизацияWaverider из 3D Flow. В материалах 16-й конференции AIAA поавиационным технологиям, интеграции и эксплуатации, AIAA Paper 2016-3288, Вашингтон, округ Колумбия, США, 13–17 июня 2016 г.
29. Маклафлин Т.А. Оптимизированные повязкости гиперзвуковые волноводыдлях имического равновесного потока. Магистерскаядиссертация, Университет Мэриленд, КолледжПарк, Мэриленд, США, 1990 г.

Machine Translated by Google

30. Андерсон, доктор медицинских наук; Чанг, Дж; Маклафлин, Т.А. Гиперзвуковые волноводы: эффектых имически реагирующего потока и вязкого взаимодействия.
В материалах 30-го собрания и выставки по аэрокосмическим наукам, документ AIAA 92–0302, Рино, Невада, США, 6–9 января 1992 г.
31. Ли, МЮ; Чжоу, Х . Исследование метода проектирования аэродинамической конфигурации волновода на основе коммерческого программного обеспечения CFD.
Подбородок. В . Мех . 2014, 35, 293–299.
32. Тейлор, Дж И.; Маколл Дж В . Давление воздух а на конус, движущийся с большой скоростью I. Учеб. Р . Сок. А 1933, 139, 278–297.
33. Сантос, В.Ф . Влияние затупления на аэродинамическое качество гиперзвукового клинового потока. Дж Спейсер. Ракета. 2009, 46, 329–339. [Перекрестная ссылка]
34. Чен, XQ; Х оу, ZX; Лю, JX; Гао, XZ Влияние тупости на производительность вейврайдера. Вычислить. Жидкости 2011, 48, 30–43.
[Перекрестная ссылка]
35. Тиннер, диджей; Бернетт, Д.В . Гиперзвуковой испытательный аппарат на волнах – логичный следующий шаг. Дж Спейсер. Ракета. 1994, 31, 392–399. [Перекрестная ссылка]
36. Берд Г.А. Молекулярная газодинамика и прямое моделирование газовых потоков; Clarendon Press: Оксфорд, Великобритания, 1994.
37. Вагнер В . Доказательство сх одимости метода прямого моделирования Берда Монте-Карло для уравнения Больцмана. Дж Стат. Физ. 1992,
66, 1011–1044. [Перекрестная ссылка]
38. Галлис, Массачусетс; Торчински-младший; Плимптон, SJ; Рейдер, диджей; Келер, Т. Прямое моделирование Монте-Карло: В поисках скорости. В
Материалы 29-го симпозиума по динамике разреженных газов (RGD), Сиань, Китай, 13–18 июля 2014 г.
39. Кура, К .; Мацумото, Х . Молекулярная модель переменных мягких сфер для видов воздух а. Физ. Жидкости Жидкость. Дин. 1992, 4, 1083–1085.
[Перекрестная ссылка]
40. Боргнакке, К .; Ларсен, П.С. Статистическая модель столкновений для моделирования многоатомных газовых смесей методом Монте-Карло. Дж Компьютер. Физ.
1975, 18, 405–420. [Перекрестная ссылка]
41. Галлис, Массачусетс; Торчинский, Дж Р . Влияние сх ем выбора партнера по столкновению на точность и эффективность метода прямого моделирования Монте-Карло. Межд. Дж Нумер.
Methods Fluids 2011, 67, 1057–1072. [Перекрестная ссылка]
42. Жан, Дж М; Ли, Ю Т .; Вай, В СЗ; Х у, В .К. Сравнение критерия Q и критерия Rortex при применении прямоточного
структура. Физ. Жидкости 2019, 31, 121701. [CrossRef]
43. Чон, Дж; Х усейн, Ф . Об идентификации вих ря. Дж Гидромех аника. 1995, 285, 69–94. [Перекрестная ссылка]
44. Х уанг, В .; Ма, И .; Ван, З .; Пуркашанян, Д.Б .; Луо, С .; Лей, Дж А. Параметрическое исследование аэродинамических х арактеристик самолета
гиперзвуковой волновой аппарат. Акта Аэронавт. 2011, 69, 135–140. [Перекрестная ссылка]

Отказ от ответственности/Примечание издателя: Заявления, мнения и данные, содержащиеся во всех публикациях , принадлежат исключительно отдельному автору(ам) и соавторам(ам), а не MDPI и/или редактору(ам). MDPI и/или редактор(ы) не несут ответственности за любой вред людям или имуществу, возникший в результате любых идей, методов, инструкций или продуктов, упомянутых в контенте.

Machine Translated by Google

вычисление

MDPI

Статья

Течение гибридной наножидкости над сжимающимся вращающимся диском: Методология поверхности реагирования

Русяириянти Яхаяи [1], Норихан Мд. Арифин [1,2,*], Йоан Поп [3], Фадзила Мд Али [1,2]
Сити Сузиллиана Путри Мохамед Иса [1,4]

[1] Институт математических исследований, Университет Путра Малайзия, Серданг 43400, Малайзия; rusyairyanti@gmail.com (RIY); fadzilahma@upm.edu.my (FMA); ctsuzilliana@upm.edu.my (SSPMI)
[2] Факультет математики и статистики, Университет Путра Малайзия, Серданг 43400, Малайзия.
[3] Факультет математики, Университет Бабеш-Бойяи, 400084 Клуж-Напока, Румыния; popm.ioan@yahoo.co.uk Центр
[4] фундаментальных исследований сельскохозяйственных наук, Университет Путра Малайзия, Серданг 43400, Малайзия
* Адрес для переписки: norihana@upm.edu.my.

Аннотация: Для эффективного отопления и охлаждения желательны минимальное напряжение сдвига стенок и максимальная скорость теплопередачи. Настоящее исследование оптимизировало локальный коэффициент поверхностного трения и число Нуссельта в потоке гибридной наножидкости Al2O3 -Cu/вода через проницаемый сжимающийся вращающийся диск. Сначала основные уравнения и граничные условия решаются численно с использованием решателя bvp4c в MATLAB. Преобразования фон Кармана используются для сведения уравнений в частных производных к разрешимым нелинейным обыкновенным дифференциальным уравнениям. Установлено, что увеличение параметра массообмена приводит к уменьшению локального коэффициента поверхностного трения и числа Нуссельта. В случае впрыска наблюдаются более высокие значения этих интересующих физических величин, чем
При этом увеличение величины параметра усадки улучшало и уменьшало локальный коэффициент поверхностного трения и число Нуссельта соответственно. Затем применяется методология поверхности отклика (RSM), чтобы понять интерактивное влияние управляющих параметров на оптимизацию интересующих физических величин. При желательности 66% локальный коэффициент поверхностного трения и число Нуссельта оптимизируются на уровне 1,528780016 и 0,888353037, когда параметр усадки (λ) и параметр массообмена (S) составляют -0,8 и -0,6 соответственно.

Ключевые слова: диск; гибридная наножидкость; РСМ, сокращение; аспирация/инъекция

check for updates

Цитирование: Яхая, Род-Айленд; Арифин, Нью-Мексико; Поп, И.; Али, FM; Иса, SSPM Поток гибридной наножидкости по сжимающемуся вращающемуся диску: методология поверхности отклика. Вычисление 2024, 12, 141. https://doi.org/10.3390/Computation12070141.

Академические редакторы Али Джемаль Беним, Абдулмаджид А. Мохамад, Санг-Хо Сух, Рашид Беннасер, Павел Оклони Ян Талер

Поступила: 28 июня 2024 г.
Пересмотрено: 6 июля 2024 г.
Принято: 8 июля 2024 г.
Опубликовано: 10 июля 2024 г.

Копирайт: © 2024 авторов. Лицензиат MDPI, Базель, Швейцария. Эта статья находится в открытом доступе. распространяется на условиях и условиях Creative Commons Лицензия с указанием авторства (CC BY) (https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

1. Введение

Вращающиеся машины, роторы газовых турбин и системы теплоэнергетики относятся к многочисленным практическим применениям классического течения вращающегося диска [1]. Уравнения Навье–Стокса для течения вращающегося диска были впервые представлены фон Карманом [2]. В этом исследовании преобразования фон Кармана были введены для сведения уравнений в частных производных к системе обыкновенных дифференциальных уравнений. Позднее эти уравнения использовались в различных задачах обтекания вращающегося диска. Аяно и др. [3] провели численный расчет магнитогидродинамического (МГД) течения наножидкости над растягивающимся вращающимся диском с броуновским движением, термофореза и гиротактических микроорганизмов. В этом исследовании использовались преобразования фон Кармана, и было обнаружено, что увеличение параметра растяжения уменьшает температурный профиль. Между тем усиление термофореза и броуновского движения увеличивало и уменьшало профиль концентрации. Затем Шарма и др. проанализировали нестационарное течение наножидкости по растягивающемуся вращающемуся диску с переменной вязкостью, броуновское движение и термофорез. [4]. Было обнаружено, что повышенная скорость растяжения способствует течению жидкости в радиальном направлении
Пунит и др. Затем [5] исследовали нестационарное течение над проницаемым растягивающимся вращающимся диском. Было замечено, что высокая объемная доля наночастиц улучшает и снижает профили температуры и скорости наножидкости.

Machine Translated by Google

Исследователи также изучили поток гибридных наножидкостей во вращающемся диске, содержащий дисперсию двух разных наночастиц. Рашид и др. [6] проанализировали течение МГД-гибридной наножидкости по вращающемуся диску с броуновским движением и термофорезом. Было отмечено, что гибридная наножидкость обладает лучшей теплопроводностью, чем наножидкость. Более того, усиление магнитного поля уменьшило осевую и тангенциальную скорости, одновременно увеличив поверхностное сопротивление. Между тем, термофорез и объемная фракция наночастиц улучшили эффективность теплопередачи. Алкухайли [7] расширил это исследование, включив в него тепловое излучение и источник/поглотитель тепла. Было обнаружено, что усиление теплового излучения и переменных параметров теплопроводности привело к увеличению температурного профиля и локального числа Нуссельта. Дальнейшее расширение этого исследования было сделано Kumar et al. В работе [8] рассматривалось электромагнитогидродинамическое обтекание растягивающегося вращающегося диска с нерегулярным источником тепла, энергией Аррениуса и нелинейным излучением. Отмечено, что увеличение электрического параметра приводит к снижению коэффициента поверхностного трения и увеличению скорости теплопередачи. Между тем, Кулкарни [9] обнаружил, что скорость теплопередачи увеличивается с увеличением сферичности наночастиц в потоке гибридной наножидкости над проницаемым вращающимся диском со смешанной конвекцией, магнитным полем и скольжением. Лоуни др. Затем [10] проанализировали МГД-течение гибридной наножидкости Al2O3-Cu/вода над вращающимся диском со скольжением скорости, нулевым потоком массы и конвективными граничными условиями. Далее Хашиие и др. [11] провели анализ стабильности нескольких решений, полученных в потоке гибридной МГД-наножидкости над проницаемым вращающимся диском растяжения/сжатия с выделением тепла. Результаты показали, что только первое и второе решения были стабильными и физически значимыми, тогда как третье решение было нестабильным. Кроме того, только параметр всасывания улучшил характеристики теплопередачи гибридной наножидкости. Затем Виджей и Шарма [12] изучили эффекты Соре и Дюфура на течение МГД-гибридной наножидкости над проницаемым замедляющимся вращающимся диском. Позже Абу Бакар и др. [13] проанализировали нестационарное течение гибридной наножидкости Al2O3-Cu/вода по наклонному сжимающемуся вращающемуся диску с тепловым излучением и скольжением скорости. Аналогично, только первое решение оказалось устойчивым, а второе решение было неустойчивым. Объемная доля наночастиц, параметры излучения и сжатия увеличивали скорость теплопередачи. Недавно исследователями также было проанализировано течение вращающегося диска тройных и тетрагибридных наножидкостей, состоящих из трех и четырех различных наночастиц, диспергированных в базовой жидкости (см. Али и др. [14], Сингх и др. [15]).], а также Паттгири и Пол [16]). Кроме того, исследователи также использовали подходы машинного обучения для изучения течения жидкост

Более того, исследователи также включили статистический анализ для улучшения теоретических исследований потока жидкости по вращающемуся диску. Сложный статистический инструмент, называемый методологией поверхности отклика (RSM), обычно используется для анализа влияния и значимости различных управляющих параметров на заданные реакции. Оптимальные условия для достижения желаемого ответа также можно оценить с помощ Мехмуд и др. [19] использовали RSM для оптимизации локальных коэффициентов поверхностного трения и числа Нуссельта при обтекании МГД-наножидкости мимо растянутого вращающегося диска с генерацией энтропии и автокаталитической химической реакцией. Было обнаружено, что обе интересующие физические величины оптимизируются за счет более высокого значения магнитного параметра. Затем Шафик и др. В работе [20] рассматривалось течение Дарси–Форхеймера наножидкости мимо растянутого вращающегося диска с тепловым излучением. На основании анализа RSM и чувствительности локальное число Нуссельта было наиболее чувствительным к объемной доле твердого вещества, за ним следовали параметр излучения и число Био. Позже Мэтью и др. [21] исследовали влияние магнитного поля и стратификации в биоконвективном течении критической точки над растянутым вращающимся диском. В этом исследовании RSM использовался для исследования взаимосвязи между магнитным полем, термической стратификацией, объемной долей наночастиц магнетита, а также параметром отношения скоростей и скоростью теплопередачи. Установлено, что параметры тепловой стратификации и магнитного поля имеют отрицательную корреляцию со скоростью теплопередачи. Недавно RSM был использован Hussain et al. [22] для оптимизации обтекания вращающегося диска МГД-наножидкостью с помощью теплового излучения и джоулева нагрева. Между тем, Хашии и др. [23] с помощью RSM обнаружили, что параметры магнитного поля и всасывания существенно влия

Machine Translated by Google

нестационарное течение гибридной наножидкости по вращающемуся диску с выделением тепла. В то же время на скорость теплопередачи влияли параметры магнитного поля, всасывания и тепловыделения.

Из-за нехватки исследований потока вращающегося диска, которые сочетают в себе численные и статистические исследования, текущие исследования будут сосредоточены на этих подходах для анализа характеристик потока и теплопередачи в потоке гибридной наножидкости Al2O3-Cu/воды мимо сжимающегося вращающегося диска. Предполагается, что поверхность проницаема для обеспечения всасывания/инъекции. Уравнения в частных производных и граничные условия, управляющие этой задачей потока, будут решены численно с использованием решателя bvp4c в MATLAB. Затем будет выполнен RSM для анализа взаимодействия массопереноса с параметрами сжатия и их значения для оптимизации интересующих физических величин. Настоящее исследование направлено на то, чтобы заполнить существующий пробел в литературе и предложить лучшее понимание влияния параметров массопереноса и усадки на рассматриваемую проблему потока.

2. Математическая формулировка

Рабочая жидкость содержит наночастицы оксида алюминия (Al2O3) и меди (Cu), диспергированные в воде. Такая комбинация выбрана потому, что наночастицы Cu обладают высокой теплопроводностью, наночастицы Al2O3 обладают хорошей инертностью, а вода широко доступна. Более того, экспериментальное исследование Siddiqui et al. [24] продемонстрировали, что гибридная наножидкость Al2O3-Cu/вода с соотношением смешивания 50:50 приводит к общему улучшению гидротермальных свойств с улучшенной теплопроводностью и лучшей стабильностью. Между тем, корреляции и значения теплофизических свойств гибридной наножидкости Al2O3-Cu/вода основаны на Takabi et al. [25] и Ostoti и Abu-Nada [26]. При низкой объемной концентрации этой гибридной наножидкости корреляции, предложенные Takabi et al. [25] хорошо согласуются с результатами эксперимента, представленными Suresh et al. [27]. После этого в настоящем исследовании используется низкая объемная концентрация наночастиц Cu и Al2O3 (т.е. φAl2O3 = φCu = 0,02).

$$= = 0{,}02$$

При этом конфигурация течения описывается с помощью цилиндрических координат (r, φ, z), и , компонент скорости (u, v, w) соответственно. Схематическое изображение изображено на рисунке 1.

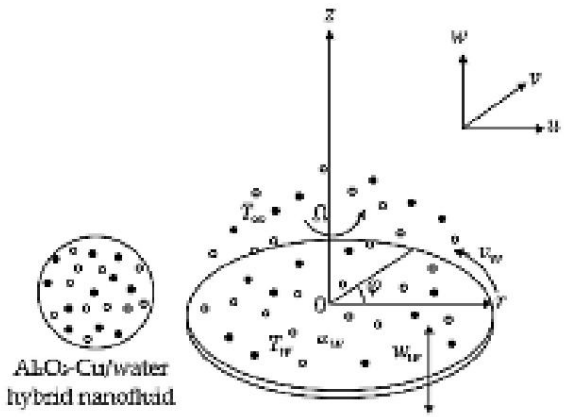


Рисунок 1. Принципиальная схема задачи о потоке.

Предполагается, что жидкость течет в области z 0 по бесконечному вращающемуся диску с равномерной скоростью сжатия a в радиальном направлении r; угловая скорость Ω, скорость массового потока Ωww = Ωvb f S с параметром массообмена S и кинематической вязкостью базовой жидкости νb f ; и постоянная температура Tw. 0 = ом
При этом предполагается, что окружающая гибридная наножидкость имеет температуру T , причем Tw > T для горячего диска. В настоящем исследовании поток считается стационарным и осесимметричным (т.е. / φ = 0 для > всех переменных). / = 0

Machine Translated by Google

Следуя изложенным предположениям, основные уравнения и граничные условия для ламинарного потока несжимаемой ньютоновской гибридной наножидкости выглядят следующим образом [28,29]:

$$\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{u}{r} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0, \quad (1)$$

$$u\frac{\partial u}{\partial r} + w\frac{\partial u}{\partial z} - \frac{v^2}{r} = -\frac{1}{\rho_{hnf}}\frac{\partial p}{\partial r} + \frac{\mu_{hnf}}{\rho_{hnf}}\left(\frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial u}{\partial r} - \frac{u}{r^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}\right), \quad (2)$$

$$u\frac{\partial v}{\partial r} + w\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{uv}{r} = \frac{\mu_{hnf}}{\rho_{hnf}}\left(\frac{\partial^2 v}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial v}{\partial r} - \frac{v}{r^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2}\right), \quad (3)$$

$$u\frac{\partial v}{\partial r} + w\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{uv}{r} = \frac{\mu_{hnf}}{\rho_{hnf}}\left(\frac{\partial^2 v}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial v}{\partial r} - \frac{v}{r^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2}\right), \quad (4)$$

$$u\frac{\partial T}{\partial r} + w\frac{\partial T}{\partial z} = \frac{k_{hnf}}{(\rho C_p)_{hnf}}\left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}\right), \quad (5)$$

$$u = u_w = ar, v = v_w = \Omega r, w = w_w, T = T_w \text{ при } z = 0 \; u \to 0, v \to 0, T \to T_\infty \text{ при } z \to \infty. \quad (6)$$

В этих уравнениях индекс hnf обозначает гибридную наножидкость, μ — динамическая вязкость, ρ — плотность, k — теплопроводность, Cp — удельная теплоемкость, T — температура и p — давление. Затем эти уравнения в частных производных подвергаются следующим преобразованиям Кармана [2]:

$$u = \Omega r f(\eta), v = \Omega r g(\eta), w = \Omega v_{bf} h(\eta), \theta(\eta) = \frac{T - T_\infty}{T_w - T_\infty}, \eta = z\sqrt{\frac{\Omega}{v_{bf}}}, p = 2\mu_{bf}P(\eta) \quad (7)$$

сформировать следующие нелинейные обыкновенные дифференциальные уравнения и граничные условия:

$$2f' + h' = 0, \quad (8)$$

$$\frac{\mu_{hnf}/\mu_{bf}}{\rho_{hnf}/\rho_{bf}}f''' + ff'' + g^2 + gf = 0, \quad (9)$$

$$\frac{k_{hnf}/k_{bf}}{(\rho C_p)_{hnf}/(\rho C_p)_{bf}}\theta'' + \Pr f\theta' = 0, \quad (10)$$

$$g(0) = 1, f(0) = \lambda, h(0) = S, \theta(0) = 1 \; g(\eta) \to 0, f(\eta) \to 0, \theta(\eta) \to 0 \text{ при } \eta \to \infty, \quad (11)$$

$$g(0) = 1, f(0) = \lambda, h(0) = S, \theta(0) = 1 \; g(\eta) \to 0, f(\eta) \to 0, \theta(\eta) \to 0 \text{ при } \eta \to \infty, \quad (12)$$

где ′ означает дифференцирование по η; bf относится к базовой жидкости; f, g, h — радиальная, тангенциальная и осевая скорости; λ = a/Ω – параметр сжатия; S — параметр массообмена, при этом S < 0 для впрыска и S > 0 для всасывания; $(\rho C_p)_{hnf}/(\rho C_p)_{bf}$ — μC_p можно k_{hnf} число Прандтля. Согласно Туркылмазоглу [28], давление жидкости $\Pr = \frac{\mu C_p}{k}$ определить путем интегрирования уравнения (4), а полученное уравнение давления отделяется от поля течения. Поскольку целью настоящего исследования является анализ течения и тепловых полей гибридной наножидкости, функцией давления можно прене

Machine Translated by Google

Тогда интересующими нас физическими величинами являются коэффициент поверхностного трения (Cf) и число Нуссельта (Nur) [28]:

$$Cp = \frac{\mu_{nf}\sqrt{\left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial r}\right)_{z=0}^{2} + \left(2\frac{\partial w}{\partial z}\right)_{z=0}^{2}}}{\rho_{bf}(\Omega r)^2},$$

$$Nup = \frac{r\,k_{nf}}{k_{bf}(T_w - T_\infty)}\left(\frac{\partial T}{\partial z}\right)_{r=0},$$

что приводит к следующему:

$$Re_r^{1/2} Cf = \frac{\mu_{hnf}}{\mu_{bf}}\sqrt{[f''(0)]^2 + [g''(0)]^2}, \quad Re_r^{-1/2} Nur = -\theta(0)\frac{k_{nf}}{k_{bf}}, \tag{13}$$

где $Re_r^{1/2} Cf$ – локальный коэффициент поверхностного трения, $Re_r^{-1/2} Nur$ — локальное число Нуссельта; и $Re_r = \frac{\Omega r^2}{\nu_{bf}}$ местное число Рейнольдса. Здесь увеличение угловой скорости может увеличить локальное число Рейнольдса.

3. Методология поверхности реагирования (RSM)

Бокс и Уилсон [30] представили экспериментальный подход, основанный на планировании, включающий статистические и математические методы, называемый методологией поверхности отклика (RSM). RSM можно использовать для моделирования, анализа и оптимизации системы, содержащей зависимые (реакция) и независимые параметры. Связь между откликом и независимыми параметрами можно описать следующим образом [31]:

$$\text{Ответ} = F(X1, X2, X3, \ldots, XN) \pm E, \tag{14}$$

где F – неизвестная функция реакции с X1, X2, X3, . . . , XN как независимые параметры, E — случайная экспериментальная ошибка, которая, как предполагается, имеет нулевое среднее значение . Между тем, общая квадратичная модель

$$\text{Ответ} = c0 + \sum_{i=1}^{N} ci\,xi + \sum_{i=1}^{N} cii\,xi^2 + \sum_{i=1}^{N-1}\sum_{j=i+1}^{N} cij\,xi\,xj, \tag{15}$$

где c0, ci , cii и cij представляют собой пересекающиеся, линейные, квадратичные и билинейные двухфакторные члены соответственно.

В текущем исследовании используется RSM и центральный композитный дизайн с лицевой стороной для изучения влияния параметров массопереноса и усадки на локальный коэффициент трения кожи и число Нуссельта, а также оптимальные настройки этих параметров для минимизации и максимизации реакций. Поэтому параметры массопереноса и усадки обозначены как независимые параметры, а локальный коэффициент поверхностного трения и число Нуссельта — как отклики. Независимые параметры обозначены как A и B, и им присвоены фактические и закодированные значения, как показано в таблице 1. Диапазоны фактических значений взяты на основе численного исследования, проведенного в текущем исследовании.

Таблица 1. Фактические и кодированные значения независимых параметров.

Независимый Параметр	Символ	Уровень		
		Низкий (−1)	Средний (0)	Высокий (1)
λ	А	1,0	0,9	0,8
С	Б	0,6	0,1	0,4

Центральный составной план является наиболее часто используемым расчетом поверхности отклика для определения коэффициентов квадратичной модели. По мнению Бхаттачарьи [32],

Machine Translated by Google

Центральный композитный дизайн имеет преимущество оценки нелинейной зависимости между независимые параметры и отклик, а также возможность обеспечить максимальную информацию с минимальными экспериментальными данными, и для предсказания необходимо меньше экспериментов. квадратичный член в квадратичной модели. Центральная композиционная конструкция состоит из нескольких типов, в том числе гранецентрированного. Центральный гранецентрированный композит для проектирования требуется три уровня каждого фактора или независимого параметра (т. е. 1, 0, 1) с $2^N + 2N + C$ экспериментов. Здесь N — количество независимых параметров; 2N обозначает факториальные точки; 2N обозначает осевые точки; и C обозначает центральные точки. Как как утверждают Сах у и Барман [33], центральные точки могут варьироваться от трех до шести. В этом В текущем исследовании при N = 2 и C = 5 всего проведено 13 прогонов. Соответствующий ответы, рассчитанные с использованием MATLAB для каждого запуска, затем заносятся в таблицу 2. Между тем, На рисунке 2 представлена блок-схема численных и статистических процедур, задействованных в расчете. текущее исследование.

$2 + 2 + 2 = 2^2 + 2 \times 2 + 5$

Таблица 2. Экспериментальный план и значения отклика.

Бежит	Кодированные значения		Фактические значения		Ответы	
	A	B	λ	C	$Pe_{1/2}$ ср. (Ответ 1)	$Pe_{1/2}$ Нур (Ответ 2)
1	1	1	1,0	0,6	1.803245471	0,232133118
2	1	1	0,8	0,6	1,529299905	0,975650061
3	1	1	1,0	0,4	1.475361873	0,000000014
4	1	1	0,8	0,4	1.229514429	0,000001138
5	1	0	1,0	0,1	1,642240690	0,000228587
6	1	0	0,8	0,1	1.380007580	0,004928016
7	0	1	0,9	0,6	1.659170147	0,525530320
8	0	1	0,9	0,4	1.346068736	0,000000126
9	0	0	0,9	0,1	1.504436107	0,001106468
10	0	0	0,9	0,1	1.504436107	0,001106468
11	0	0	0,9	0,1	1.504436107	0,001106468
12	0	0	0,9	0,1	1.504436107	0,001106468
13	0	0	0,9	0,1	1.504436107	0,001106468

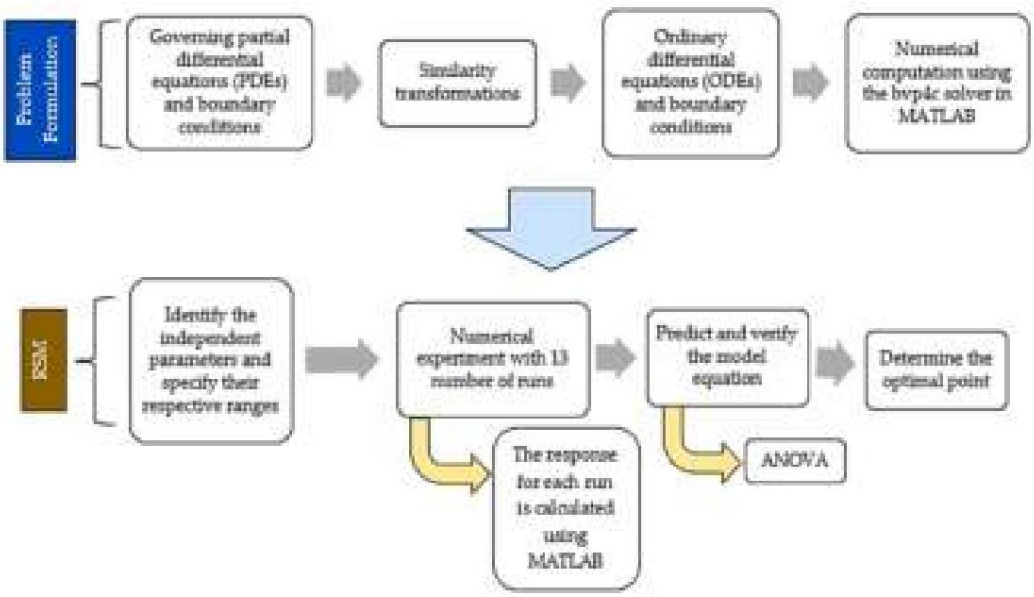


Рисунок 2. Блок-схема численных и статистических процедур.

4. Результаты и обсуждение.

Краевая задача (8)–(12) решается численно с помощью решателя bvp4c в программе MATLAB, а алгоритм представлен в дополнительных материалах . Сравнение

$= 0$

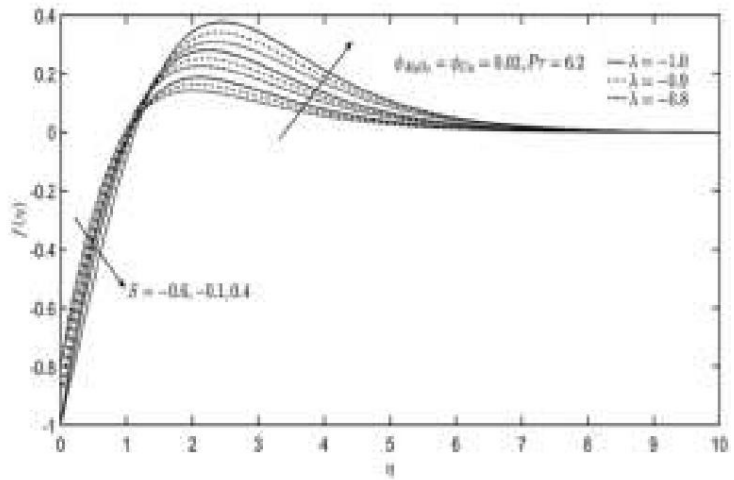
Machine Translated by Google

Результаты сделаны для подтверждения правильности математического подхода, использованного в этой работе. текущее исследование. При φhnf = 0 краевая задача сводится к классической вязкой задача о потоке жидкости, и численные результаты можно сравнить с результатами, рассчитанными с помощью Рашиди и др. [34] и Туркылмазоглу [28]. В этих предыдущих исследованиях использовалась стрельба и спектральный метод коллокации Чебышева соответственно. Несмотря на разницу в методах вычислений, результаты, полученные решателем bvp4c, близко согласуются с предыдущие исследования (см. Таблицу 3). Кроме того, предполагая конечное значение набегающего потока граничное условие (т. е. η) должно быть ηmax = 10, все профили, полученные в этом исследовании асимптотически приблизиться к граничным условиям набегающего потока (12). Таким образом, это усиливает уверенность в достоверности численных результатов.

Таблица 3. Сравнение результатов для φAl2O3 = φCu = S = λ = 0 и Pr = 6,2.

	Рашиди и др. [34]	Туркылмазоглу [28]	Настоящее исследование
′(0)	0,510186	0,51023262	0,510232394
′(0)	0,61589	0,61592201	0,615921866
′(0)	-	0,93387794	0,933877577

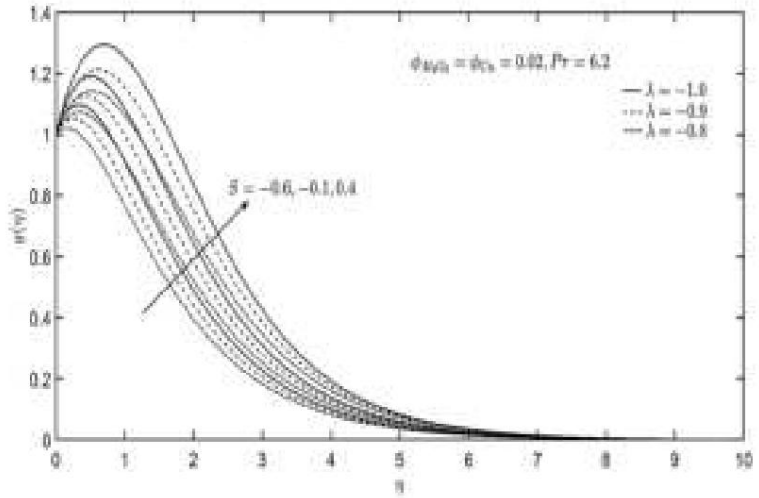
Профили ( ) ( ) представлены на рис. 3. Радиальная, тангенциальная и осевая скорости обозначены через f(η), g(η) и h(η) соответственно. Как видно на рисунке 3a, профиль лучевой скорости гибридная наножидкость уменьшается с увеличением параметра массопереноса и величину параметра сжатия. Однако наблюдается обратное поведение на некотором расстоянии от диска. Поскольку предполагается, что диск имеет состояние прилипания и для сжатия в радиальном направлении радиальная скорость гибридной наножидкости вблизи диска уменьшается по мере увеличения величины параметра сжатия. Эффекты сокращения Показано, что в сторону скорости жидкости уменьшаются на некотором расстоянии от диска (см. рисунок 3a). При этом сжатие диска не влияет на тангенциальную и осевые скорости гибридной наножидкости. Тангенциальная скорость гибридной наножидкости продолжает увеличиваться по всему пограничному слою, когда параметр массообмена и величину увеличения параметра сжатия (см. рисунок 3b). Рисунок 3c демонстрирует видно, что профиль осевой скорости вблизи диска увеличивается с увеличением как параметра массообмена и величину параметра сжатия. Поскольку массоперенос происходит в осевом направлении. В направлении скорость жидкости увеличивается с увеличением параметра массообмена. Между тем, лучевая скорость вблизи диска, показанная на рисунке 3a, уменьшается из-за удаления жидкости из граница отсасыванием (S > 0). Приращение параметра массообмена и величины Параметр сжатия затем улучшает температурный профиль, как показано на рисунке 3d.



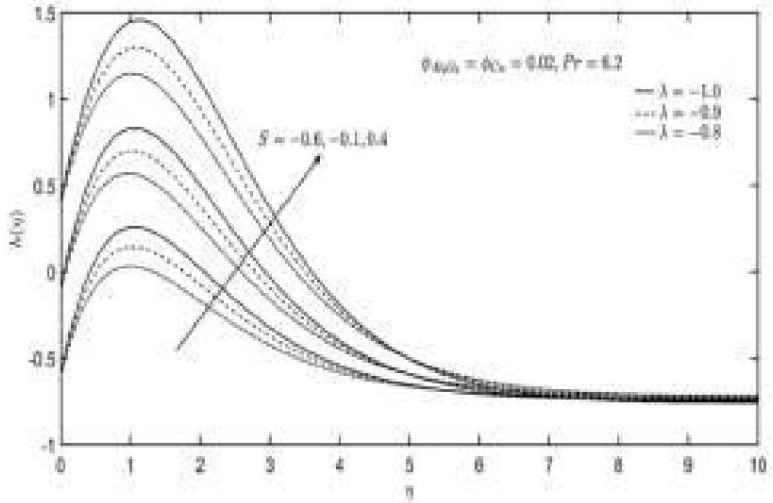
(a)

Рисунок 3. Продолжение.

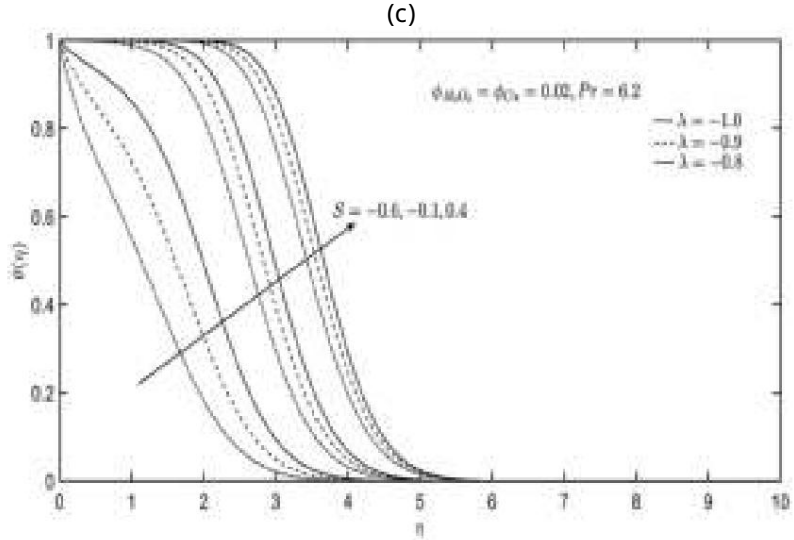
Machine Translated by Google



(б)



(с)



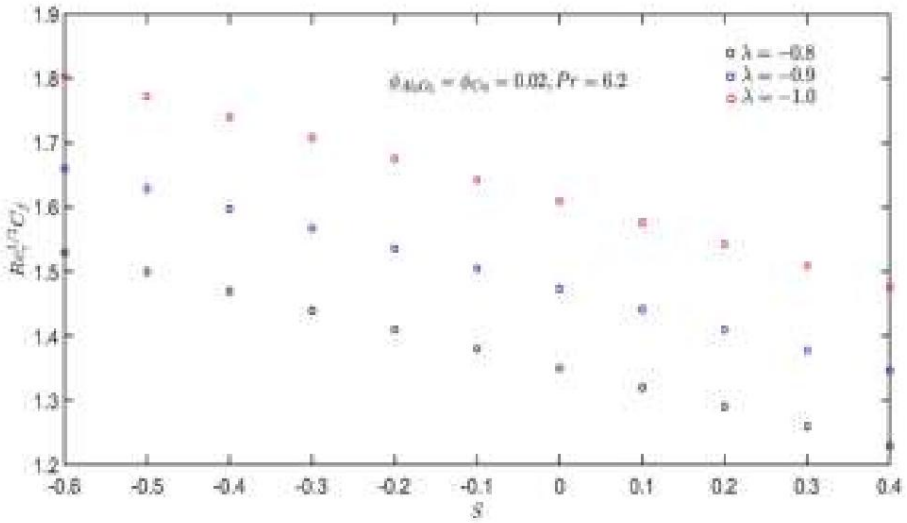
(г)

Рис. 3. Профили радиальной скорости (а), тангенциальной скорости (б), осевой скорости (в) и температуры(г) с различными значениями λ и S.

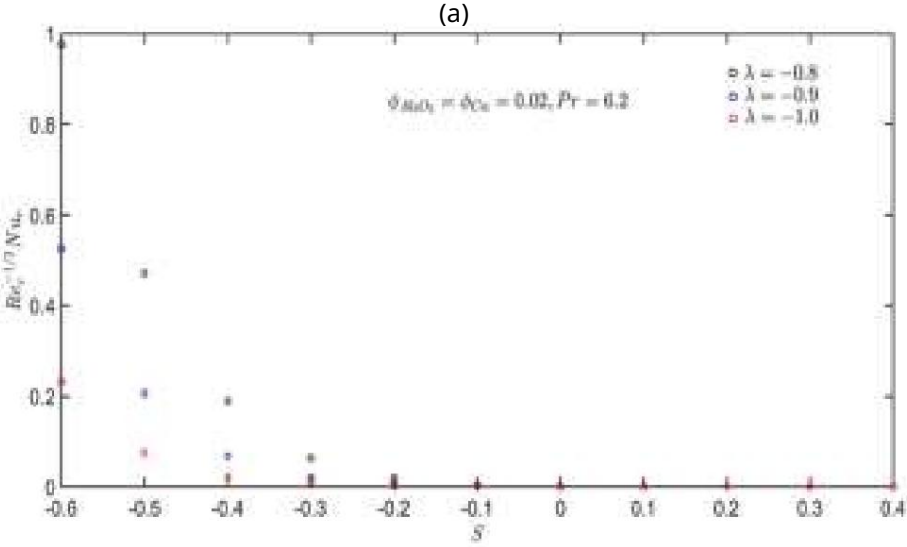
Далее рассмотрено влияние параметров усадки и массообмена на локальное трение кожи. коэффициент и число Нуссельта показаны на рисунке 4. Увеличение массы Обнаружено, что параметр переноса снижает локальный коэффициент поверхностного трения и число Нуссельта.

Machine Translated by Google

на рисунках 4a, б соответственно. При этом прирост в величине сокращения
Параметр повышает локальный коэффициент поверхностного трения, как показано на рисунке 4a. Таким образом, стена
Касательное напряжение возрастает с увеличением величины параметра усадки. В отличие,
локальное число Нуссельта убывает как |λ | увеличивается. Наблюдаемое поведение может быть связано
к уменьшению площади поверхности, доступной для теплопередачи. Следовательно, это вызывает жар
скорость передачи между диском и гибридной наножидкостью уменьшится. Более того, можно отметить
что значения местного коэффициента кожного трения и числа Нуссельта для инъекции
случае (S < 0) выше, чем в случае всасывания (S > 0).



(а)



(б)

Рис. 4. Профили локального коэффициента поверхностного трения (а) и локального числа Нуссельта (б) при различных значениях λ и S.

Между тем, взаимодействующее воздействие параметров усадки и массообмена на интересующие физические величины анализируются с использованием RSM в Minitab. Корреляции между независимыми параметрами и откликами определяются следующим образом:

$$\text{Ответ } 1 = c0 + c1A + c2B + c11AA + c22BB + c12AB, \quad (16)$$

$$\text{Ответ } 2 = c0 + c1A + c2B + c11AA + c22BB + c12AB. \quad (17)$$

Значимость каждого члена в уравнениях (16) и (17) определяется через дисперсионный анализ (ANOVA). Результаты представлены в таблицах 4 и 5.

Machine Translated by Google

Таблица 4. Дисперсионный анализ для ответа 1.

Источник	ДФ	Прил. СС	КоррекцияMS	F-значение	p-значение
Модель	5	0,249759313	0,049951863	174774.611709837	0,000000000
Линейный	2	0,249435660	0,124717830	436370.320105496	0,000000000
А	1	0,101927475	0,101927475	356630.043436460	0,000000000
Б	1	0,147508184	0,147508184	516110.596774533	0,000000000
Квадрат	2	0,000126277	0,000063139	220.913397825	0,000000474
АА	1	0,000124396	0,000124396	435.243856915	0,000000146
ББ	1	0,000008884	0,000008884	31.084684334	0,000837291
2-сторонний Взаимодействие	1	0,000197376	0,000197376	690.591542539	0,000000030
АБ	1	0,000197376	0,000197376	690.591542539	0,000000030
Ошибка	7	0,000002001	0,000000286		
Непригодность	3	0,000002001	0,000000667	*	*
Чистая ошибка	4	0,000000000	0,000000000		
Общий	12	0,249761314			

Символ * означает, что значение слишком мало.

Таблица 5. Дисперсионный анализ для ответа 2.

Источник	ДФ	Прил. СС	КоррекцияMS	F-значение	p-значение
Модель	5	1.000087703	0,200017541	29,206710770	0,000150454
Линейный	2	0.594033446	0,297016723	43,370603881	0,000113785
А	1	0,093304904	0,093304904	13,624451749	0,007745032
Б	1	0,500728543	0,500728543	73,116756012	0,000059439
Квадрат	2	0,267850314	0,133925157	19,555851501	0,001363026
АА	1	0,001069278	0,001069278	0,156136818	0,704502971
ББ	1	0,216321666	0,216321666	31,587451304	0,000798846
2-сторонний Взаимодействие	1	0,138203943	0,138203943	20,180643085	0,002824322
АБ	1	0,138203943	0,138203943	20,180643085	0,002824322
Ошибка	7	0,047938393	0,006848342		
Непригодность	3	0,047938393	0,015979464	*	*
Чистая ошибка	4	0,000000000	0,000000000		
Общий	12	1.048026096			

Символ * означает, что значение слишком мало.

Символ * означает, что значение слишком мало.

По данным Альх адри и др. [35], термин является статистически значимым, если его p-значение меньше чем 0,05. Судя по таблицам 4 и 5, все члены значимы для корреляции (16), тогда как член AA можно исключить из корреляции (17), поскольку его значение p больше 0,05. После исключая незначимый член, для ответа 2 выполняется второй дисперсионный анализ. Затем получены следующие новые соотношения, содержащие только значимые члены:

$$\text{Ответ } 1 = 1{,}50443 - 0{,}130338A - 0{,}156795B + 0{,}006711AA - 0{,}001794BB + 0{,}007025AB, \quad (18)$$

$$\text{Ответ } 2 = 0{,}0015 + 0{,}1247A - 0{,}2889B + 0{,}2874BB - 0{,}1859AB. \quad (19)$$

На основании уравнений (18) и (19) видно, что член B имеет отрицательную корреляцию. с Реакцией 1 и Реакцией 2. Следовательно, приращение параметра массообмена оказывает неблагоприятное влияние на локальный коэффициент трения кожи и число Нуссельта. Эти Результаты согласуются с результатами, полученными на рисунке 4.

Тогда интерактивное воздействие между параметрами усадки и массообмена может анализироваться с помощью поверхностных и контурных графиков, показанных на рисунках 5 и 6. На основе на рисунке 5 увеличение A и B снижает ответ 1. Более высокий и средний уровни Параметр усадки (A) и параметр массообмена (B) приводят к низким значения $Re_{1/2}$ C_f (Ответ 1). Максимальное $Re_{1/2}$ C_f (Реакция 1) наблюдается на низких уровнях

Machine Translated by Google

этих независимых параметров. Между тем, рисунок 6 показывает, что более низкие уровни параметр массообмена (B) и более высокие уровни параметра усадки (A) производят высокие значения $Re_{p,1/2}$ и Nu_p (Ответ 2). Однако при умеренном уровне массообмена параметра (B), приращение параметра сжатия(A) не оказывает существенного влияния на $Re_{p,1/2}$ и Nu_p (Ответ 2).

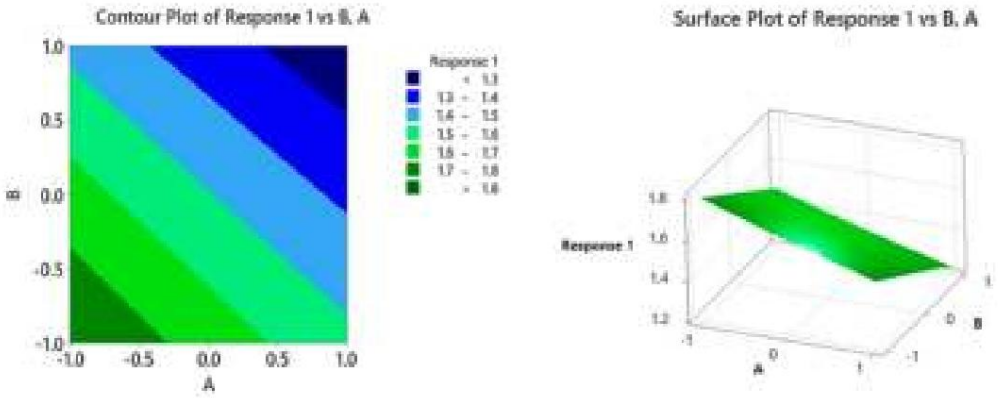


Рисунок 5. Контурные и поверхностные графики для ответа 1.

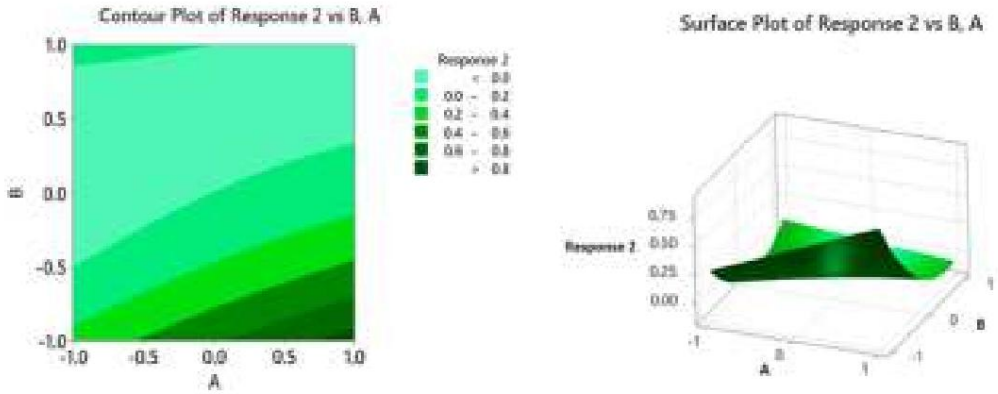


Рисунок 6. Контурные и поверхностные графики для ответа 2.

Далее проводится оптимизация для минимизации и максимизации локального трения кожи. коэффициент и число Нуссельта соответственно. Коэффициент локального трения кожи связан с напряжение сдвига стены. Низкий коэффициент поверхностного трения призван снизить потребление энергии. в большинстве приложений. При этом высокая скорость теплопередачи, представленная местным Нуссельтом Это число желательно для улучшения характеристик теплопередачи в процессах охлаждения или нагрева. Комбинированная желательность оценивает, как конфигурации независимых параметров оптимизировать заданный набор ответов. Желательность измеряется по шкале от нуля до единицы Нулевое значение означает, что один или несколько ответов превышают допустимые пределы, тогда как значение единицы представляет собой оптимальный сценарий. Таким образом, в настоящем расследовании Оптимизацию можно наблюдать, исследуя составную желательность.

В таблице 6 представлены результаты оптимизации локального коэффициента поверхностного трения и Нуссельта. число. Минимальный локальный коэффициент трения кожи (Ответ 1) и максимальный локальный коэффициент трения Число Нуссельта (Реакция 2) можно получить, установив параметр сжатия (A) и параметр массообмена (B) на высоком и низком уровнях соответственно. При желательности 66% при $\lambda = 0{,}8$ и $S = 0{,}8$, локальный коэффициент поверхностного трения минимизируется при значении 1,528780016, в то время как локальное число Нуссельта максимально на уровне 0,888353037. Следовательно, наименьшая величина параметра усадки и наименьшего параметра массообмена оптимизировались физические количества, представляющие интерес в текущей задаче потока. Различное поведение может наблюдаться для другие параметры управления и диапазоны условий потока.

Machine Translated by Google

Таблица 6. Оптимизация ответов.

Решение	А	Б	Ответ 2	Ответ 1	Композитный желательность
1	1	1	0,888353037	1.528780016	0,659986551

5. Выводы

В настоящем исследовании анализируется течение вращающегося диска гибридной наножидкости. Считается, что диск сжимается в радиальном направлении и является проницаемым для обеспечения всасывания/инжекции. Локальный коэффициент поверхностного трения и число Нуссельта для этой задачи потока оптимизируются с использованием RSM. Сначала представляются и решаются основные уравнения задачи потока, состоящие из дифференциальных уравнений и граничных условий, с использованием решателя bvp4c в MATLAB. Затем для выполнения RSM используется программное обеспечение Minitab 21. Результаты представлены следующим образом:

1. С увеличением параметра массообмена и величины параметра сжатия ($|\lambda|$) профиль лучевой скорости гибридной наножидкости вблизи диска уменьшается.
2. Увеличение параметра массообмена и величины параметра усадки улучшает профили тангенциальной скорости, осевой скорости и температуры.
3. Коэффициент локального поверхностного трения и число Нуссельта уменьшаются с увеличением параметра массообмена. Случай впрыска демонстрирует более высокие значения этих интересующих физических величин, чем случай всасывания.
4. Увеличение величины параметра сжатия улучшает местный скин. коэффициент трения и уменьшает локальное число Нуссельта.
5. По данным RSM низкие значения $Re_{1/2}\, r C_f$ производятся при более высоких и средних уровнях параметра усадки (λ) и параметра массообмена. При этом наибольшее значение $Re_{1/2}\, r C_f$ наблюдается при низких уровнях этих независимых параметров.
6. Высокие значения $Re_{1/2}\, Nu_r$ возникают при более низких уровнях параметра массообмена и выше уровня параметра сжатия.
   На локальное число Нуссельта увеличение параметра усадки при умеренном уровне параметра массообмена существенно не влияет.
7. При желательности 66% локальный коэффициент поверхностного трения минимизируется при 1,528780016, а локальное число Нуссельта максимизируется при 0,888353037 при $\lambda = 0{,}8$ и $S = 0{,}6$.

Настоящее исследование может быть распространено на другие типы гибридных наножидкостей, такие как неньютоновские гибридные наножидкости, гибридные наножидкости из углеродных нанотрубок и тройные гибридные наножидкости. Кроме того, сложное нелинейное взаимодействие различных управляющих параметров в этой задаче о потоке можно дополнительно проанализировать с помощью сложной техники машинного обучения, известной как искусственная нейронная сеть (ИНС).

Дополнительные материалы: следующую вспомогательную информацию можно скачать по адресу: https://www.mdpi.com/article/10.3390/computation12070141/s1.

Вклад автора: Концептуализация, ИС; методология, ИП и РИЯ; валидация, IP и NMA; формальный анализ, РИЯ; письменное – подготовка оригинального проекта, РИЯ и ИП; написание-обзор и редактирование, HMA и ИП; надзор, NMA, FMA и SSPMI; приобретение финансирова
Все авторы прочитали и согласились с опубликованной версией рукописи.

Финансирование: Исследование финансировалось Университетом Путра Малайзии, номер гранта GP-GPB 9711400.

Заявление о доступности данных: оригинальные материалы, представленные в исследовании, включены в статью/Дополнительные материалы, дальнейшие запросы можно направить соответствующему автору/ам.

Конфликты интересов: Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов. Спонсоры не играли никакой роли в разработке исследования; при сборе, анализе или интерпретации данных; в написании рукописи; или в решении опубликовать результаты.

Machine Translated by Google

Ссылки

1. Гамачу, Д.; Ибрагим, В. Смешанное конвекционное течение вязкоупругой гибридной наножидкости Ag-Al2O3/вода мимо вращающегося диска. Физ. Скр. 2021, 96, 125205. [CrossRef]
2. Карман, TV Über Laminare Und Turbulente Reibung. ZAMM J. Appl. Математика. Мех. З. Энджью. Математика. Мех. 1921, 1, 233–252. [Перекрестная ссылка]
3. Аяно, МС.; Огегбай, О.; Матхунджва, Дж. С. Численное моделирование потока наножидкости за счет растягивающегося/вращающегося диска. Теор. Прил. Мех. 2023, 50, 55–72. [Перекрестная ссылка]
4. Шарма, К.; Виджай, Н.; Бхардвадж, Д.; Джиндал, Р. Поток воды, переносящий наночастицы Fe3O4 и Mn-ZnFe2O4 по вращающемуся диску: значение термофореза и броуновского движения. Дж. Магн. Магн. Матер. 2023, 574, 170710. [CrossRef]
5. Пунит, В.; Али, ЭХ; Поп, И. Наножидкость, текущая по вращающемуся диску, который растягивается/является проницаемым: нестационарная модель. Межд. Дж. Мод. Физ. Б 2023, 37, 23502491. [CrossRef]
6. Рашид А.; Давар, А.; Аяз, М; Ислам, С.; Галал, АМ; Гул, Х. Гомотопное решение химически реактивного магнитогидродинамического потока гибридной наножидкости над вращающимся диском с броуновским движением и эффектами термофореза. ЗАММЗ. Ангью. Математика. Мех. 2023, 103, e202200262. [Перекрестная ссылка]
7. Алкухайли, Н.А. Анализ теплопередачи потока гибридной наножидкости на вращающемся диске с учетом эффектов теплового излучения. Корпус Стад. Терм. англ. 2023, 49, 103131. [CrossRef]
8. Кумар, П.; Пуния, Х.; Арикара, С.; Сабу, А.С.; Мэтью, А.; Али, Л. Значение нерегулярного источника тепла и энергии Аррениуса в потоке электромагнитогидродинамической гибридной наножидкости над вращающимся/растягивающимся диском с нелинейным излучением. Число. Нагревать. Трансф. Приложение. 2024, 85, 1866–1888. [Перекрестная ссылка]
9. Кулкарни, М Течение смешанной конвективной намагниченной гибридной наножидкости GO-MoS2/H2O вокруг проницаемого вращающегося диска. Азиатско-Тихоокеанский регион. Дж. Х им. англ. 2023, 18, e2923. [Перекрестная ссылка]
10. Лоун, Южная Каролина; Анвар, С.; Райза, З.; Альмусава, штат Миссури; Саид, А. Теоретическое исследование течения МГД-гибридной наножидкости на водной основе над конвективно нагретой поверхностью вращающегося диска с проскальзыванием скорости и в условиях нулевого потока массы. Евро. Физ. Дж. Плюс 2023, 138, 1–14. [Перекрестная ссылка]
11. Хашиее, Н.С.; Вайни, И.; Зайнал, Н.А.; Хамза, К.; Арифин, Нью-Мексико; Поп, И. Множественные решения и анализ устойчивости потока магнитной гибридной наножидкости над вращающимся диском с выделением тепла. Дж. Адв. Рез. Жидкость. Мех. Терм. наук. 2023, 102, 59–72. [Перекрестная ссылка]
12. Виджай, Н.; Шарма, К. Магнитогидродинамическое течение гибридной наножидкости над замедляющимся/вращающимся диском с Соре и Дюфуром Эффекты. Многопрофильный. Модель. Матер. Структура. 2023, 19, 253–276. [Перекрестная ссылка]
13. Абу Бакар, С.; Поп, И.; Доктор Арифин, Н. Нестационарный поток гибридной наножидкости по проницаемому сжимающемуся/наклонному вращающемуся диску с эффектами радиации и скольжения по скорости. Нейронный компьютер. Прил. 2024, 36, 11525–11544. [Перекрестная ссылка]
14. Али, Ф.; Заиб, А.; Хан, Мичиган; Альзах рани, Ф.; Элдин, С.М Анализ необратимости течения в критической точке тригибридной наножидкости над вращающимся диском; Применение кинетической энергии. Дж. Индиан. х им. Соц. 2023, 100, 100873. [CrossRef]
15. Сингх, СП; Кумар, М; Ясин, М; Рават, С.К. Тройная гибридная наножидкость (TiO2-SiO2-MoS2/керосиновое масло) Течение над вращающимся диском с квадратичным тепловым излучением и моделью Каттанео-Кристова. Дж. Цент. С. унив. 2023, 30, 1262–1278. [Перекрестная ссылка]
16. Паттгири, Б.; Пол, А. Исследование вязкоупругого потока тетрагибридной наножидкости Ag+Cu+Fe3O4+Al2O3/керосинового масла через Растяжимый вращающийся диск с экспоненциально изменяющейся вязкостью. Университет Дж. Тайбы наук. 2024, 18, 2336327.
17. Али И.; Гюль, Т.; Хан, А. Нестационарный гидромагнитный поток над наклонным вращающимся диском с помощью подхода нейронных сетей. Математика 2023, 11, 1893. [CrossRef]
18. Варун Кумар, RS; Кумар, Р.Н.; Бен Ахмед, С.; Мадху, Дж; Верма, А.; Пунит Гауда, Р. Дж. Нестационарный поток тройной наножидкости по медленно вращающемуся диску, подверженному равномерному всасыванию и нейронной сети с обратным распространением ошибки. Число. Теплопередача. Часть Б Фундамент. 2023, 1–21. [Перекрестная ссылка]
19. Мехмуд, Т.; Рамзан, М; Ховари, Ф.; Кадри, С.; Чу, ЮМ Применение методологии поверхности отклика при потоке наножидкости по вращающемуся диску с автокаталитической химической реакцией и оптимизацией генерации энтропии. наук. Отчет 2021, 11, 4021. [Перекрестная ссылка]
20. Шафик А.; Синдху, Теннесси; Аль-Мдаллал, К.М Исследование чувствительности значения углеродных нанотрубок в потоке Дарси-Форхеймера к вращающемуся диску с использованием методологии поверхности отклика. наук. Отчет 2021, 11, 8812. [CrossRef]
21. Мэтью А.; Арикара, С.; Сабу, А.С. Значение магнитного поля и эффектов стратификации на биоконвективное течение ферронаножидкости в точке застоя над вращающимся/растягивающимся диском: методология четырехфакторной реакции поверхности. Дж. Индийская ким. Соц. 2022, 99, 100615. [CrossRef]
22. Хусейн, С.; Али, А.; Рашид, К.; Паша А.А.; Алгарни, С.; Альках тани, Т.; Иршад, К. Применение методологии поверхности отклика для оптимизации потока МГД-наножидкости над вращающимся диском с помощью теплового излучения и джоулева нагрева. Корпус Стад. Терм. англ. 2023, 52, 103715. [CrossRef]
23. Хашиее, Н.С.; Вайни, И.; Хамза, КБ; Мухтар, МФ; Касим, Армия; Арифин, Нью-Мексико; Поп, И. Численное решение и статистический анализ нестационарного течения гибридной феррожидкости с тепловыделением под действием вращающегося диска. ZAMM J. Appl. Математика. Мех. З. Энджью. Математика. Мех. 2023, 103, e202200384. [Перекрестная ссылка]
24. Сиддики, Франция; Цо, СУ; Чан, КЦ; Фу, Южная Каролина; Чао, СУН О компромиссе между стабильностью дисперсии и тепловым переносом гибридной наножидкости Cu-Al2O3 для различных соотношений смешивания. Межд. Дж. Тепломассообмен. 2019, 132, 1200–1216. [Перекрестная ссылка]

Machine Translated by Google

25. Такаби, Б.; Гейтаги, АМ; Тазраи, П. Гибридная водная суспензия наночастиц Al2O3 и Cu при ламинарной конвекции
Эффективность. Дж. Термофиз. Тепло Транс. 2016, 30, 523–532. [Перекрестная ссылка]
26. Овтоп, Х Ф; Абу-Нада, Э. Численное исследование естественной конвекции в частично отапливаемых прямоугольных помещениях, заполненных
Наножидкости. Межд. J. Поток тепловой жидкости 2008, 29, 1326–1336. [Перекрестная ссылка]
27. СурешС.; Венкитарадж, КП; Сельвакумар, П.; Чандрасекар, М Синтез гибридных наножидкостей Al2O3 -Cu/вода с использованием двухстадийного метода и его термофизические
свойства. Коллоиды Прибой. Физикох им. англ. Асп. 2011, 388, 41–48. [Перекрестная ссылка]
28. Туркылмазоглу, М Течение наножидкости и теплопередача за счет вращающегося диска. Вычислить. Жидкости 2014, 94, 139–146. [Перекрестная ссылка]
29. Инь, К.; Чжоу, Л.; Чжан, К.; Чжан Х. Течение и теплопередача наножидкостей по вращающемуся диску с равномерной скоростью растяжения
в радиальном направлении. Пропульс. Мощность Рез. 2017, 6, 25–30. [Перекрестная ссылка]
30. Коробка, ГЭП; Уилсон, К.Б. Об экспериментальном достижении оптимальных условий. JR Стат. Соц. Сер. Б (Метод.) 1951, 13, 1–38.
[Перекрестная ссылка]
31. Махантеш, Б.; Тривени, К.; Рана, П.; Мухаммад, Т. Радиационная теплопередача наноматериала на круглой трубке с конвективным нагревом
с энергией активации и кинематическими эффектами агрегации наночастиц. Межд. Коммун. Тепломассообмен.
2021, 127, 105568. [CrossRef]
32. Бхаттачарья, С. Центральный композитный дизайн для методологии реагирующей поверхности и ее применение в фармации. В ответ
Методология поверхности в инженерных науках; IntechOpen: Лондон, Великобритания, 2021 г.
33. Сахоу, П.; Барман Т.К. АНН Моделирование фрактальной размерности в механической обработке. В области механроники и машиностроения;
Издательство Woodhead: Кембридж, Великобритания, 2012 г.
34. Рашиди, ММ; Абельман, С.; Мехр, Генерация энтропии НФ в стационарном МГД-течении за счет вращающегося пористого диска в наножидкости.
Межд. J. Тепломассообмен. 2013, 62, 515–525. [Перекрестная ссылка]
35. Альхадри, М; Раза, Дж; Яшкун, КЮ; Лунд, Луизиана; Маатки, К.; Хан, СУ; Колси, Л. Методология поверхности отклика (RSM) и моделирование искусственных нейронных сетей (ANN)
для теплового потока потока гибридной наножидкости с эффектами Дарси-Форхгеймера.
Дж. Индийская им. Соц. 2022, 99, 100607. [CrossRef]

Отказ от ответственности/Примечание издателя: Заявления, мнения и данные, содержащиеся во всех публикациях, принадлежат исключительно отдельному автору(ам) и соавторам(ам),
а не MDPI и/или редактору(ам). MDPI и/или редактор(ы) не несут ответственности за любой вред людям или имуществу, возникший в результате любых идей, методов, инструкций
или продуктов, упомянутых в контенте.

Machine Translated by Google

вычисление

MDPI

Обзор

Системная инженерия на основе вычислительной гидродинамики для наземной астрономии

Константинос Вогиатис 1,2,*, Джордж Анджели [1], Гелис Транчо [2] и Род Конан [2]

1 Организация гигантского Магелланова телескопа, Пасадена, Калифорния 91101, США; gyangeli@gmail.com (Джорджия); rconan@gmto.org (RC)
2 Международная обсерватория ТМТ, Пасадена, Калифорния 91124, США; gtrancho@tmt.org *
Адрес для переписки: konvoyages@gmail.com

Аннотация: В этой статье представлены современные методы, используемые в аэротермическом моделировании для решения текущих задач проектирования обсерваторий, особенно проблем следующего поколения через вычислительно больших телескопов (ELT), таких как Европейский ELT, Международная обсерватория Тридцатиметрового телескопа (ТИО) и Гигантский Магеллановый телескоп (GMT). В нем рассматриваются различные методы аэротермического моделирования, синергия между результатами моделирования и интеграционным моделированием обсерваторий, а также недавние применения. Представленный набор аэротермического моделирования включает модели тепловых сетей, модели вычислительной гидродинамики (CFD), твердотельные тепловые модели и модели деформации, а также модели сопряженной теплопередачи (параллельное моделирование жидкости и твердого тела). Аэротермический комплекс является частью общей системы интегрированного моделирования (IM) обсерватории, которая также включает в себя оптику, динам
Выходные данные системы IM, номинальной метрики качества изображения (IQ) для конкретного состояния телескопа, передаются в стохастическую структуру в виде многомерного массива, который охватывает диапазон влияющих на эксплуатационные параметры, тем самым обеспечивая статистическое представление производительности обсерватории. - Манс. Область применения этой структуры варьируется от выбора площадки, определения характеристик наземного слоя и разработки площадки до наилучшей текущей оценки и оптимизации работы обсерваторий, проектирования активного теплового контроля, структурного анализа и ряда торговых исследований экономической эффективности. Наконец, в этой статье рассматриваются запланированные улучшения, развитие новых идей, решение новых задач, а также то, как все это связано с инициативой «Вычислительная гидродинамика – Видение 2030».

Ключевые слова: вычислительная гидродинамика; аэротермическое моделирование; системная инженерия; наземные телескопы

check for updates

Цитирование: Вогиатис, К.; Анджели, Г.; Транчо, Г.; Конан, Р. Разработка системна основе вычислительной гидродинамики для наземной астрономии. Вычисление 2024, 12, 143. https://doi.org/10.3390/Computation12070143.

Академический редактор: Димитриос Кубоянис

Поступила: 10 июня 2024 г.
Пересмотрено: 29 июня 2024 г.
Принято: 3 июля 2024 г.
Опубликовано: 11 июля 2024 г.

Копирайт: © 2024 авторов. Лицензиат MDPI, Базель, Швейцария. Эта статья находится в открытом доступе. распространяется на условиях и условиях Creative Commons Лицензия с указанием авторства (CC BY) (https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

1. Введение

Значительная часть (около трети) общих аберраций изображения наземных оптических обсерваторий имеет аэротермические причины, большая часть которых связана с тепловым зрением (~80%), ветровым джиттером и термическими деформациями конструкции и оптики телескопа. Эти аберрации также несут наибольшую неопределенность из-за своей случайной природы. За прошедшие годы были разработаны и реализованы различные эмпирические стратегии аэродинамического и термического управления, а также стратегии эксплуатации. Однако в последние два десятилетия оптимизация конфигурации и работы этих инструментов осуществляется путем моделирования взаимодействия горы с обсерваторией и взаимодействия внутренней части ограждения с конструкцией и опт

В этой статье мы представляем современные методы, используемые в аэротермическом моделировании для решения текущих проблем проектирования обсерваторий, особенно проблем следующего поколения ELT (через вычислительно больших телескопов). Это также аббревиатура первой из них, строящейся в настоящее время в Чили Европейской южной обсерваторией (ESO), с диаметром главного зеркала ~39 м [1]. Во избежание путаницы его часто называют E-ELT (Европейский ELT или ESO ELT). По другую сторону Атлантики существуют два таких проекта: Гигантский Магеллановый телескоп (GMT) [2] и Международная обсерватория Тридцатиметрового телескопа (TIO) [3]. Два телескопа с диаметром главного зеркала ~25 м и ~30 м в

Machine Translated by Google

запланированные для южного и северного полушарий соответственно, могут предоставить разнообразные исследовательские возможности и сделать возможным решающие прорывы практически во всех областях астрофизики от нашей Солнечной системы до самых далеких звезд и галактик, от фундаментальной физики и космологии до поиска доказательств жизни на планете. планеты вокруг других звезд.

Последние применения аэротермического моделирования варьируются от выбора площадки, определениях арактеристик приземного слоя и разработки площадки до оптимизации аэротермического проекта обсерватории, проектирования теплового контроля, структурного анализа и ряда исследований экономической эффективности . Будет представлен обзор типов аэротермических моделей, используемых TIO и GMT . Эти модели применимы ко всем оптическим обсерваториям, включая солнечные, а некоторые их аспекты — даже к радиотелескопам. Последует синергия между результатами моделирования (такими как поверхностное давление, интегрированные силы, моменты, температурные поля и коэффициенты теплопередачи) и обсерваторским интеграционным моделированием (IM). Наконец, будут рассмотрены запланированные улучшения, разработка новых идей, решение новых задач и то, как все это связано с «Видением вычислительной гидродинамики до 2030 года».

2. Синергия комплексного моделирования

2.1. Показатели производительности и проверка требований

В проектах ELT установлены ключевые параметры производительности (KPP) для измерения, отслеживания и управления развитием ожидаемых характеристик обсерватории посредством строительства и ввода в эксплуатацию .

Общие основополагающие документы начинаются с Документа с требованиями к эксплуатации (для TIO) или Концепции операций (для GMT) и Документа с научными требованиями (SRD) (все уровня 1), которые основаны на заранее определенных научных примерах . Требования SRD затем передаются в Документ с требованиями наблюдателя (ORD; уровень 2), который является ответом проекта на SRD и содержит технические требования, устанавливающие основу для строительного проекта. Требования в ORD указаны в инженерных единицах , которые можно измерить и проверить на этапе сборки, интеграции, проверки и ввода в эксплуатацию (AIVC) проекта.

КПП определены в ORD и представляют собой инженерные требования, которые оказали бы наиболее существенное влияние на науку, если бы они не были выполнены. Многие из KPP уровня 2 связаны с несколькими научными требованиями. Каждое требование уровня 2 также имеет связанный с ним бюджет производительности в документе об архитектуре обсерватории уровня 3 (OAD).
На рисунке 1 показан текущий анализ наилучшей оценки (CBE): распределения из бюджетов ошибок, включая бюджеты KPP, передаются в инженерных единицах в документы с требованиями к подсистеме уровня 4.



Рисунок 1. Цикл соответствия и анализа CBE.

2.2. Интегрированная среда моделирования

Интегрированная модель представляет собой единую вычислительную структуру, которая объединяет подмножества специализированных моделей, которые представляют собой детальное числовое представление конкретных свойств и функций ELT [4,5]. Это комбинация нескольких физических моделей, частью которых являются также аэротермические модели, и распределенной системы управления, которая объединяет датчики и исполнительные механизмы, имитируемые различными моделями. Экземпляр IM — это симуляция во временной области , настроенная с набором параметров, представляющих проектную спецификацию телескопа. Кроме того,

Machine Translated by Google

модели возмущений окружающей среды обеспечивают внешние граничные условия для физических моделей. Примерами внешних возмущений являются атмосфера и местные наблюдения, силы ветра, источники тепла и т. д. Возмущения окружающей среды носят стохастический характер, и для каждого экземпляра модели рисуется одно случайное возникновение возмущений. Отсюда следует, что оптические характеристики также являются стохастическими, и характеристики конструкции телескопа устанавливаются на основе статистических моментов метрики оптических характеристик (в данном случае KPP). Таким образом, целью IM является оценка условий бюджета ошибок уровня 3 и KPP уровня 2.

Каждая симуляция IM генерирует выходные данные (значение KPP), которые действительны для определенного набора значений возмущений, называемого состоянием системы. Каждое возмущение (или влияющий параметр) дискретизируется несколькими значениями, охватывающими его ожидаемый диапазон. Чтобы охватить весь рабочий диапазон, моделирование необходимо повторить для другой комбинации значений возмущений. Таким образом генерируется многомерный массив значений KPP или справочные таблицы (LUT).

2.3. Стохастическая основа

Систему обсерваторий можно рассматривать как случайный процесс; ее поведение недетерминировано, поскольку последующее состояние системы определяется как предсказуемыми действиями, так и случайными элементами. Следовательно, любая метрика, описывающая производительность системы, является статистической переменной. Хотя некоторые аспекты производительности можно предсказать детерминистически, учитывая набор входных данных, сами эти входные данные обычно носят статистический характер [6,7].

Широкий спектр несовершенств и внешних возмущений действительно случайен во времени или в результате реализации. Например, оптические эффекты термических деформаций оптических элементов и их опорной конструкции могут быть детерминированно рассчитаны. Исходными данными для расчета термической деформации являются случайные параметры окружающей среды и эксплуатационные параметры. Обычный ответ на эту сложность — интуитивно определить «репрезентативный» и «наихудший» сценарии, а затем рассчитать «среднюю» и «предельную» производительность.

Чтобы лучше понять ситуацию, мы разработали стохастическую структуру для определения и оценки производительности. Она основана на данных полевых испытаний, собранных в рамках проектов на площадках обсерваторий Мауна-Кеа и Лас-Кампанас, а также на истории последовательностей операций обсерваторий Джемини-Норт и Магеллан [8,9]. Характеристики ELT выражаются и оцениваются по сравнению с реальной программой наблюдений, выполняемой в той же среде, в которой он должен быть создан.

Нецелесообразно использовать единую унифицированную модель для всех временных интервалов, связанных с производительностью ELT, от миллисекунд до лет. Поэтому наш подход состоит в том, чтобы разделить физические процессы на отдельные математические модели, которые можно исследовать независимо. Используя метрику нормализованной чувствительности точечного источника (PSSn) [10–12] в качестве примера KPP, отдельные результаты можно объединить с оценками на уровне системы. Существуют отмеченные исключения из этого подхода. В некоторых случаях временные рамки связанных процессов перекрываются в достаточной степени, чтобы оправдать разработку интегрированных моделей. Частный случай касается ветра, структурной динамики телескопа и динамики управления. Для ЭЛТ это тщательно исследуется, включая влияние ветра на главное зеркало и тесное взаимодействие между органом управления и конструкцией. Аналогичным образом, дрожание изображения из-за вибраций телескопа напрямую рассматривается при моделировании адаптивной оптики. В более длительных временных рамках процессы в твердых телах (стекло и сталь) и аэротермические процессы тесно связаны. Решение этой проблемы требует итераций между моделями CFD и FEA или разработки моделей сопряженной теплопередачи с высоким разрешением.

Сущность структуры производительности изображена на рисунке 2. Группа A (красная) обозначает доступные входные данные. Группа B (синяя) — это то, чем можно управлять с помощью конструкции и эксплуатации. Группа C (коричневая) показывает выходные данные разработанной интегрированной структуры моделирования с предварительно рассчитанными аберрациями в форме LUT (блок оптики/управления/динамики/CFD/FEA на самом деле является интегрированной структурой моделирования). Наконец, функции в группе D (зеленые) соответствуют математической/статистической обработке и фактически являются ядром моделирования во временной области.

Machine Translated by Google

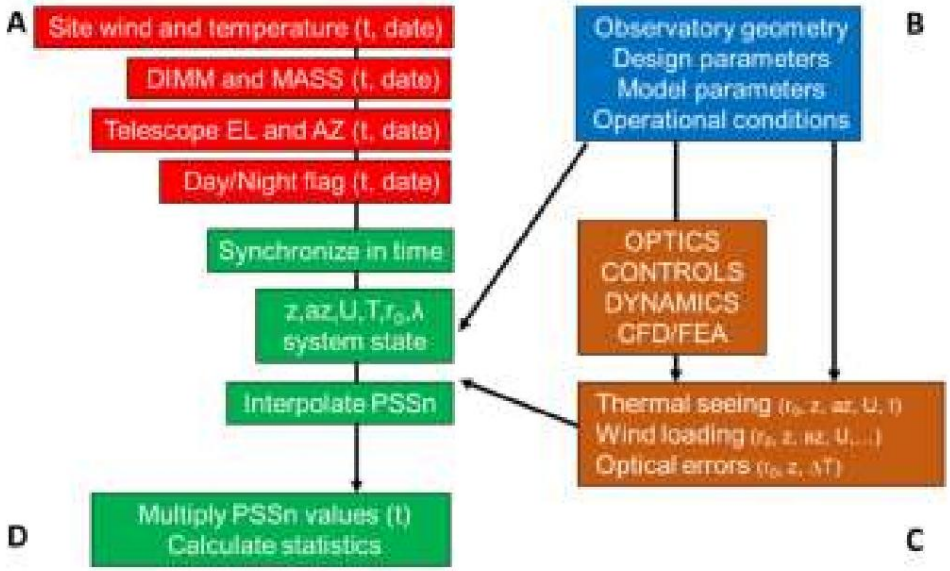


Рисунок 2. Блок-схема стохастической модели. (A) входные данные окружающей среды, (B) контролируемые параметры, (C) результаты комплексного моделирования, (D) объединение данных и статистика.

Преимущества этой структуры суммированы ниже:

- Позволяет статистическое представление ошибок, которые рандомизированы в зависимости от условий окружающей среды и эксплуатации;
- Позволяет статистическое представление ошибок, которые зависят от предыдущих временных состояний системы;
- Позволяет комбинированное представление ошибок, которые коррелируют и не могут быть оценены независимо;
- Позволяет комбинированное представление ошибок, имеющих несопоставимые временные и пространственные масштабы;
- Обеспечивает распределение вероятностей ошибок для обозначения диапазона ожидаемых характеристик при различных условиях наблюдения; эти знания особенно полезны при наблюдении за очередью;
- Позволяет исследовать поведение обсерваторий на различных объектах-кандидатах;
- Позволяет оптимизировать определенные рабочие стратегии, такие как вентиляция, дневное время термическая обработка и частота калибровочных измерений;
- Раскрывает истинное влияние конкретного проектного решения на ожидаемую производительность обсерватории и последующую научную продуктивность, обеспечивая экономически эффективные компромиссы.

3. Синергия аэротермического моделирования

Управление температурой является ключом к контролю качества изображений обсерватории. В качестве инструментов минимизации теплового воздействия ЭЛТ используют кондиционирование воздуха днем и пассивную вентиляцию и контроль тепловыделения в различных формах (охлаждение подсистемы, правильное расположение источников тепла, покрытия с желаемой излучательной способностью) в ночное время. Излучательная и отражательная способность поверхности корпуса оптимизированы для уменьшения перегрева днем и переохлаждения ночью.

Целесообразно свести к минимуму разницу между температурой телескопа (структуры и оптики) и средней температурой, ожидаемой ночью. Особенно для оптики, учитывая ее постоянную времени, это важно как для уменьшения термической деформации, так и для зеркального видения. Кроме того, будут сведены к минимуму пространственные градиенты температуры, поскольку они являются основной причиной рассогласования телескопа.

С восходом солнца кожух закроется, и воздух, находящийся внутри, начнет нагреваться за счет дневного тепловыделения работающего внутри кожуха оборудования, солнечной радиации и проникновения наружного воздуха. Установки обработки воздуха (AHU) подключаются к чиллерам/сухим охладителям на территории объекта. Сопла AHU подают воздух внутрь кожуха в нескольких местах, а возвраты расположены рядом со смотровой площадкой. Цель состоит в том, чтобы минимизировать вертикальные градиенты температуры, по крайней мере, до высоты телескопа и подд

Machine Translated by Google

окружающую среду при ожидаемой ночной температуре за счет удаления всего внутреннего и внешнего тепла.

В ночное время радиационные потери в небо через проем корпуса компенсируются конвективной передачей тепла через проем корпуса и вентиляционные отверстия, а также теплом, выделяемым во внутренний воздух . Неравномерное пространственное распределение выделяемого тепла может быть особенно вредным для купольного и зеркального зрения. Его влияние смягчается промывкой корпуса окружающим воздухом через вентиляционные отверстия. Однако при более высоких скоростях ветра необходимо ограничить промывку корпуса, чтобы ограничить воздействие ветра на конструкцию телескопа и зеркала. Стратегия вентиляции оптимизирована, чтобы сбалансировать эффекты теплового обзора и воздействия ветра. Ожидается, что вентиляционные отверстия кожуха будут полностью открыты при низких скоростях внешнего ветра, полностью закрыты при высоких скоростях внешнего ветра и частично открыты при средней скорости внешнего ветра.

Отходящее тепло, отведенное из обсерватории, концентрируется в выхлопных шлейфах , выходящих из самой дальней точки здания объекта, которая находится преимущественно в подветренном направлении от телескопа. В ночное время максимальное отклонение температуры шлейфа от окружающей среды ограничено, чтобы любое влияние на видимость в этом направлении было незначительным.

Модели, используемые для моделирования вышеуказанных физических процессов, сгруппированы в три основные категории в зависимости от объема, геометрической точности и времени выполнения работ: • Модели тепловых сетей; • Модели CFD; • Модели сопряженной теплопередачи.

Для разработки инструментов моделирования используются известные коммерческие готовые пакеты программного обеспечения общего назначения. STAR-CCM+ (2210 или новее) [13] используется для разработки трехмерных репрезентативных моделей обсерваторий и подсистем, тогда как одномерные модели тепловых сетей, структуры производительности и постпроцессоры разрабатываются в основном в MATLAB (2020a или новее).) [14] и Python (3.7 или новее).

3.1. Модели тепловых сетей

Это сосредоточенно-массовые или одномерные перехо дные тепловые модели. Они недороги в вычислительном отношении и имеют короткое время выполнения. Их основная цель — оценить температуру поверхности, например, обшивки корпуса, а также других компонентов. Эти температуры используются для поддержки проектирования, проверки требований и в качестве граничных условий для моделей высокой точности. Поскольку это модели тепловой сети, они могут принимать воздух в качестве еще одного узла, а также сообщать о поведении средней температуры в ограниченном объеме воздуха. Истинная польза этих моделей заключается в том, что входные условия окружающей среды и эксплуатации, а также время виртуального моделирования охватывают годы, что позволяет проводить статистический анализ температурных перепадов.

3.2. Вычислительные модели гидродинамики

Это высококачественные трехмерные устойчивые или перехо дные модели. Они требуют больших вычислительных затрат и требуют длительного времени выполнения. Как следует из названия, их целью является оценка скорости жидкости (воздуха), поведения температуры и давления в пространстве и времени, на площадках ELT, вокруг и внутри корпусов, а также внутри компонентов.

Устойчивое моделирование топографии позволяет получить оценки наземного слоя (GL) для изучения характеристик местности. Неустойчивое моделирование внутри кожуха в течение дня обеспечивает производительность системы отопления, вентиляции и кондиционирования. Наконец, нестационарное ночное моделирование обеспечивает эффективность аэротермических обсерваторий за счет наблюдения купола и ветровой нагрузки телескопа. Время моделирования для последнего составляет порядка минут.

3.3. Твердые и сопряженные модели теплопередачи

Это трехмерные перехо дные модели. В целом, они не требуют больших затрат в вычислительном отношении и имеют короткое время обработки, за некоторыми исключениями. Их целью является не только оценка поведения тепловой инерции компонента во времени, но также пространственная изменчивость температуры и возникающая в результате деформация. В случаях , когда влияние компонента на

Machine Translated by Google

необходим ограниченный объем воздуха или важна изменчивость конвективного теплопереноса, разрабатываются (сопряженные) модели взаимодействия твердого тела и жидкости. Время моделирования для этих моделей обычно составляет несколько суточных циклов.

3.4. Инструменты постобработки

Также существует ряд инструментов постобработки для обработки различных промежуточных выходных данных и предоставления результатов в конечном формате переменных. Некоторые из них включены в файлы программного моделирования, а некоторые являются автономными.

На рисунке 3 показана текущая типичная синергия аэротермического моделирования ELT. Пакет состоит из набора моделей тепловых сетей, CFD и сопряженных моделей теплопередачи. Он также включает специальную структурную модель, разработанную специально для термических деформаций. Цель этих моделей — не только предоставить конкретные результаты для оценок IQ, но также дополнять и поддерживать друг друга. Синий цвет соответствует высокоточным моделям CFD, золотой — моделям сопряженной теплопередачи, тепловой сети и тепловой деформации, зеленый — инструментам IQ, принадлежащим системе IM, а желтый — входным/выходным переменным. Модели CFD предоставляют коэффициенты теплопередачи для твердотельных тепловых моделей анализа методом конечных элементов (FEA) зеркала и структуры телескопа, которые, в свою очередь, предоставляют данные о температуре и тепловых потоках для моделей CFD в качестве граничных условий для телескопа и оптических поверхностей. Тепловые модели сети передают тепловые потоки в модели CFD для поверхностей корпуса и других компонентов. Они также могут обеспечить модели FEA правильные свойства излучения. Наконец, они могут быстро предоставить качественную информацию об оптимальных стратегиях терморегулирования в дневное время, чтобы свести к минимуму трудоемкие вычислительные расчеты при дневном CFD-моделировании. Коэффициенты конвективной теплопередачи, необходимые для моделей тепловой сети и FEA, получены с помощью CFD-моделирования.

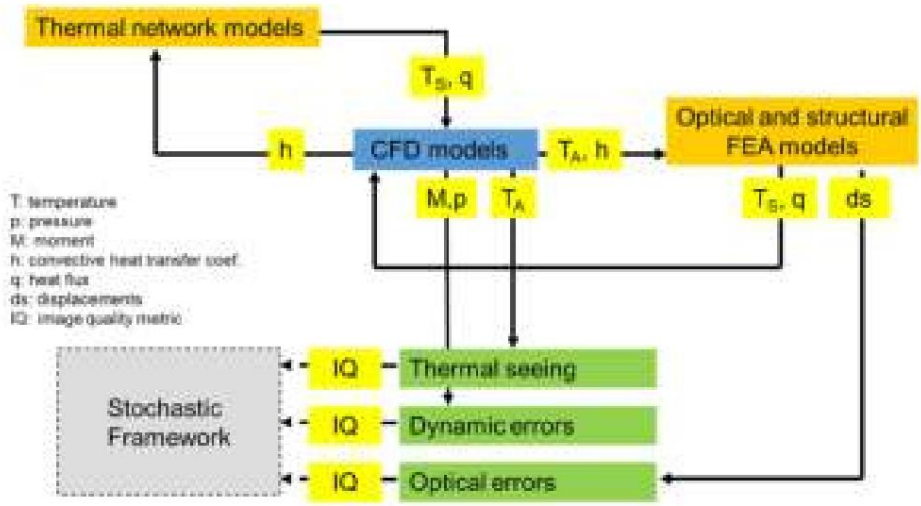


Рисунок 3. Информационная блок-схема аэротермического моделирования.

Пакет аэротермического моделирования может предоставить широкий спектр результатов для проверки и/или проверки требований к проектированию подсистем. Термическое моделирование CFD дает поля силы/момента и температуры, используемые соответственно блоками динамического и теплового наблюдения, тогда как тепловое моделирование FEA дает смещения, используемые непосредственно оптическим блоком. Таким образом, он может производить оценки бюджетных показателей ошибок, связанных с аэротермическими явлениями подсистемы, и бюджетов производительности на уровне системы.

Доступные входные данные, параметры, которыми можно управлять с помощью конструкции и эксплуатации, а также заранее рассчитанные аберрации из блоков IM в форме многомерной матрицы (справочная таблица, LUT) объединяются внутри стохастической структуры для определения состояния системы во времени. Наконец, функции, соответствующие математической/статистической обработке, создают параметры производительности системного уровня, такие как PSSn.

Machine Translated by Google

3.5. Обработка запросов на уровне подсистемы

У группы ELT IM есть внутренний план разработки аэротермических моделей. Планирование привязано к проверкам на уровне системы, а приоритеты конкретных моделей определяются в соответствии с значимостью соответствующего члена бюджета ошибок. Потребность в первоначальных оценках местного наблюдения и ветровой нагрузки телескопа привела к тому, что первой моделью, которую необходимо было разработать, а также первой конструкцией подсистемы, которую необходимо поддерживать и оптимизировать, должен быть кожух . Внутри будет размещен концептуальный телескоп проектного уровня. Тепловые граничные условия будут взяты из исходной модели тепловой сети, в которой учитываются большие площади поверхности, которые напрямую влияют на оптический путь. Остальные источники тепла будут исходить из соответствующих тепловых требований. Это составило модель CFD обсерватории. Обратите внимание, что существует ночная и дневная версии этой модели. Модель будет обновляться ежегодно с повышением геометрической точности. Модели подсистем будут разрабатываться либо для повышения точности тепловых граничных условий для модели обсерватории, тем самым повышая точность оценки производительности, либо для поддержки проверок под Этот последний процесс генерирует то, что здесь называется аэротермическим исследованием подсистемы.

Команда подсистемы обращается к команде IM с запросом (рис. 4). Типичными запросами могут быть исследования компромиссных вариантов конструкции (геометрические соображения, выбор оборудования, вариант скорости потока и рассеивания тепла), входные данные для анализа выживания и влияние необратимых вариантов конструкции на производительность. Часто это могут быть действия по обзору. Совещание или серия совещаний между командами проводятся для отслеживания непосредственно задействованных требований к подсистеме (уровень 4) и соответствующих требований к производительности (обычно уровень 3). Это важно для определения объема действий, ожидаемых командой IM: какие модели потребуются, с каким результатом и когда. После определения объема можно определить все предварительные условия и оценить необходимые ресурсы.

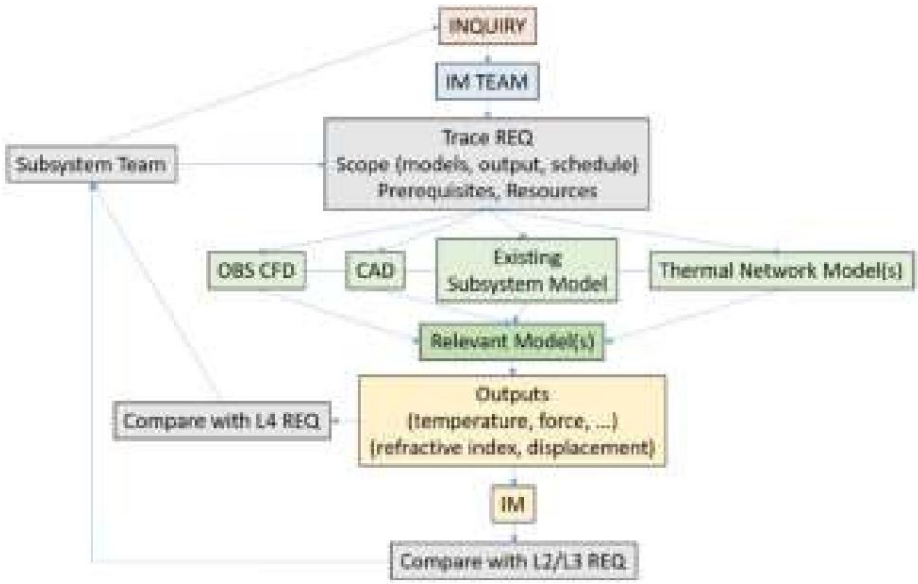


Рисунок 4. Типичный процесс проверки требований к аэротермии ELT.

Предварительные требования включают общие входные данные (скорость ветра, ориентация телескопа, мощность/расходы компонентов и т. д.), существующую модель подсистемы, которую необходимо использовать с различными входными данными, модель САПР для новой геометрии или обновления существующего представления модели, тепловые данные . сетевые модели для дополнительных расчетов температуры и бюджеты тепловыделения на уровне системы или подсистемы. Обратите внимание, что подавляющее большинство запросов на сегодняшний день требуют информации, предоставленной моделью CFD обсерватории.

Часто либо срочность, либо временные рамки, связанные с запросом, не соответствуют предполагаемым ресурсам, что приводит к сокращению масштабов (минимальное количество усилий для получения приемлемых ответов).

Machine Translated by Google

После того как все соответствующие модели и исходные данные определены, проводится моделирование и собираются результаты. Интегрированное моделирование может потребоваться или не потребоваться в зависимости от уровня требований, подлежащих валидации (или верификации). Обычно первый раунд результатов приводит к появлению дополнительных запросов и модификаций, а также, возможно, к разработке новой модели.

В следующих нескольких разделах различные типы и основные применения аэротермических моделей будут рассмотрены более подробно. В завершение этого раздела в таблице 1 представлено краткое описание влияния аэротермического моделирования на проектирование ELT, в основном в порядке временной шкалы (в зависимости также от зрелости проектирования подсистемы). Краткое изложение не является исчерпывающим. Большинство моделей периодически обновляются, и их точность увеличивается в результате зрелости проектирования и извлеченных уроков моделирования. Кроме того, до разработки многих из этих моделей было несколько примеров общей производительности CBE. Однако обратите внимание, что не все обсерватории строго следовали этому порядку, особенно на этапах выбора места и ограждения, а также проектирования.

Таблица 1. Влияние аэротермического моделирования на ELT.

Аспект развития ELT	Моделирование Action	Функция системной инженерии
Выбор места	GL моделирование. Сравнение с измерениями на месте.	Компромиссные исследования. Снижение риска (проверка модели).
Разработка сайта	Моделирование GL: минимизируйте влияние на качество объекта, выберите конкретное место на объекте и исследуйте взаимодействие с существующими обсерваториями, где это применимо. Сравнение с измерениями на месте.	Компромиссные исследования. Снижение риска (проверка модели).
Корпус и удобства	Моделирование обсерватории: выбор типа корпуса, оптимизация аэродинамической формы, выживаемость ветровых нагрузок, площадь вентиляционных отверстий, расположение и количество, размеры и производительность охлаждения, тепловой контроль приводов, вспомогательного оборудования и промежуточных пространств, температура поверхности/коэффициент излучения краски и толщина изоляции.	Компромиссные исследования. Проверка требований.
Крепление для телескопа (конструкция)	Твердотельное термическое моделирование: термическая деформация, наведение телескопа, температура поверхности/коэффициент излучения краски и справочная таблица расположения/выравнивания датчика температуры. Моделирование обсерватории: аэродинамическая оптимизация верхней и вторичной опорной конструкции.	Проверка требований. Компромиссные исследования.
Оптические сборки	Моделирование сопряженного теплопереноса: температуры поверхности и компонентов, ошибка волнового фронта деформации, термоконтроль и влияние на метрологические датчики.	Проверка требований.
Инструменты и лазерный гид Звездные системы	Моделирование сопряженного теплопереноса: температуры поверхности и компонентов, ошибки фокусировки, турбулентность внутреннего оптического пути и оптимизация конструкции.	Проверка требований. Компромиссные исследования.
Производительность CBE	Моделирование обсерватории: тепловое зрение/влияние на метрологию, ветровая нагрузка на конструкцию и оптику, термическая деформация конструкции и оптики и наведение телескопа. Моделирование существующих обсерваторий для сравнения и исследования разрешения сетки (для нескольких моделей).	Проверка требований. Снижение рисков (проверка модели).
АИВК/операции	Моделирование обсерватории: аэротермическая среда во время строительства, внутренние температурные градиенты при отсутствии кондиционирования воздуха, профили внешнего ветра и влияние на метрологию. Моделирование пониженного порядка (ROM) и моделирование искусственной нейронной сети (ANN) для определения первых характеристик света и оптимизации операций/наблюдения за очередями.	Проверка требований. Проверка требований.

Machine Translated by Google

4. Моделирование тепловой сети

Стохастическая основа является основой любой модели тепловой сети, которая статистически охватывает широкий диапазон условий окружающей среды. Несмотря на то, что основной переменной, представляющей интерес, является температура окружающей среды, изменчивость ветра и направления телескопа обеспечивает необходимое разнообразие коэффициентов конвективной теплопередачи и коэффициентов радиационного обзора как для внешних, так и для внутренних поверхностей корпуса, а также для компонентов телескопа. Ежедневные данные об окружающей среде являются жизненно важными входными данными для любой модели тепловой сети, поскольку из-за тепловой инерции поведение компонентов обладает «памятью»; его текущее тепловое состояние зависит от предыдущих тепловых состояний.

Устаревшая версия этой структуры включала тепловую модель с сосредоточенной массой для главного зеркала TIO, поскольку видимость зеркала можно было рассчитать с использованием полуэмпирического соотношения [15]. С тех пор было обнаружено, что это соотношение не справедливо для гигантских зеркал и всех схем потока внутри корпусов ELT, и больше не используется.

С тех пор эта структура была объединена с несколькими моделями тепловых сетей, которые будут представлены ниже. Выходные параметры этой структуры, которые используются в качестве входных данных для других моделей или для целей проектирования (рабочие диапазоны), включают следующее:

- Дрейф температуры окружающей среды с момента последней настройки телескопа, используемый телескопом/зеркалом. модели термической деформации;
- Разница температур между восходом солнца и определенным временем ночи или средним временем суток, используемая для определения размеров агрегата и для определения температуры подачи;
- Разница температур между дневной внешней температурой окружающей среды и внутренней температурой, используя результаты модели кондиционирования воздуха, используется в сочетании со скоростью внешнего ветра для определения инфильтрационной нагрузки на корпус.

4.1. Корпус

Правильные тепловые граничные условия на поверхностях корпуса важны для правильного определения температурного поля внутри оптического пути. В местах, где скорость ветра невелика, преобладают диффузия и плавучесть, а градиенты температуры на поверхностях трансформируются в шлейфы, влияющие на оптический путь. Кроме того, когда ветер движется над областью вокруг проема кожуха, температура внешней поверхности создает градиент, который затем проходит через оптический путь. Для того, чтобы правильно оценить тепловой поток на поверхностях корпуса, была реализована модель, которая может учитывать постоянное движение компонентов корпуса, проводимость, конвекцию и, самое главное, излучение. Он включает в себя узлы для обшивки корпуса, изоляции, конструкции корпуса и внутреннего воздуха. Он также может предоставить информацию о временных градиентах температуры межклеточного космического воздуха, площадки наблюдения и даже структуры телескопа. Он может оценить пределы рассеивания тепла для конкретных компонентов. Наконец, он может оценить потребность в электроэнергии для кондиционирования воздуха в дневное время из-за солнечного излучени

Полная 3D-версия этой модели для ТИ Была впервые представлена в 2011 году, а текущая версия включена в [16]. Эквивалент GMT можно найти в [17].

Воздействие заключается в следующем:

- Обеспечивает кумулятивные функции распределения температур и потоков компонентов: наружная обшивка, конструкция корпуса, внутренняя изоляция, наблюдательная площадка, воздух внутри корпуса и воздух в межклеточном пространстве;
- Проверка требований: излучательная способность наружной краски и изоляции;
- Обеспечивает максимально ожидаемую температуру в межтканевом пространстве;
- Предоставляет статистику рассеивания тепла через изоляцию и смотровой пол;
- Обеспечивает входные граничные условия для CFD-моделирования производительности обсерватории.

4.2. Оптика.

Несмотря на то, что для некоторых оптических компонентов также существуют трехмерные твердотельные тепловые модели, часто бывает полезно разработать быстрые аналоги с сосредоточенной массой (например, [18]). Основной целью этих моделей является проверка требований допустимой остаточной диссипации после охлаждения (в случае повторного охлаждения).

Machine Translated by Google

требуется) в сочетании с статистическим представлением соответствия требованиям к температуре поверхности (обычно для целей тепловидения).

Эффект заключается в

следующем: • Обеспечивает разницу температур стекла и окружающей среды в различных условиях окружающей среды.
таль условия;

• Проверка/изменение тепловых характеристик для первичных и вторичных зеркал.
рор-системы

5. CFD-моделирование астрономической площадки 5.1. Выбор места

Очень рано, в 2002 году, началась кампания по определению возможных мест для американской обсерватории следующего поколения. Неотъемлемой частью этой кампании было использование CFD-моделирования для проверки, определениях характеристик объектов и составления короткого списка, поскольку оборудование не могло быть развернуто на всех объектах -кандидатах .

Необходимо было получить и обработать цифровые карты высот (DEM) интересующих объектов для создания вычислительных областей и сеток. ЦМР охватывали существующие обсерватории, такие как Мауна-Кеа (Гавайи, США), Лас-Кампанас (Чили), Параналь/Армазонес (Чили), Тололо/Пачон (Чили), Сан-Педро-Мартир (полуостров Баха, Мексика) и Ла-Пахон (Чили). Пальма (Канарские острова, Испания) и несколько новых в пустыне Атакама в Чили (Негро, Хонар, Чахнантор, Толончар, Кималь) и даже в Антарктиде (Купол С).

Несмотря на то, что моделирование изначально было стационарным и изотермическим, с упором на топографически индуцированную механическую турбулентность [19,20], конечная цель включала разрешение и определение характеристик GL (оптической турбулентности), которую более сложно измерить экспериментально. К 2007 году на этом фронте также был достигнут значительный прогресс, включая первоначальные усилия по проверке моделей [21–24]. Функциональная зависимость от тепловой εT и механической εM турбулентной диссипации использовалась для оценки параметра структурной функции показателя преломления Cn 2~A εT εM 1/3 из стационарного моделирования, а теория слабого рассеяния использовалась при обработке нестационарных полей. . Моделирование CFD позволило получить турбулентную кинетическую энергию и скорость диссипации, которые впоследствии были использованы для расчета масштабов турбулентной длины.

Необходимые входные данные включают следующее:

• Ветер и температурные условия с наветренной стороны, которые, наряду с температурой топографии, приводят к реалистичному профилю GL на высоте от 7 до 400 м от земли. Единственными переменными являются скорость и направление ветра. Температура земли была выбрана в качестве расчетной величины, а не входной, либо путем наложения ожидаемого чистого теплового потока, либо путем использования модели серого теплового излучения с коэффициентом излучения 0,8 и соответствующей эффективной температурой неба. Эталонным местоположением было местоположение соответствующей системы мониторинга объекта. • Единое эталонное давление, отражающее среднюю высоту объекта.
Определенная пользователем функция использовалась для соответствующего вертикального профиля плотности, в результате чего была получена ожидаемая эталонная плотность на средней высоте участка.

Воздействие заключается в

следующем: • Выбор основного кандидата на место ELT;

• Снижение риска: проверка моделирования GL (сравнение с измерениями , если таковые имеются); • При наличии соответствующих

исходных данных смоделированные профили GL являются реалистичными, в то время как неопределенности
измерения и моделирования оптической турбулентности оказались сопоставимыми, что делает использование термического моделирования экономичной и гибкой альтернативой экспериментам, а в некоторых случаях единственным вариантом.

5.2. Земляной слой

5.2.1. Мауна-Кеа, 13N

Площадка 13N на острове Мауна-Кеа (штат Гавайи, США) выбрана для размещения TIO. С этой целью была получена ЦМР Мауна-Кеа размером 20 × 13 км2 с разрешением 10 м. Топографическая граница

Machine Translated by Google

Центр расчетной области находится в координатах UTM-5Q [X, Y] из [241000, 2192500].

Из-за пологих склонов высота расчетной области была выбрана равной 8000 м для полномасштабного моделирования и 5000 м для моделирования, ограниченного 3,5 × 3,0 км2 .

Во время кампании по выбору места для TIO над местом были собраны временные записи скорости, направления и температуры ветра, а также данные оптической турбулентности. Основываясь на этом, а также на том факте, что 13N находится на северной стороне, ниже вершины, было выполнено стационарное моделирование для трех направлений ветра (В , ЮВ , З) при средних скоростях ветра [25].

5.2.2. Лас-Кампанас Пик

Лас-Кампанас (Чили) выбран для проведения GMT. Для этого была совмещена ЦМР размером 22 × 24 км2 с разрешением 20 м и ЦМР высокого разрешения (5 м) 2 × 2 км2 . Топографическая граница расчетной области находится в центре Лас-Кампанаса с координатами UTM-19J [X, Y]: [336216, 6785453]. Высота расчетной области была выбрана равной 5000 м.

Временные записи скорости, направления и температуры ветра, а также турбулентных значений внутренней шкалы C_n^2 были собраны со станции мониторинга окружающей среды с двумя башнями . Как стационарное, так и нестационарное моделирование CFD было выполнено для преобладающих условий местности, срединных ветров ССВ . Была разработана процедура минимизации неопределенности топографических граничных условий [26].

5.2.3. Ла Пальма, ORM

Обсерватория дель Роке де Лос Мучачос (ORM) на канарском острове Ла Пальма (Испания) была выбрана в качестве альтернативного места для TIO. Необходимо было исследовать несколько потенциальных мест на вершине с точки зрения силы GL. Более того, наличие существующих обсерваторий вызвало необходимость изучения взаимодействия этих обсерваторий и ТИО. Отсутствие локальных испытаний на месте и характер местности привели к использованию CFD-моделирования в сочетании с моделью наблюдения для оценок оптической турбулентности GL в 2016 году [27].

Расположение ORM на острове Ла-Пальма в сочетании с пересеченной местностью и отсутствием реалистичных входных профилей вблизи вершины обусловило большую вычислительную область, которая может охватывать почти весь остров с дополнительной буферной зоной на уровне моря для реалистичное развитие GL. На границах такой области профили скорости и температуры известны с большей достоверностью . Для этого ЦМР острова размером 40 × 40 км2 с разрешением 50 м была объединена с ЦМР высокого разрешения (10 м) размером 4 × 3 км2 вершины ORM. Топографическая граница расчетной области находится в центре ORM с координатами UTM-28R [X, Y]: [217900, 3185029]. Высота расчетной области была выбрана равной 7500 м.

Стационарное моделирование было выполнено для четырех различных направлений ветра (СВ , С, З, ЮЗ). Было проведено два отдельных исследования. Первый из них был посвящен сравнению GL между четырьмя сайтами-кандидатами. Затем для предпочтительного места на основе результатов и для двух из этих направлений ветра также рассматривалось наличие близлежащих обсерваторий, таких как GTC и TNG, для определения взаимных помех , которые могли бы повлиять на местное GL [27]. Более подробный отчет об изменчивости ORM GL приведен в [28].

Дополнительный эффект заключается в следующем:

- Выбор альтернативного кандидата на размещение площадки TIO;
- Оценка взаимодействия между TIO и существующими обсерваториями, требуемая Институтом астрофизики Канарских островов.

6. CFD-моделирование обсерватории

Соответствующие точные модели CFD для обсерваторий были разработаны на основе 3D-моделей CAD крепления и корпуса телескопа. Они используются для моделирования и анализа аэротермической среды вокруг обсерваторий. Разработанные многомиллионные модели учитывают основные компоненты обсерватории, такие как основной (M1) и вторичный (M2) агрегаты, вторичные опорные фермы, другие компоненты монтировки телескопа, а также ограждение вместе со вспомогательными зданиями.) на вершинах .

Machine Translated by Google

При зарождении идеи ELT сразу же возникло возражение, заключающееся в том, что чрезмерный ветер сделает проект неосуществимым. Телескоп будет слишком открытым и недостаточно жестким, чтобы соответствовать желаемым характеристикам. Для решения этой проблемы потребовались годы обширных исследований [29–32]. Измерения давления и скорости ветра внутри купола все еще строящегося корабля Gemini South, исследования типовых форм ELT в аэродинамической трубе в Калифорнийском технологическом институте, в Институте аэрокосмических исследований NRC в Канаде и Европе, а также моделирование CFD и интегрированное моделирование структура, элементы управления и оптика, наконец, позволили предположить, что ELT, включающий в себя правильные стратегии смягчения ветровой нагрузки, не будет бесполезным делом [33]. Вооружившись дополнительной уверенностью, были проведены устаревшие исследования, чтобы прийти к приемлемым конфигурациям ограждений путем моделирования традиционных конструкций купольных затворов, каруселей и Калотта, а также нескольких конфигураций вентиляции и защиты от ветра, а также вариантов строительства с фиксированным о
Те же методы, разработанные для TIO и GMT, были также использованы для оптимизации конструкции обсерватории Веры Рубин (в то время Большого синоптического обзорного телескопа). CFD-моделирование буквально сформировало архитектуру здания, ограждения, световые перегородки и требования к камерам [34–38].

По другую сторону Атлантики E-ELT также выполнила несколько ночных моделей обсерваторского масштаба, но они не связаны напрямую с оптическими характеристиками, а сосредоточены на уровнях скорости вокруг телескопа и условиях выживания [39].

Подробные отчеты о настройке моделирования можно найти в [40,41]. Частые обновления/модификации необходимы из-за эволюции конструкции и уроков, извлеченных из исследований, таких как те, о которых сообщается в [28,42–45]. Наиболее важные из них суммированы следующим образом: • Геометрия обновлена с учетом новейших разработок и повышенной точности. • Аналогично обновляются бюджеты тепловыделения и устанавливаются дополнительные границы
создан для размещения решенных источников тепла.

• Достижения в методологии построения сетки, разработке решателей и вычислительной мощности учитываются как при настройке моделирования, так и при постобработке результатов. • Входные данные для области против ветра были пересмотрены, чтобы отразить более реалистичные условия GL. • Модели сохраняют относительное движение между мозаичными частями и соответствующими локальными системами координат для его поддержки. Таким образом, граничные условия можно применять только один раз, а шаблоны моделей можно использовать для разных ориентаций и скоростей ветра. Однако при создании объемной сетки части объединяются, чтобы минимизировать числовые ошибки, возникающие на границах разделов объемов, к которым расчет PSSn по тепловизионным наблюдениям очень чувствителен. При желании процедуру можно автоматизировать с помощью сценариев.

6.1. Дневное время (Кондиционер)

Одневном моделировании CFD сообщалось в [16,46] в период с 2010 по 2024 год для TIO и в [47] для GMT. Проведенное моделирование было выбрано для демонстрации того, что система отопления, вентиляции и охлаждения (HVAC) шкафа может работать должным образом по крайней мере в 90% случаев. Это основано на ожидаемом дневном тепловом балансе и колебании температуры между температурой восхода солнца и целевой температурой. Геометрия соответствует стационарному телескопу и ограждению в штатном положении стоянки.

Воздействие заключается в
следующем: • временные записи температуры воздуха вольера на различной высоте от пола обсерватории и вертикальных профилей температуры в заданное время суток; • Валидация/проверка конструкции системы отопления, вентиляции и кондиционирования (максимальная производительность потока, разделение между скоростями первичной подачи и рециркуляции, расположение сопел, стратегия эксплуатации); • Оптимальная температура
сопла системы отопления, вентиляции и кондиционирования в воздухе как функция целевой температуры, которой необходимо достичь.
требования к производительности;
• Предоставляет коэффициенты теплопередачи для расчетов конвекции в тепловые модели компонентов.

6.2. Ночь

Текущие таблицы LUT аэротермических характеристик состоят из результатов для трех различных зенитных углов телескопа (0 , 30 и 90 60. –65), 5 углов азимута телескопа относительно ветра (0 , 45 , ,

Machine Translated by Google

135 , 180), 5–6 скоростей ветра (2–3 для открытых жерл, 2–3 для закрытых) и до 3 различных наборов тепловых граничных условий, соответствующих разным частям ночи (номинально ~1 час после захода солнца, середина ночи и медвежий восход солнца). Эффективное использование модели предполагает позиционирование сетки в определенной ориентации, а затем запуск одного моделирования, изменяющего скорость приточного ветра от нуля до некоторого порога с открытыми вентиляционными отверстиями. Переход от открытых жерл к закрытым происходит при скорости приточного ветра ~5–7 м/с. Затем для этой ориентации проводится отдельное моделирование, соответствующее скорости ветра до 17–18 м/с с закрытыми жерлами . Таким образом, покрывается большая часть всего диапазона скоростей ветра. Функция скорости ветра на входе определяется таким образом, чтобы при эталонных скоростях ветра LUT было потрачено достаточно времени, чтобы устранить переходные эффекты и накопить достаточно времени для статистики. Это особенно важно для наблюдения за куполом из-за более длительных временных масштабов, связанных с распространением тепловых граничных условий во внутренний воздух кожуха. Несмотря на то, что этот подход использовался для оценки аэротермических характеристик TIO в прошлом [45], альтернатива будет обсуждаться в следующем разделе.

Дополнительные необходимые входные данные следующие:

- Текущие термические граничные условия на поверхности обсерватории. Значения сгруппированы в три категории: стандартные (например, адиабатические, симметричные и т. д.), расчетные и предполагаемые . Оценочные значения являются результатом моделирования. Предполагаемые значения относятся к компонентам, которые либо подвергаются температурному контролю и имеют технические требования, либо имеют недостаточно информации для точного теплового моделирования. Очень немногие границы попадают в эту категорию, поскольку, по крайней мере, модель тепловой сети может дать некоторую оценку для большинства компонентов. Для многих подсистем уже существуют сопряженные модели теплопередачи, которые определяют температуру поверхности. К ним относятся оптические сборки, средства адаптивной оптики и некоторые приборы «первого света» достаточно зрелой конс Большинство граничных условий применяются как разница температур от эталонной температуры окружающей среды. В некоторых случаях предполагается равновесие между конвекцией и излучением, игнорируя проводимость. В основном они соответствуют компонентам с низкой тепловой инерцией, таким как опорная конструкция и верхняя часть узла вторичного зеркала, внешняя часть корпуса и сооружений, а также внутренняя облицовка поверхностей. Соответствующие модели обеспечивают более высокие температуры термоинерционных компонентов, таких как бетонные детали корпуса и нижняя конструкция телескопа. Отметим, что правильная реализация граничных условий в конечном итоге требует знания теплового баланса обсерватории [48].

Выходные данные включают в себя следующее:

- Трехмерные температурные поля внутри оптического объема от вершины M1 до конца пограничного слоя оболочки с заданной временной частотой дискретизации. Они используются в качестве входных данных в постпроцессоре тепловидения [49,50]. Следовательно, побочным продуктом этого моделирования также является временная запись карт разности оптического пути (OPD). Для исторического обзора раннего моделирования тепловидения читатель может обратиться к [51,52].
- Временные записи карт давления на оптических поверхностях . Они используются в качестве входных данных для расчета размытия изображения, вызванного ветром [53,54]. Карты давления также доступны по запросу для любого другого решенного компонента.
- Временные записи компонентов момента вокруг системы координат телескопа, возникающие из-за сил ветра на всем телескопе. Силы и моменты на изолированных компонентах телескопа предоставляются по запросу. Они используются в качестве входных данных для расчета джиттера изображения [9,42].
- Коэффициенты конвективной теплопередачи на выбранных поверхностях для использования в качестве входных данных в твердых и сопряженные модели теплопередачи компонентов.

На рисунке 5 представлены репрезентативные контурные снимки пространственного градиента показателя преломления, меры оптической турбулентности, в доль нормали к плоскости оси возвышения телескопа для TIO и GMT. Аналогично, репрезентативные мгновенные карты OPD показаны на рисунке 6.

Machine Translated by Google

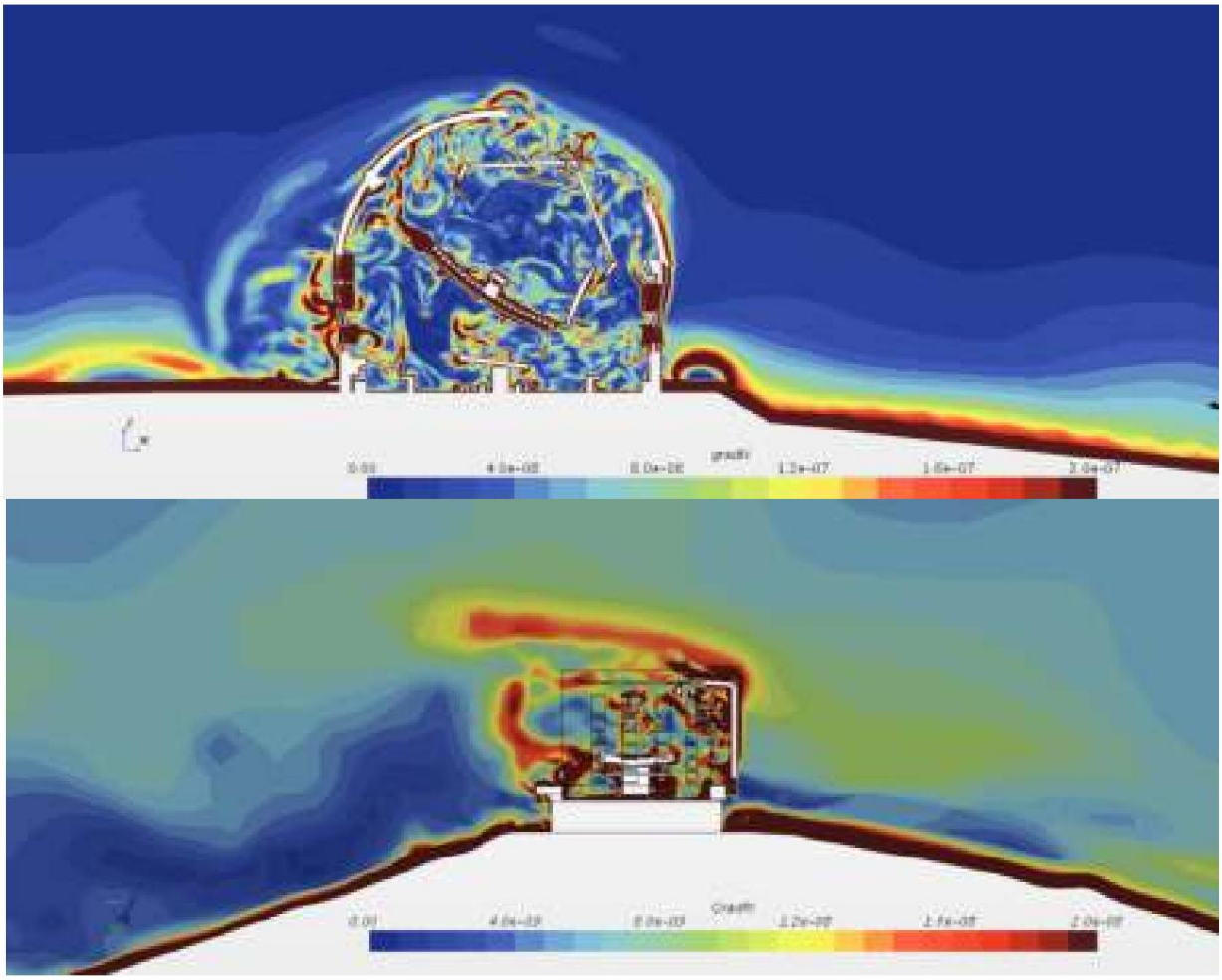


Рисунок 5. Репрезентативные контурные снимки пространственного градиента показателя преломления вдоль нормали к плоскости оси возвышения телескопа: (вверху) TIO, зенит 30 и азимут 45 относительно ветра, и (внизу) GMT, зенит 0 и 180 азимут относительно ветра. Скорость ветра средняя (6–7 м/с), схема вентиляции «открытая».

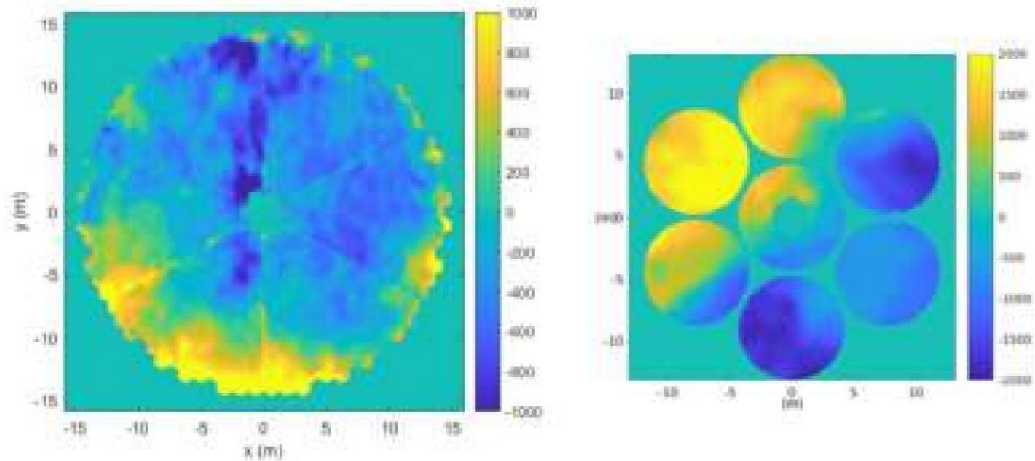


Рисунок 6. Репрезентативные карты OPD (в нм) для TIO (слева) и GMT (справа).

Результат заключается в следующем: • Аэродинамическая оптимизация всей обсерватории и разработка стратегии эксплуатации ограждения посредством компромисса между ветровым колебанием и тепловым зрением;

Machine Translated by Google

- Оценка производительности обсерватории и бюджета ошибок: тепловое зрение, дрожание изображения и размытие изображения, вызванное ветром;
- Обеспечивает чувствительность тепловидения к источникам тепла: обновление бюджета рассеивания тепла и выбор дизайна;
- Обеспечивает чувствительность метрологической системы к окружающей среде корпуса: ожидаемое измерение ошибка в отчете;
- Предоставляет коэффициенты теплопередачи для конвекции и коэффициенты обзора компонентов для расчетов излучения в тепловых моделях компонентов.

6.3. Дневное время (солнечное)

Было бы упущением не упомянуть особую категорию обсерваторий, где наблюдения происходят днем: солнечные обсерватории. Эти методы оценки производительности были недавно расширены теперь включают оптимизацию корпуса и платформы телескопа, а также проверку требований к тепловым экранам и активному тепловому контролю для Европейской солнечной обсерватории (EST) [55].

6.4. Валидация

К 2010 году был достигнут значительный прогресс, включая первоначальные усилия по проверке модели, в решении и описании GL [21,25]. В 2018 году была представлена дополнительная попытка проверки, на этот раз с использованием нестационарного моделирования [26]. При правильном знании условий окружающей среды современные методологии моделирования могут дать реалистичные и полезные результаты. Наглядный пример изображен на рисунке 7 для Лас Кампанас [28]. GL сравнивается с измеренным на Паранале, Очень Большом Телескопе ESO (VLT). Паранал также находится очень близко к сайту E-ELT. Эти профили используются как GMT, так и E-ELT для обучения режимам работы адаптивной оптики наземного уровня (GLAO). Как упоминалось выше, аналогичные исследования проводились для Мауна-Кеа и ORM.

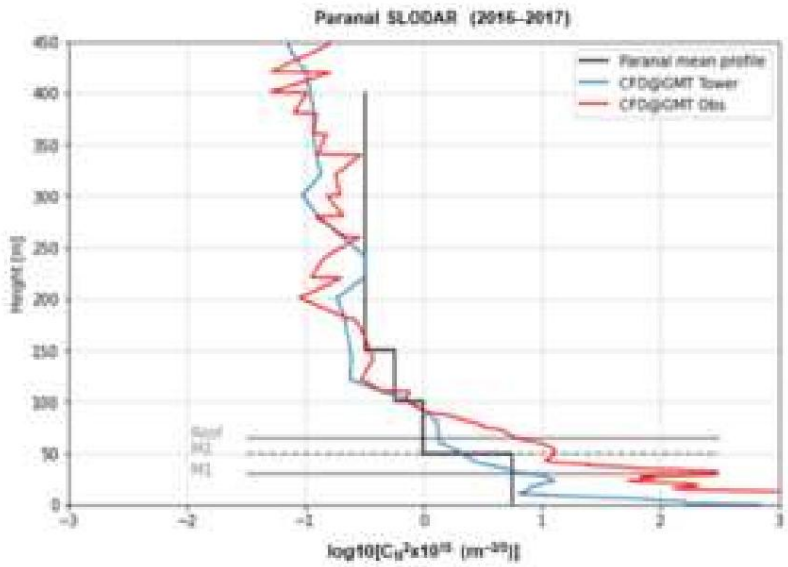


Рисунок 7. C_n^2 профиль в Лас-Кампанасе на наблюдательной вышке и внутри ограждения GMT. Наложен профиль C_n^2, измеренный с помощью SLODAR, с близлежащего участка Паранал.

Процедура моделирования работы обсерваторий в ночное время с акцентом на тепловидение была подтверждена исследованиями, проведенными в 2011 году и описанными в [56,57]. Они включали измерения и моделирование в двух обсерваториях, Кек II и CFHT (Канада-Франция-Гавайский телескоп), которые имеют общую базовую точку TIO и, следовательно, общую вычислительную область и условия против ветра.

Целью исследований с точки зрения TIO была проверка процедуры моделирования, необходимой для получения локального изображения: численный метод (настройки решателя и модели),

Machine Translated by Google

требуемый размер области, требуемая геометрическая точность обсерватории, пространственное и временное разрешение, граничные условия и представление источников тепла на поверхностях обсерватории.

Обсерватории Кека были заинтересованы в оптимизации использования своей активной системы вентиляции для повышения производительности и минимизации эксплуатационных расходов.

CFHT интересовался дифференциальными характеристиками пассивной вентиляции. системы, прежде чем принять решение о ее одобрении.

На станции Кек II был установлен лазерный сцинтилометр, который обеспечивал интегральные значения C_n^2 и средние значения оптической турбулентности по внутренней шкале на трассе длиной 63 м между M1 и M2, а также звуковые анемометры на верхнем опорном кольце для регистрации механической турбулентности. Система активной вентиляции работала на разных скоростях. Инфракрасная камера обеспечивала разницу температур от окружающей средыдля всех поверхностей обсерватории. Аналогичные температуры были собраны на CFHT. Комбинация данных CFHT MegaCam обеспечила IQ; Модуль DIMM, установленный у основания апертуры, и модуль DIMM, установленный на наблюдательной вышке CFHT, позволяли оценить видимую видимость купола.

Для всех измеренных подмножеств ориентация телескопа, скорость, направление и температура внешнего ветра были получены из данных башни CFHT и метеорологического центра Мауна-Кеа. В течение длительного периода времени моделировались четыре различных ориентации для Кека II и три для CFHT с пассивной вентиляцией и без нее. В случае с Кеком II было отобрано 240 комбинаций ориентации, скорости внешнего ветра и скорости вентилятора.

Выходы Keck II следующие:

- Дисперсия показателя преломления на пути сцинтилометра, интегрированная C_n^2: разумное согласие с измерениями;
- Скорость и внутренний масштаб турбулентной диссипации энергии: разумное согласие с измерениями;
- Интегральная шкала длины; ширина апертуры соответствует ожидаемой;
- Согласованное поведение C_n^2 от скорости внешнего ветра;
- Согласованное поведение C_n^2 в зависимости от скорости вращения вентилятора;
- Определена оптимальная скорость вращения вентилятора; половина того, что Кек использовал ранее.

Результаты CFHT следующие:

- Функция рассеяния точки (PSF) купольного обзора вдоль оптического пути, PSF Полная ширина, половина максимума (FWHM): разумное согласие с измерениями;
- Значительное снижение видимости купола на полувысоте при пассивной вентиляции: как минимум на 25 % без учета улучшения разницы температур на поверхности (оно оказалось ближе к 50 %).

Эффект заключается в следующем:

- Снижение риска: проверка моделирования купола;
- Выбор оптимальной скорости вращения вентилятора Keck: снижение эксплуатационных расходов;
- Поддержка рекомендации по вентиляции купола CFHT: дифференциальное улучшение IQ;
- Общий комментарий, как и в случае с CFD на объекте: неопределенности моделирования и измерения были сопоставимы.

В первом приближении можно было бы представить себе тепловизионный оптический объем, демонстрирующий поведение ОПД, подобное атмосферному, со спектром Кармана заданного внешнего масштаба и спектрального наклона. Моделирование показало, что наклон спектра быстро сходится к Колмогоровскому по мере увеличения разрешения. Длина оптического пути текущих и проектируемых/строящихся больших и чрезвычайно больших телескопов составляет несколько десятков метров, что достаточно, чтобы считаться «хорошим случаем» GL. В этих условиях PSSn можно аппроксимировать следующим образом:

$$\frac{FWHM_{p\ банкомат}}{FWHM_{p\ общий}}$$

В общем, это быстрый и грязный способ (с некоторой связанной погрешностью) преобразовать FWHM в PSSn для большинства аберраций в целях составления бюджета ошибок. Обратите внимание, что PSSn представляет собой интеграл от квадрата PSF, нормированный на квадрат эталонной атмосферы,

Machine Translated by Google

включая информацию от крыльев PSF, в то время как FWHM относится только к ширине PSF, где его сила равна половине максимальной. Таким образом, приближение может быть справедливым не для всех типов оптических ошибок. Подробнее об этом можно прочитать в [11–13]. Обычно используется р = 2 (эквивалент операции извлечения корня из суммы квадратов ошибки и эталонной атмосферы). Однако для конкретного термина тепловидения, поскольку оптический объем тепловидения является частью общего столба зрения, следует использовать значение 5/3:

$$\frac{\text{Полширина}_{\text{банкомат}}^{5/3}}{\text{Полширина}_{\text{банкомат}}^{5/3} + \text{FWHM}_{\text{ТС}}^{5/3}}$$

Благодаря кампании по проверке Кека и CFHT, а также тому факту, что авторы участвовали в проектировании систем для трех крупных и чрезвычайно крупных проектируемых обсерваторий, стали доступны карты PSF для пяти обсерваторий. На рисунке 8 суммированы результаты тепловизионных наблюдений (несколько наборов данных, скорость ветра и ориентация на точку). Результаты были перемасштабированы, чтобы соответствовать той же атмосфере эталонного места с параметром Фрида r0 = 18 см и длиной волны 0,5 мкм. Смоделированные PSF подтверждают, что приведенное выше выражение для преобразования между FWHM и PSSn является допустимым. Более того, значения Кека и CFHT были независимо оценены как реалистичные, что делает прогнозируемые характеристики проектируемых обсерваторий также реалистичными, в то время как обсерватория Веры Рубин (LSST) находится на завершающей стадии строительства, и первые лучи света ожидаются в следующем году. 2025 г. Обратите внимание, что номинальный общий бюджет ошибок для ELT в PSSn

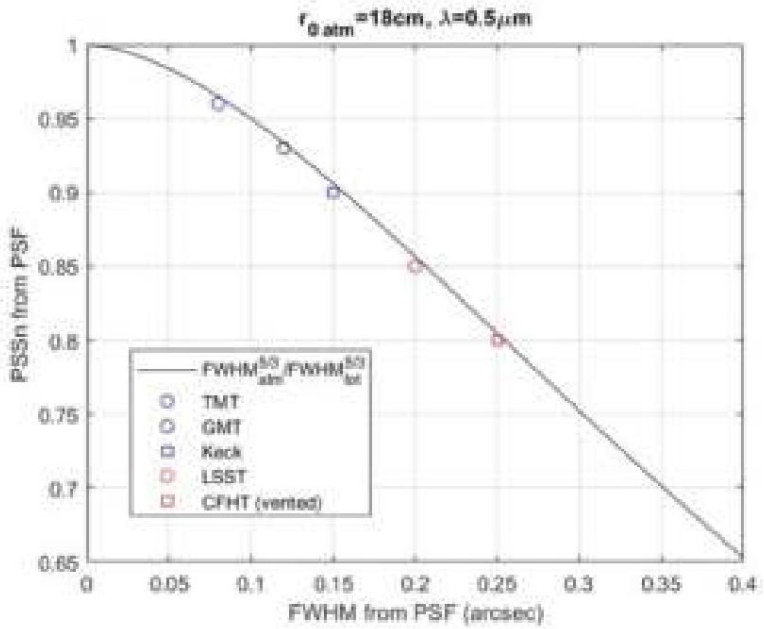


Рисунок 8. Моделирование обсерватории: PSSn и FWHM.

7. Сопряженная теплопередача и твердотельное термическое моделирование.

Как поясняется, целью этих типов моделей является не только оценка поведения тепловой инерции компонентов во времени, но также пространственная изменчивость температуры и возникающая в результате деформация. Таким образом, типичные требуемые исходные данные включают следующее: • Материальные и термические свойства компонентов, включая коэффициент излучения; • Профиль температуры окружающей среды (типичный суточный график, определяемый пользователем, или подмножества стохастической модели);

• Активные тепловые нагрузки (генерируемые компонентами, по возможности временные записи); • Коэффициенты конвективной теплопередачи (из CFD) для поверхностей, контактирующих с воздухом. умэ не моделируется; •

Термическое сопротивление между проводящими компонентами.

Machine Translated by Google

Результаты включают в себя следующее: •

Временные (и пространственные, при желании) записи разницы объемных и/или поверхностных температур. от окружающей среды для каждого компонента сборки;

• Временные и пространственные записи смещений узлов относительно базовой геометрии.

7.1. Зеркальные сборки

Первым и наиболее характерным примером этой категории моделей стала модель TIO Segment Support Assembly (SSA). Это переходная модель, которая включает в себя кондуктивную, конвективную и радиационную передачу тепла между сегментом, сборочной рамой, двенадцатью краевыми датчиками, тремя исполнительными механизмами, соответствующими блоками электроники и окружающей средой.

Более ранняя версия этой модели не включала жидкостный компонент. Недостаток заключался в том, что, поскольку за пределами сегмента не было фактической картины течения, конвективная теплопередача рассматривалась только как параметр. С тех пор модель эволюционировала в свою промежуточную версию, представленную в [58]. Здесь фундаментальное отличие заключается в том, что температура твердого тела и воздуха определяется за сегментом, что устраняет необходимость в информации о коэффициенте теплопередачи или «моделировании петли обратной связи» между CFD и FEA. Таким образом, шлейфы от источников тепла, таких как приводы и электронные коробки, отображаются точно. Для верхнего сегмента используются коэффициенты поверхностной теплопередачи из модели CFD обсерватории. Для самого сегмента используются правильные свойства материала , но для некоторых компонентов сборки, которые не являются на 100% твердыми, плотность регулируется так, чтобы с учетом занимаемого ими объема результирующая масса была правильной. На рисунке 9 изображена решенная геометрия вместе с отклонением температуры поверхности в конце ночи от окружающей среды для окончательной версии модели с повышенной геометрической точностью.

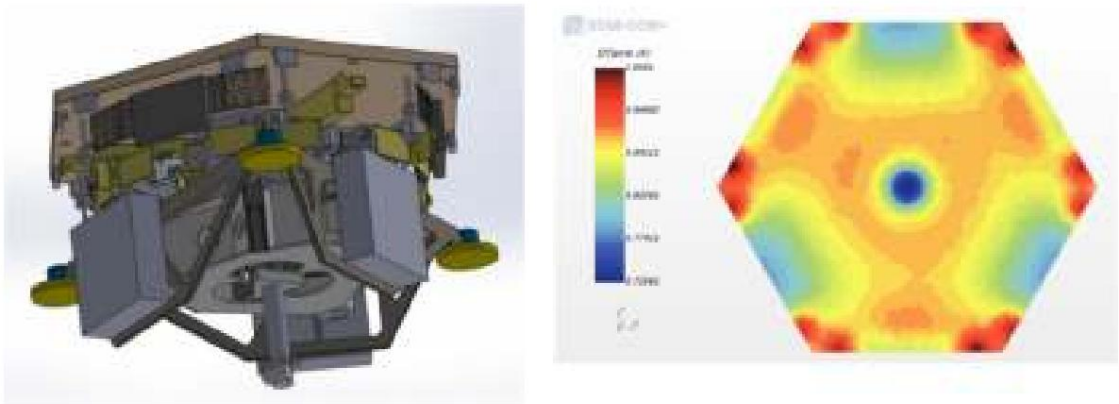


Рисунок 9. Компоненты опорного узла сегмента TIO (слева) и типичное распределение температуры на передней панели (справа).

Сегмент зеркала GMT M1 изготовлен из боросиликатного стекла с плоской задней поверхностью, параболической верхней поверхностью и преимущественно шестиугольными сердечниками (воздушными карманами), соединяющими две стороны. Система терморегулирования M1 (M1TCS) необходима для промывки жил при температуре окружающего воздуха (немного ниже), чтобы как можно точнее отслеживать окружающий ночной воздух. Одноядерные модели сопряженной теплопередачи были разработаны для различной высоты сердечника и длины сопла и смоделированы для различных скоростей потока сопла. Цель состояла в том, чтобы получить коэффициент конвективной теплопередачи (HTC) на поверхностях ядра, который был бы однородным и сопоставимым с коэффициентом передней поверхности зеркала, диктуемым скоростью внешнего ветра, ориентацией телескопа и стратегией вентиляции и полученным из ночной обсерватории CFD. симуляции.

Таким образом, деформация лобового листа сегмента также должна быть минимальной. Воздух кондиционируется блоками обработки воздуха (AHU) в нижней камере камеры M1 и направляется к активным зонам с помощью множества сопел. Основной поток выходит в верхнюю камеру (UP) , отделенную от нижней камеры (LP) изолированной стальной пластиной. Воздух из верхней камеры можно направить обратно в агрегат через воздухозаборники на пластине (замкнутый цикл).

Machine Translated by Google

или выход радиальный, в этом случае воздух внутри помещения используется агрегатами (открытый цикл). Верхняя камера также может быть изолирована от воздуха корпуса или иметь возможность сообщаться с ним через зазор на краю сегмента.

Одноядерные модели сопряженной теплопередачи были разработаны для различной высоты активной зоны и длины сопла и смоделированы для различных скоростей потока сопла, чтобы создать справочную таблицу HTC на переднем листе и эффективности промывки активной зоны. Однако HTC на заднем листе зависит от схемы потока в верхней камере. Итак, затем была разработана модель UP CFD, учитывающая все входы и выходы воздушных путей, а также множество зеркальных распределителей нагрузки (LS) и основных сопел.

В то же время стало очевидно, что для получения деформаций, соответствующих различным вариантам конструкции, необходима трехмерная твердотельная модель всего сегмента, которая берет ожидаемую температуру окружающего воздуха и карты HTC поверхности и сообщает результирующую температуру стекла и последующие поля деформации. , требовалось. Обратите внимание, что сегмент на оси отличается от сегментов вне оси, а это означает, что, хотя стратегия идентична, все ручные и вычислительные усилия дублируются.

Наконец, чтобы подтвердить, что уровень давления и характер потока, создаваемые агрегатами AHU в нижней камере, обеспечивают желаемую однородность скорости и температуры через сопла, была разработана модель LP, которая включала в себя все структурные компоненты влияния, агрегаты AHU и их воздуховоды. электрические шкафы и охлаждающие трубопроводы, приводы и их источники тепла и, конечно же, форсунки.

Подробности структуры GMT можно найти в [18]. На рисунке 10 показан M1TCS.
Блок-схема моделирования с репрезентативными изображениями модели и результирующими картами.

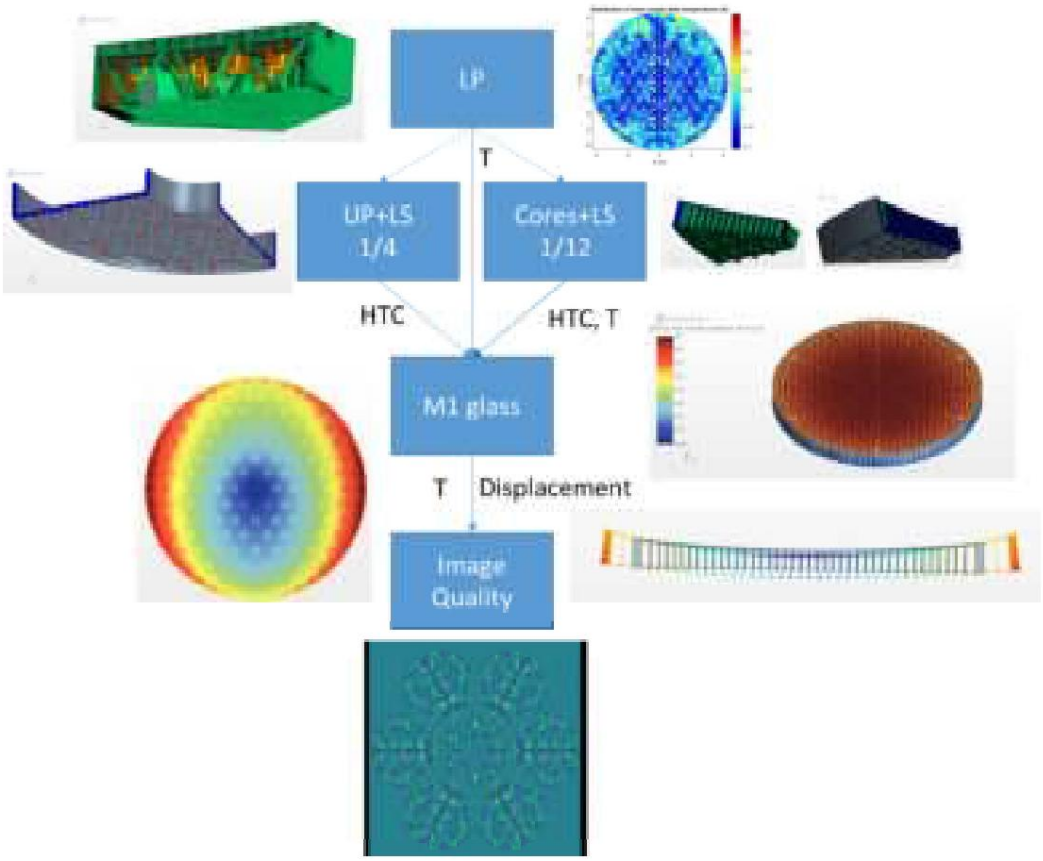


Рисунок 10. Блок-схема моделирования GMT M1TCS.

Адаптивная система вторичного зеркала GMT (ASMS) состоит из семи деформируемых сегментов зеркала класса 1 м, которые предназначены для работы в качестве одного зеркала, и семи шестигранных позиционеров. Каждое зеркало деформируется с помощью 675 приводов, рассеиваемое тепло которых термически контролируется охлаждающей пластиной. Также имеются семь ящиков с необходимыми электронными пла

Machine Translated by Google

активно охлаждаются, а сорок два привода-гексапода — нет. Есть также концентраторы выключателей питания и аккумуляторы, занимающие верхнее пространство между опорными фермами.

Была построена твердотельная тепловая модель сегмента высокого разрешения, включающая гексапод, раму, ящик для электроники, охлаждающую пластину, эталонное тело, ветрозащитную юбку и зеркало [59]. Модель была прикреплена как осевой сегмент к уменьшенной версии модели крепления (верхняя конструкция, сегменты M1, «небо»), чтобы правильно учесть эффекты проводимости и излучения. Остальные шесть сегментов и тридцать шесть приводов были представлены как формы с более грубым разрешением, которые должны были быть включены в модель обсерватории, а их плотности были скорректированы таким образом, чтобы температура их поверхности в течение ночи вела себя аналогично осевой модели. .

Потребность в дополнительной информации, такой как изменчивость показателя преломления в местах расположения датчиков на краях сегмента и ожидаемый перепад давления на деформируемом зеркале, привела к модификации и без того точной модели, чтобы правильно разрешить зазор в 100 нм между зеркалом и эталоном. тела, сами исполнительные механизмы в виде цилиндров, а также зазоры между ними и опорным телом.

После проверки 60 имеющихся в наличии корпусов CFD обсерватории было выполнено моделирование для нескольких скоростей ветра при ожидаемом угле падения между ветром и сегментом и были получены карты перепада давления. Затем моделирование было выполнено с сегментами более грубого разрешения, включенными в модель обсерватории, которые предоставляют только карты фронтального давления. Функция преобразования была сформулирована таким образом, чтобы можно было создать карты перепада давления для всех 60 случаев, которые охватывают весь диапазон интересующих скоростей и направлений ветра.

Что касается среды краевого датчика, то в местах расположения датчиков из 60 случаев были извлечены 120-секундные записи давления и температуры с частотой 20 Гц и рассчитана пространственно-временная статистика показателя преломления. Эти выходные данные являются ценными входными данными для модели совмещения сегментов.

На рисунке 11 показано типичное распределение коэффициента давления при срединном ветре. на поверхностях сегмента ACMC (вид полуразреза).

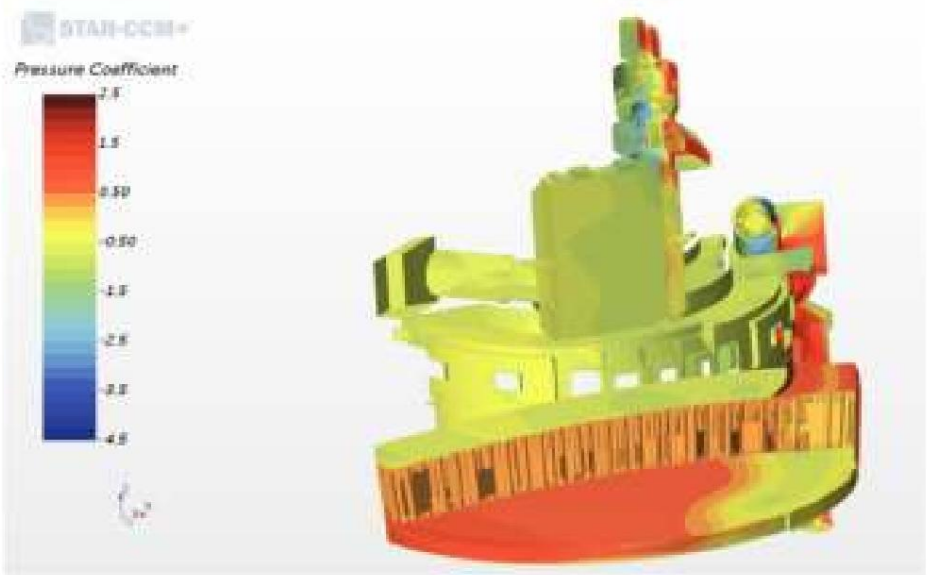


Рисунок 11. Модель GMT ASMS и характерное распределение коэффициента давления.

Воздействие заключается в следующем:

• Проверка тепловых требований к оптическим сборкам; • Оценка условий бюджета ошибок: зеркальное зрение, термическая деформация сегмента и купольное зрение; • Обеспечивает реалистичные ожидаемые формы зеркал (тепловая деформация, деформация, вызванная давлением) для коррекции и фазировки привода.

Machine Translated by Google

7.2. Системы корпусов

Конструкция корпуса TIO имеет двойную оболочку, которая создает промежуточное пространство между внешней облицовкой и внутренней изоляцией. Большая часть тепловой массы конструкции корпуса и источников тепла, связанных с его работой, находится в этом объеме. Требуемый уровень изоляции может быть недостижим везде (например, вентиляционные двери), а уплотнения и зазоры могут привести к нежелательной инфильтрации. Приводы азимута телескопа расположены над наблюдательной площадкой. Напротив, в конструкции корпуса GMT используется однокорпусная геометрия, при которой вся тепловая масса конструкции находится внутри объема корпуса. Большинство источников тепла корпуса находятся за изоляцией, а приводы азимута телескопа находятся под наблюдательной площадкой.

Модели переходных процессов были разработаны для оценки тепловой среды в этих промежуточных пространствах и исследования потенциальных стратегий смягчения последствий. Модели включают все основные компоненты и ожидаемые источники тепла, такие как тепловая инерция стальных и бетонных конструкций, тепловые нагрузки от электрических панелей и взаимодействие с внешней средой и землей. Особое внимание уделяется азимутальным коридорам ограждения из-за большой выходной мощности привода и тепловой массы тележки в замкнутом пространстве с ограниченными и/или дорогостоящими вариантами вентиляции. Задача состоит в том, чтобы поддерживать температуру ниже заданного предела с учетом характеристик изоляции и давления на уровне, который исключает утечки в камеру наблюдения либо через уплотнения, либо через вентиляционные отверстия корпуса, когда он открыт.

В частности, модель TIO [16] состоит из следующего: наружная обшивка корпуса, внутренний воздух в изолированных объемах (крышка, азимутальный коридор, фиксированное основание, вентиляционное пространство) и изоляция. Около 100 основных электрощитов решены в виде блоков. Важные источники тепла рассматриваются как твердые тела с внутренним тепловыделением, а остальные — как границы с заданным поверхностным тепловым потоком. Несмотря на то, что в сборочной модели рассеивание тепла от привода кожуха рассматривается как объемный источник, величина этого источника как конвективная теплопередача получается из отдельных моделей тележек с азимутом и крышкой, например, той, которая изображена на рисунке 12.

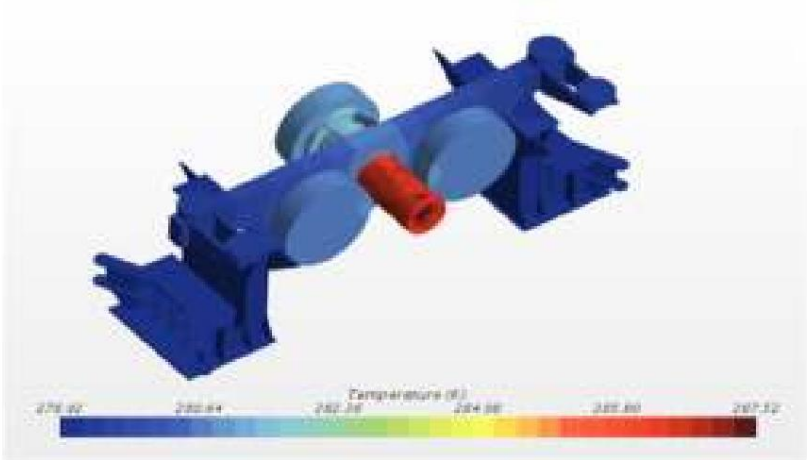


Рис. 12. Азимутальная тележка корпуса TIO с приводным двигателем: типичное распределение температуры поверхности в ночное время.

Модель GMT состоит из двух частей: модели системы вентиляции пирса (PVS) (внешнее и внутреннее фиксированное опорное кольцо, опора, намотка кабеля, азимутальная направляющая телескопа, азимутальный диск телескопа, изоляция, пористый воздух) и модели механического коридора (изоляция, азимутальная гусеница, тележки, тормозные массы, четыре привода и электрические панели). На рисунке 13 представлены модель PVS и типичное стационарное распределение темп

Machine Translated by Google

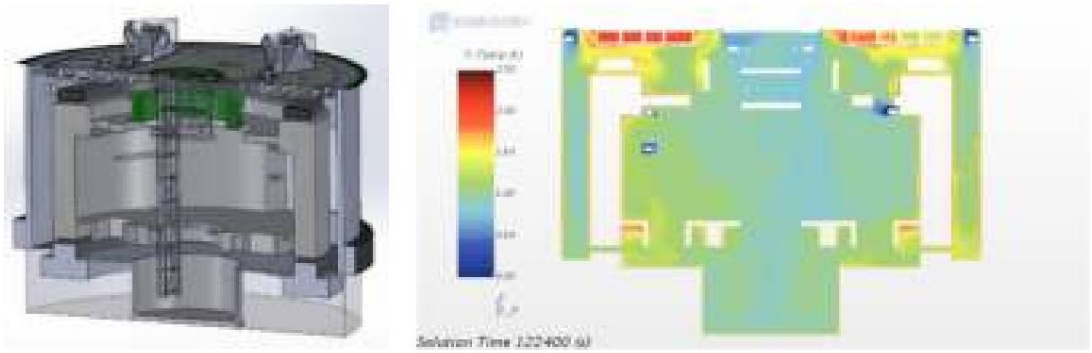


Рисунок 13. Модель GMT PVS (слева) и установившиеся контуры температуры воздуха в средней плоскости (справа).

Воздействие заключается в следующем:

• Проверка требований к отводу тепла от корпуса и характеристик изоляции; • Выбор конструкции: опция активного/пассивного охлаждения приводов шкафов и электрических шкафов.
и скорость потока.

7.3. Структура телескопа

Термическое поведение конструкции телескопа ELT (STR) и подсистем, установленных на STR, зависит от тепловой нагрузки системы и тепловых свойств материалов компонентов и окружающей среды, а также от их взаимодействия посредством конвекции, проводимости и излучения.

Устаревшая модель TIO 2010 года [60] была основана на одномерных элементах FEA.
Полученные смещения были переданы в программу TIO Merit Function Routine (MFR), которая преобразовала их в перемещение и вращение оптических поверхностей. Они, в свою очередь, умножались на матрицу оптической чувствительности TIO, которая выдает соответствующую ошибку наведения. Таким образом, можно оценить тепловые характеристики конструкции на соответствие требованиям и предоставить рекомендации по проектированию. Кроме того, можно было бы разработать стратегии коррекции теплового дрейфа и LUT.

Последняя разработанная модель 2014 г. отслеживает суточные изменения температуры в СТО и соответствующие деформации [61]. Эта модель является трехмерной и учитывает толщину элементов конструкции. Он поддерживает дневное моделирование и переменные углы возвышения. Он также включает в себя все подсистемы и компоненты, термически связанные с конструкцией, а также рассчитывает их температуру. Наконец, он вводит «небесное» тело размером с апертуру, что позволяет правильно рассчитать связь излучения с СТО. Модель состоит из ячейки M1, башни M3 и нижней трубы как единого корпуса, вертикальных шеек, а также верхней трубы и крестовины как единого корпуса.

В качестве более позднего дополнения он также включает в себя азимутальную конструкцию под платформой Нэсмит, приводы подъема и магниты, а также гидростатические подушки. Контактные поверхности между отдельными телами эквивалентны сварным поверхностям. Системы перемещения и очистки сегментов исключены, а также несколько тонких решетчатых платформ. Также включены дополнительные компоненты, которые соединяются с конструкцией только посредством излучения: узловые коробки системы управления M1, CCA в виде единого блока эквивалентного объема, M1 в виде единого корпуса (без зазоров между сегментами), M3 и M2. сборки, шкафы LGSF, M3 и топовой электроники, секция канала оптики передачи луча над крестовиной и телескоп запуска лазера. Соответствующий/желаемый уровень контактного термического сопротивления между этими компонентами и конструкцией является параметром. Рисунок 14 иллюстрирует термическую деформацию конструкции телескопа в конце ночи при средних ожид

Эта модель будет пересмотрена в будущем, и исследование будет обновлено, чтобы отразить последние разработки.

Недавно для крепления GMT была разработана система моделирования аналогичной точности и функциональности [62]. Модель телескопа состоит из ячеек сегмента M1, вертикальных шеек (C-образных колец) и гидростатических подушек, вращателя григорианского инструмента (GIR),

Machine Translated by Google

три фермы вторичной опоры и верхняя часть телескопа с адаптивным вторичным зеркалом . Он также включает в себя шкафы для электроники, приводы, оптические перегородки и другое оборудование , которое может быть термически связано со структурой посредством излучения или проводимости. Однако основа состоит из двух отдельных моделей: тепловой для расчета нестационарной температуры и одной FEA для расчета стационарной деформации. Трехмерные снимки температурных полей из тепловой модели, соответствующие различным частям ночи , наносятся на карту в модели FEA для оценки результирующей деформации относительно начального состояния нулевой деформации, номинально во время выравнивания телескопа перед закат Деформация всей конструкции доступна, но смещения в точках крепления, границе между конструкцией и оптикой, дополнительно обрабатываются оптической моделью GMT для получения результирующего оптического рассогласования. Цель состоит в том, чтобы в конечном итоге сопоставить информацию датчика температуры конструкции через пространственный градиент с оптическим смещением и разработать LUT корректирующих регулировок в зависимости от внешних условий окружающей среды. На рисунке 15 изображены тепловая модель и модель FEA.

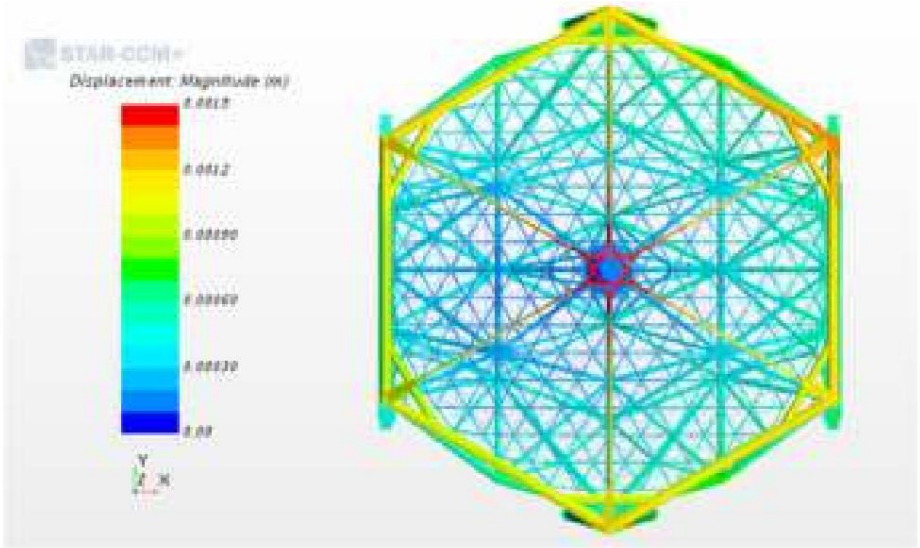


Рис. 14. Величина термической деформации конструкции телескопа ТИО (м) через 12 часов после захода солнца.

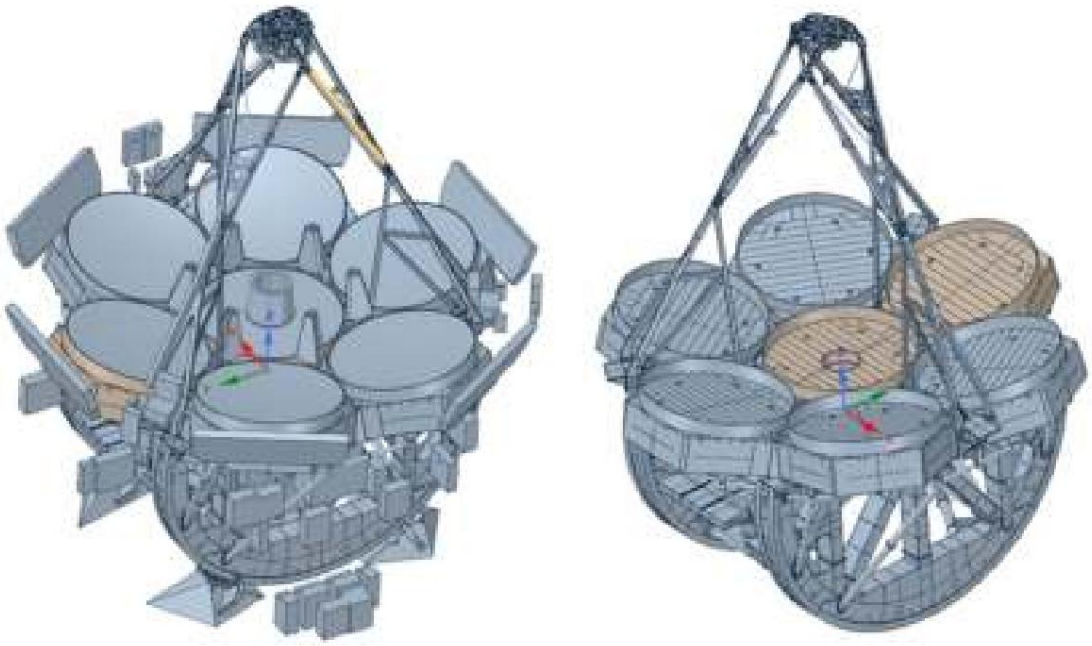


Рис. 15. Тепловая (справа) и деформационная (слева) модели структуры телескопа GMT.

Machine Translated by Google

Влияние заключается в

следующем: • Проверка требований: минимальное расстояние между сегментами, остаточная ошибка слежения за небом , ошибка наведения телескопа, максимальный ход привода и максимальное смещение заднего фокусного расстояния;

• Обеспечивает реалистичные ожидаемые температурные смещения для тестирования стратегии коррекции;

• Обеспечивает входные граничные условия для CFD-моделирования производительности обсерватории.

7.4. Подсистемы/Компоненты

7.4.1. Подъемные приводы

Моделирование приводов подъема началось в 2014 году с отдельной модели для оценки необходимой скорости охлаждающего потока, чтобы поверхности привода не превышали температуру, вредную для обзора купола, а катушки привода не превышали максимально допустимую температуру.

Он состоит из четырех основных компонентов: опорной конструкции, катушек, силовых механизмов и магнитов. Это переходная модель, которая включает в себя кондуктивную, конвективную и радиационную передачу тепла между компонентами и окружающей средой. Позже эта модель была включена в Модель структуры телескопа TIO, как показано на рисунке 16.

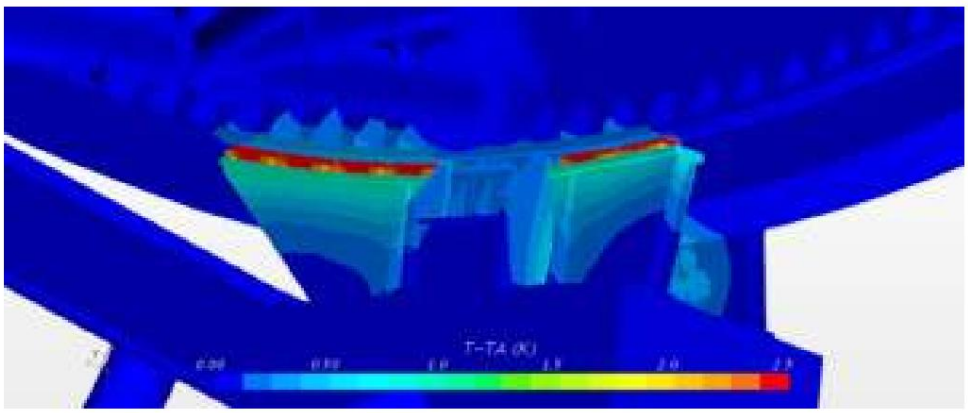


Рис. 16. Детали модели привода возвышения TIO и отклонение температуры поверхности от окружающей среды.

Воздействие заключается в следующем:

• Проверка требований к скорости охлаждающего потока приводов EL и максимальной температуре теплообменника; • Обеспечивает входные граничные условия для CFD-моделирования производительности обсерватории.

7.4.2. Установка TIO Laser Guide Star (LGSF)

В 2013 г. была разработана модель оптического короба передачи пучка LGSF [63]. Это решило проблему толщины канала и зеркал передачи лазерного луча, а также их опорной конструкции для большей части пути лазерного луча, который подвержен значительным температурным градиентам и/или большим вертикальным изменениям. Также решен воздух внутри воздуховода и его тепловое взаимодействие с вышеперечисленными компонентами посредством сопряженной теплопередачи. Также было зафиксировано тепловое взаимодействие лазерного луча с оптикой. Он не включал путь от восьми лазеров к ферменной решетке наведения (TPA) или путь внутри лазерного пускового телескопа (LLT).

Модель послужила руководством для группы разработчиков LGSF и первой оценкой стабильности лазерного луча и соответствия требованиям.

По мере развития конструкции телескопа с течением времени для LGSF был предложен новый оптический путь. И исходный, и новый оптические пути сравнивались по оптическим, механическим и другим критериям, связанным с характеристиками телескопа. Критерии оптических характеристик включали анализ первого порядка оптической турбулентности, создаваемой внутри воздуховодов. Новый предложенный путь продемонстрировал аналогичное тепловое поведение, но значительно уменьшил оптическую турбулентность и был принят. Изменения конструкции в результате исследования включали увеличение расстояний между некоторыми оптиками и аэродинамическое изменение формы оболочек вокруг передающей оптики. Первоначальная оценка джиттера луча находилась в пределах запланированных значений.

Machine Translated by Google

В период с 2021 по 2023 год модель была обновлена и теперь включает в себя решетку лазерного стенда (LB), верхнюю сборку (TE) и LLT [64]. Более высокая геометрическая точность также была достигнута за счет дополнительного оборудования и опорной конструкции. Модель была разделена на пять подмоделей (массив LB, TPA, BTD, TE, LLT), каждая из которых дополняет следующую с точки зрения скорости потока и температуры воздуха. Оптический путь был разделен на несколько сегментов, чтобы выявить основные причины дрожания луча и ошибки фокусировки, вызванные тепловой деформацией оптики, особ Джиттер луча рассчитывался как функция времени в течение ночи как на низкой, так и на высокой временной частоте. Дополнительные автономные модели лазерной головки (LH), шкафов стандартной лазерной электроники (LE) и топовой электроники (TE.EL) были разработаны для проверки ожидаемой эффективности охлаждения и температуры внешней поверхности. Рисунок 17 иллюстрирует поток информации моделирования с репрезентативными изображениями модели и результирующими контурами оптической турбулентности.

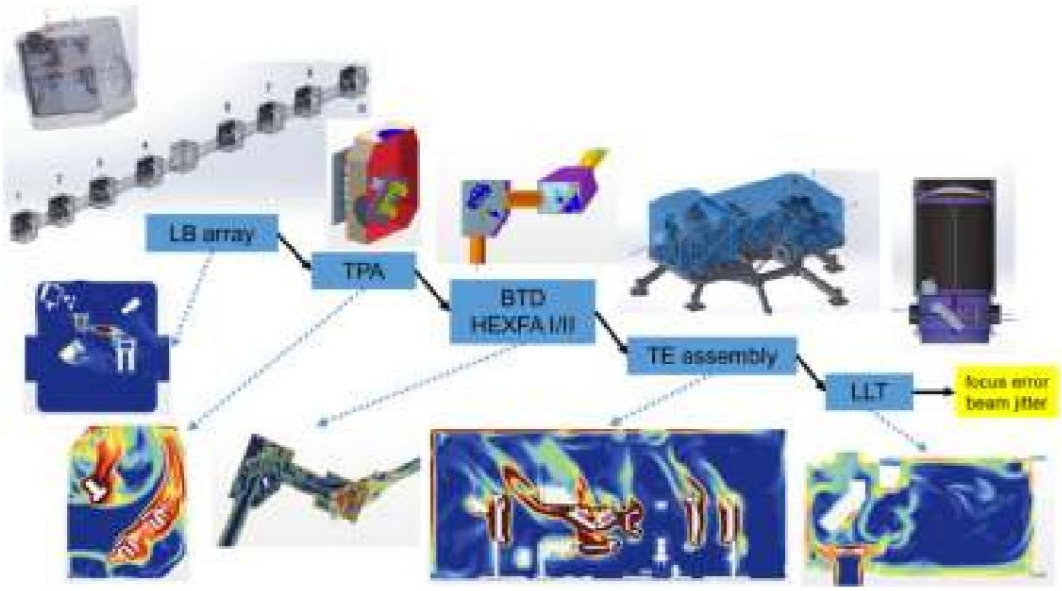


Рисунок 17. Блок-схема моделирования TIO LGSF.

Воздействие заключается в следующем:

• Изменения конструкции для минимизации турбулентности на траектории и улучшения охлаждения линз; • Оценки джиттера луча и бюджетной ошибки фокусировки.

7.4.3. Электронные/электрические шкафы

Это переходные модели, в которых основное внимание уделяется форме и объему конкретного компонента, который обычно включает в себя внутренний источник тепла. Объем может включать в себя несколько частей из разных материалов, а также воздух. Следовательно, для улавливания их тепловой инерции требуются только общая масса и средняя теплоемкость. Их основная цель — обеспечить распределение результирующей температуры поверхности и времени, которое требуется внутренне рассеянному теплу для достижения поверхности при переменном источнике тепла и внешней среде

Первоначально они разрабатывались как отдельные модели для нескольких компонентов, но в последнее время их стали регулярно включать во все сборочные модели; это типичный способ обработки среднего компонента источника тепла.

8. Поддержка моделирования CFD

Поддержка моделей CFD — это модели ограниченного применения, разработанные для ответа на конкретные вопросы проектирования и/или моделирования. Они могут быть устойчивыми или нестационарными и обычно соответствуют изолированным компонентам.

Machine Translated by Google

8.1. Дефлекторы апертуры корпуса TIO

Дефлекторы апертуры TIO представляют собой уникальную функцию, разработанную для защиты верхней части телескопа от ветра в результате уменьшения диаметра корпуса до необходимого минимума, но они также действуют как уплотнение между корпусом и апертурной шторкой. .

Рисунок 18 иллюстрирует влияние дефлекторов на уровни скорости вокруг верхнего конца телескопа в ходе раннего моделирования стационарного состояния на этапе концептуального проектирования в 2006 году. Это было эквивалентно увеличению диаметра корпуса примерно на 2,5 м. Дефлекторы имеют радиус ~5 м, хорду ~5 м (от кончика до шарнира) и проекционную длину по нормали к плоскости раскрытия ~3,5 м. В развернутом состоянии угол между хордой и плоскостью раскрытия составляет 45 . На этапе детального проектирования самая низкая структурная мода была оценена примерно на уровне 5 Гц. Как с точки зрения усталости, так и с точки зрения выживаемости в 2011 году была оценена частота образования естественных вихрей и ее близость к нижним структурным модам.



Рис. 18. Влияние конструкции дефлектора TIO на уровни скорости вокруг верхнего конца телескопа (шкала скорости нормализована по значению против ветра).

Была разработана детальная CFD-модель изолированного одиночного дефлектора с углом атаки 30 (угол, который , как ожидается, будет определять максимальную частоту сброса), и было выполнено нестационарное моделирование как для медианного, так и для условий выживания ветра [58]. Было рассчитано число Струхаля, а также средняя и динамическая составляющие си В условиях выживания частота линьки приближается к первой структурной моде. Результаты могут быть использованы в качестве входных данных для модели дефлектора FEA для определения влияния ветровой нагрузки и исследования модификаций конструкции, если это необходимо.

8.2. Паучьи балки

Термин «паук» относится к тонкой многочленной ферменной конструкции, которая поддерживает сборку вторичного зеркала телескопа и присутствует во многих существующих обсерваториях.

В 2012 году была представлена изолированная модель одинарной крестовидной балки размером 0,25 × 0,6 × 20 м. разработан для исследования нескольких допущений моделирования.

Исходная параметрическая модель, используемая для оценки дрожания ветра на основе устойчивых входных данных CFD, содержала предположения о коэффициенте сопротивления луча, наклоне спектра сил и масштабе длины декорреляции силы вдоль луча. Моделирование обеспечит точные оценки этих предполагаемых значений, а также пространственное и временное разрешение, необходимое для правильного решения физики.

Нестационарное моделирование было выполнено с использованием различного разрешения поверхности, скорости ветра, интенсивности турбулентности против ветра, а также интегрального масштаба длины и частоты дискретизации для потоков, перпендикулярных как широкой, так и узкой сторонам луча, а также потока под углом 30 (комбинация). Собранные результаты включали записи давления в выбранных местах и интегрированные записи силы, а также средние и среднеквадратичные коэффициенты сопротивления и подъемной силы.

Результаты показали, что параметрическая модель недействительна для местных скоростей ветра выше 1 м/с. Это также подтвердило предположение о том, что интегральный спектр сил вокруг твердого объекта имеет наклон более крутой, чем у точечного давления, из-за эффекта аэродинамического затухания. Соответствующее разрешение поверхности, которое фиксирует образование вихрей на ожидаемых частотах, было определено и принято для всего телескопа ТИО.

Machine Translated by Google

конструкция над шестигранным кольцом, блоком M2 и телескопом для запуска лазера (LLT). Разрешение нижней трубки также было соответствующим образом масштабировано. Нестационарное моделирование напрямую предоставит данные о силе для оценки джиттера изображения в будущем. Аналогично моделируется верхняя конструкция телескопа GMT .

8.3. Вибрация трубы, вызванная потоком

Явление вибрации, вызванной потоком, хорошо известно и потенциально проблематично для ЭЛТ, особенно в режиме АО, поскольку система охлаждения состоит из множества труб и колен.

В целях составления бюджета погрешностей вибрации в период с 2013 по 2021 год было разработано несколько простых моделей потока в трубах и клапанах в рамках совместных усилий TIO-GMT по исследованию величины динамической силы, которую турбулентный поток оказывает на трубу из-за трения или разделения. а также его спектр. Сначала рассматривался полностью развитый турбулентный случай прямолинейного течения в трубе , который обеспечил входные условия для оставшейся части моделирования.
К ним относятся изгиб на 90° и S-образная труба, два последовательных изгиба на 90°. Также учитывались различные диаметры труб, углы шаровых кранов, радиусы изгиба и скорости потока.

Результаты показали, что один клапан может вызвать более сильные вибрации, чем многие футы трубопровода. Сеть трубопроводов должна быть спроектирована так, чтобы углы клапанов оставались в пределах порогового значения (<30°). Несмотря на то, что частота отрыва турбулентного потока при прохождении изгиба 90° может достигать 200 Гц, абсолютная величина результирующей динамической силы намного меньше ожидаемых колебаний давления насоса.

8.4. Выхлоп объектов саммита

В обсерваториях используется несколько холодильных систем, используемых для дневного кондиционирования воздуха в помещениях и охлаждения приборов, оптики, гидростатических подшипников телескопов и Управление отводом тепла в холодильном цикле может иметь важное значение для IQ. Зачастую отвод тепла происходит в здании объекта, примыкающем к корпусу телескопа. Расположение и ориентация вытяжных отверстий выбирается с учетом преобладающего направления ветра. Этот подход основан на статистике и может быть не очень эффективным для бимодальных или мультимодальных ветровых условий. Более дорогое решение предполагает строительство туннеля, который будет отводить теплый воздух от обсерватории и оптического пути. Оба участка TIO и GMT являются бимодальными, с ориентацией ветра примерно СВ/ЮЗ.

Таким образом, охладитель здания сооружений на высшем уровне TIO расположен в северо-западном углу, но, как ожидается, он будет выбрасывать теплый воздух в непосредственной близости от обсерватории. Ожидается, что при низкой скорости ветра и при определенных направлениях ветра этот шлейф может подняться достаточно высоко и помешать оптическому пути, прежде чем он успеет раствориться в воздухе. Однако ожидается, что шлейф может стать проблемой только при западном ветре и при малых углах места. При восточном ветре шлейф рассеивается еще до пересечения оптического пути TIO, даже при небольших скоростях ветра (хотя полное отсутствие ветра никогда не моделировалось).

В 2010 году было проведено исследование по оценке влияния шлейфа на эталонную картину атмосферы. Были обработаны три устойчивых случая CFD для низкой (2,5 м/с), средней (6,5 м/с) и высокой скорости ветра (10 м/с) с запада (270°). Предполагается, что результаты справедливы и для западных ветров от 225° (чаще) до 315° (реже). Зенитный угол телескопа был зафиксирован на уровне 33 . Номинальный расход 150 000 кубических футов в минуту привел к скорости выхлопа 2,5 м/с и температуре примерно на 10,5 K выше температуры окружающей среды. Значения соответствуют агрегату с воздушным охлаждением.

Различные оптические пути были обработаны для оценки эквивалентного r0 первых 50 м за ограждением. Рассматривались три азимутальных (315 , 0 , 45) угла телескопа и три зенита (65 , 55 , 45). Для каждой конкретной ориентации телескопа рассматривались три траектории: X = 0 м и Y = 15 м, Y = 0 и Y = +15 м в системе координат телескопа. Первоначальные результаты показали, что значительное воздействие обнаружено только для зенитного угла 65 и только для трассы Y = 15 м.

По мере развития конструкции общая потребляемая мощность резко возрастала, и требовался компромисс между температурой и скоростью потока. Новое исследование было проведено

Machine Translated by Google

сформированы в 2020 году [16] с учетом различных комбинаций перепадов температур выхлопных газов и расходов. В этом исследовании были внесены два основных изменения. Моделирование было нестабильным, поскольку достижения в моделировании GL, как объяснялось в предыдущих разделах, позволили более точно оценить ожидаемую полувысоту вдоль трассы. Ожидается, что выхлопная система будет иметь жалюзи, которые можно оптимально расположить, чтобы минимизировать эффект шлейфа. Поэтому был выбран угол вниз 45 . Основываясь на предыдущем опыте, исследование было сосредоточено на западных ветрах скоростью 2 м/с и обработке азимутального сектора 315 –45 .

Новое исследование подтвердило, что только самая нижняя часть оптического пути подвергается значительному воздействию при зенитном угле 65 . Также было подтверждено, что шлейф не попадет в обсерваторию через вентиляционные отверстия. Был выбран приемлемый перепад температур на 15 K выше температуры окружающей среды. Однако при этой температуре качество изображения ухудшается по мере увеличения расхода, что предполагает возможный угол выхлопа и другие геометрические корректировки. В среднем при слабом западном ветре и на небольших высотах худшая видимость будет наблюдаться при направлении на се

В целом кажется, что шлейф каким-то образом пересекает оптический путь телескопа, когда (а) направление ветра составляет от 225° до 315° , (б) скорость ветра меньшеноминальной 4,5 м/с и (в) азимутальный угол телескопа составляет от 300 до 60 , а зенитный угол телескопа превышает номинальный 50 . Исходя из стохастической модели, мы заключаем , что это происходит примерно за 0,4% времени наблюдений.

Сухие охладители GMT расположены на востоке-юго-востоке корпуса, дальше и под гору.
Их поток выхлопных газов также был включен в CFD-модель обсерватории. Несмотря на то, что они отводят тепло вертикально и с более высокой скоростью (5 м/с), вероятность того, что это повлияет на оптический путь, еще меньше. Ни одно из 60 базовых моделей, использованных при оценке производительности, не предполагает какого-либо взаимодействия оптического пути и шлейфа.

Воздействие заключается в

следующем: • Проверка требований: разница температур выхлопных газов холодильной машины и температуры окружающей среды, скорость потока, ориентация и потенциальные геометрические изменения вблизи зоны выхлопа оборудования.

8.5. Механическое помещение и служебный туннель TIO

В 2015 году было разработано расширение CFD-модели обсерватории, включившее отверстие для прокладки кабеля на наблюдательной площадке и служебный туннель, а также подсобные и технические помещения.

Целью данного исследования было изучение направления потока в проеме для кабельной стяжки и внутри инженерного туннеля, ожидаемых температур внутри туннеля, технических и технических помещений, а также адекватности расчетного расхода внутри туннеля для опасного газа. удаление.

Моделирование было выполнено для конфигурации, которая обеспечивала бы уровни давления внутри кожуха достаточно низкие, чтобы вызвать потенциальное изменение направления потока в туннеле или локально в отверстии для обмотки кабеля (средняя или высокая скорость ветра, закрытое вентиляционное отверстие, наведение на зенит).

В нормальных условиях наблюдения через оплетку кабеля происходит только теплодиффузия , которая фактически не влияет на оптический путь. Однако при высоких скоростях ветра поток проходит через отверстие для обмотки кабеля внутрь корпуса. Туннельная труба газоотвода не должна выходить в подсобное помещение, а должна быть подсоединена к вытяжному каналу подсобного помещения. Чтобы предотвратить утечку тепла через помещения и в туннель, скорость потока выхлопных газов из технического помещения должна быть на 15 % выше, чем скорость потока на входе в подсобное помещение.

В 2021 году модель была пересмотрена и значительно расширена, чтобы отразить изменения в конструкции и повысить точность воспроизведения [16]. Дополнения включали дверь в переборке, которая разделяет объем туннеля во время пожара, препятствия для опор и кабелей, а также бетонные опоры и фундаменты. Дополнительные цели заключались в том, чтобы оценить влияние закрытия двери переборки на структуру потока туннеля и влияние направления отработанного туннельного воздуха в механическое помещение (в отличие от его направления непосредственно в систему жидкостного охлаждения; мы уже решили не выпускать воздух из туннеля). в подсобном помещении).

Исследование подтвердило, что закрытие переборочной двери не окажет воздействия (туннельный поток не достигает подсобного помещения). Оно также показало, что направление туннельного воздуха в механическое помещение может снизить температуру выхлопных газов на 2–4 K. Наконец, было подтверждено

Machine Translated by Google

ожидаемый ночной уровень температуры выхлопных газов, хотя в первые два часа после захода солнца этот уровень будет значительно выше из-за тепловой инерции и времени выполнения объемной промывки (дневная нагрузка значительно больше).

Воздействие заключается в следующем:

• Проверка требований: знак расхода на проеме кабельной обмотки, скорость туннельного вентилятора и выхлопных газов, место выброса туннельного газа, температура выхлопных газов в механическом помещении и температура окружающей среды вокруг оборудования.

8.6. Сегментное ионно-лучевое моделирование

Некоторые телескопы с сегментированными зеркалами (например, E-ELT, TIO) используют ионно-лучевое моделирование (IBF) для приведения сегментов M1 к их окончательным характеристикам. Во время этого процесса, который может длиться много часов, температура сегмента значительно повышается. Клеевые соединения в задней части сегмента могут ослабнуть, если их температура превысит определенное значение.

Переходная тепловая модель процесса IBF была разработана для TIO в 2020 году с целью иметь возможность дешево протестировать различные схемы сканирования, чтобы оптимизировать процесс и минимизировать повышение температуры [65]. Измерения температуры во время экспериментов IBF для TIO использовались для проверки модели. Измерения состояли из калибровочного теста на небольшом диске-образце (смоделированном) и трехсегментных прогонов (два из которых были смоделированы), соответствующих различным схемам сканирования и скоростям.

Одним из ключевых аспектов модели является реализация потока ионного пучка, приходящего на поверхность сегмента. Это достигается с помощью функции распределения Гаусса либо на поверхности, либо в объеме заданной толщины. Другими важными физическими явлениями, которые следует учитывать, являются диффузное излучение ионной пушки в качестве источника инфракрасного излучения, пропускаемость через стекло и потенциальное отражение излучения на окружающих опорных поверхностях. Несмотря на некоторые неопределенности, был определен первоначальный набор входных данных, который мог бы удовлетворительно предсказать максимальную ожидаемую температуру в задней части сег

8.7. Шестиугольный сегментный

профилометр В некоторых существующих и будущих обсерваториях используются сегментированные главные зеркала, состоящие из шестиугольных сегментов. Чтобы проверить окончательные характеристики этих сегментов, необходимо провести оптические метрологические измерения. Для конкретного типа измерений — лазерного профилометра — поставщик TIO предложил специальную камеру.

В 2012 году была разработана модель для исследования относительной величины тепловых эффектов, таких как деформация сегмента из-за неравномерного распределения температуры в испытательной камере и переменного показателя преломления вдоль пути лазера.

Он состоит из следующих компонентов: лазерный зонд, внешняя испытательная камера, стеклянные перегородки, сегмент, опорная конструкция и воздух внутри испытательной камеры. Это переходная модель, которая включает кондуктивную, конвективную и радиационную передачу тепла между компонентами и окружающей средой. Были рассмотрены две конфигурации активной вентиляции испытательной камеры (параллельная и противоточная), получены результаты и предложены возможные стратегии уменьшения ошибок.

8.8. Заводские приемочные испытания

Чаще всего условия внутри завода или лаборатории, где будут проводиться окончательные приемочные испытания компонента обсерватории, отличаются от условий на самом месте обсерватории. Иногда необходимо установить отдельный набор требований: если производительность во время заводских испытаний равна X, то производительность в горах должна быть Y.

В таких случаях для соединения этих двух элементов используется модель. Возьмем в качестве примера сборку «воздушный нож» телескопа Дэниела К. Иноуе Солара (DKIST). Это ключевой компонент тепловой системы, который выполняет двойную функцию: вентиляцию потолка лаборатории Coude и служит связующим звеном между лабораторией и окружающей средой с помощью воздушной завесы.

Во время заводских приемочных испытаний визуализация потока воздушной завесы показала, что поток отклоняется вверх, что указывает на неожиданный градиент давления, что было подтверждено датчиками давления между нижней частью узла и полом завода. Это было

Machine Translated by Google

выдвинули гипотезу, что крупномасштабные водовороты, возникающие в результате изменения направления потока воздушного ножа из-за близости пола, могли вызвать повышенное давление в измеренных местах. Фактическая CFD-модель сборки в конфигурации установки обсерватории предполагала, что воздушный нож будет соответствовать всем требованиям к производительности или превосходить их [66].

9. Видение CFD 2030

Из предыдущих разделов очевидно, что возможности моделирования аэротермических потоков с использованием CFD быстро развивались за последние два десятилетия и фундаментально изменили процесс проектирования аэрокосмической отрасли. Расширенные возможности моделирования не только позволяют снизить требования к наземным (и летным) испытаниям, но также обеспечивают дополнительную физическую информацию и позволяют создавать превосходные конструкции при сниженных затратах и рисках. Несмотря на значительный успех, надежное использование CFD остается ограниченным небольшой областью рабочего диапазона, отчасти из-за неспособности современных методов точно и/или эффективно прогнозировать турбулентные, разделенные потоки. В качестве подходящего примера упомянем начавшиеся в 2015 году усилия по предсказанию асимптотического значения PSSn с высоким разрешением в контексте тепловидения [43]. Несмотря на то, что исследование количественной оценки неопределенности, наконец, было проведено с удовлетворительными результатами [28] , а недавние усилия E-ELT по выявлению локализованных эффектов без разрешения полной обсерватории также дали реалистичные результаты [67], состояние все же можно резюмировать в следующих строках: «Оценка локального тепловидения, выраженная в метрике PSSn, похоже, не сходится с пространственным разрешением на пределе осуществимой или, скорее, разумной вычислительной мощности. Степень, в которой это явление носит численный характер и в которой мелкомасштабные вклады могут быть параметризованы и учтены, все еще изучается. Были разработаны методологии для прогнозирования асимптотического значения за пределом целевого р
Однако предел погрешности, в пределах которого это может быть достигнуто, вероятно, превышает желаемую точность для проведения анализа чувствительности отдельных источников умеренного тепла. Более того, временная изменчивость метрики также превышает желаемую точность».

Ученые-вычислители призваны ответить, достигла ли CFD своих пределов или же дальнейшие инвестиции в исследования должны сделать CFD точным, эффективным и достаточно надежным, чтобы обеспечить будущие революционные достижения в производительности аэрокосмической системы (в нашем случае обсерватории) и обеспечить проверку путем анализа. При спонсорстве НАСА компании Boeing, Pratt & Whitney, Стэнфордский университет, Массачусетский технологический институт, Университет Вайоминга и Национальный центр суперкомпьютерных приложений недавно провели исследование CFD Vision 2030 [68].

Исследование представляет собой дорожную карту для развития таких технологий, как высокопроизводительные вычисления (HPC), физическое моделирование, алгоритмы и численные методы, генерация геометрии и сеток, извлечение знаний, многодисциплинарный анализ и оптимизация (MDAO) с количественными неопределенностями. и экспериментальное тестирование для кампаний по вычислительной проверке. В рамках Американского института аэронавтики и астронавтики (AIAA) был создан Комитет по интеграции CFD Vision 2030 [69], но его масштабы продвижения революционных достижений в технологиях компьютерного моделирования для анализа, проектирования, сертификации и квалификации аэрокосмических систем ограничены. очень актуально и для ELT. Дорожная карта состоит из различных этапов решения и преодоления определенных проблем с конечной целью моделирования полной операционной системы в течение периода времени, достаточного для оценки успеха миссии. Реализация моделирования и последующая обработка, а также оценка параметров производительности и их неопределенностей должны быть одними из многих, а сроки выполнения должны составлять недели, если не дни. В аэрокосмическом сообществе это означает, например, маневрирующий самолет с полностью исправным и работающим двигателем(ами), а также критически важными подсистемами, такими как подача топлива.
База данных из 1000 симуляций создаст инструмент многоточной обратной связи в режиме реального времени во время работы системы. В следующих подразделах мы рассмотрим, как это можно применить к случаю наземной обсерватории.

Machine Translated by Google

9.1. Геометрия и создание сетки.

Первым шагом в процессе моделирования является установление желаемой геометрической точности моделирования. Это, конечно, зависит от задействованных физических явлений и объема моделирования (результатов). В случае торговых исследований между несколькими вариантами конструкции необходимо четко устранить геометрические различия. К сожалению, геометрическое определение компонента, его цифровое представление (модель САПР) и фактически изготовленный продукт не совпадают из-за допусков и ошибок перевода между форматами программного обеспечения. Иногда это может иметь значение для прогнозов производительности. Однако основной текущей проблемой является несовместимость моделей САПР с требованиями моделирования. Этому есть несколько причин, первая из которых — вышеупомянутые ошибки допуска. Компоненты подсистемы , собранные вместе для создания полной модели системы, не всегда объединяются для создания замкнутой поверхности, на которой можно создать сетку либо для воздуха (снаружи), либо для твердого тела (внутри). Требования к аэротермическому моделированию могут также исключать небольшие особенности, которые, как ожидается, не повлияют на аэротермическую среду, но их удаление является обременительным, в то время как остаются зазоры и дыры, которые снова нарушают целостность поверхности. Современные разработчики программного обеспечения, как САПР, так и моделирования, активно работают над внедрением методов автоматического восстановления, но разделение усилий между ними является активным источником разногласий. . . Что касается моделирования, немногие пакеты программного обеспечения способны «скрыть» геометрию с некоторым допуском и устранить нежелательные пробелы и особенности. Однако этот метод может существенно изменить другие важные детали, влияющие на поток, а ручное вмешательство пользователя утомительно и требует много времени. В результате и TIO, и GMT в настоящее время поддерживают отдельные модели САПР для подсистем. Создание и обновление этих моделей в соответствии с прогрессом проектирования было трудоемкой задачей. Чтобы адаптироваться к растущему числу моделей и конфигураций, необходимо внедрять лучшие практики как групп системных инженеров, так и поставщиков . Разработчики САПР должны понимать требования к моделированию и создавать сборки, которые можно преобразовать в имитационные модели с минимальными усилиями, обеспечивая максимальную совместимость моделей. Разработчики имитационного моделирования должны продолжать следить за достижениями в методологии ремон

После создания геометрического представления следующим шагом является создание расчетной сетки. Существует две основные категории сетки: поверхность/нормаль к поверхности и объем. Первое диктует точность расчета сил на конструкции и рассеивание тепла. Последний отвечает за правильное разрешение вихрей в сдвиговых слоях и следах. Аэрокосмическое сообщество активно работает над автоматической адаптацией сетки в регионах с высокими скоростными градиентами посредством повторного выравнивания, морфинга или уточнения. Сложная геометрия или движущиеся части разрешаются с помощью нескольких перекрывающихся сеток (смещение), которые обмениваются информацией посредством интерполяции. Минимизация ошибки интерполяции — еще одна активная область исс
На этом этапе давайте определим цель нашего моделирования работы обсерватории: телескоп отслеживает , затем поворачивает к другой цели в другой ориентации и продолжает отслеживать, одновременно управляя вентиляционными отверстиями и ветровым стеклом (где это применимо) в условиях переменного ветра.

В 2014 году [70] была предпринята попытка разработать CFD-модель обсерватории, которая бы учитывала все конфигурации, ориентации и режимы работы с единой сеткой на основе скользящих областей. У него была возможность поворачивать, открывать и закрывать вентиляционные отверстия, а также переходить в дневную конфигурацию для моделирования кондиционирования воздуха. Однако это было достигнуто с помощью определенных геометрических и физических компромиссов. Работа вентиляционного отверстия зависела от пористости, в то время как части конструкции телескопа по азимуту и высоте были удалены, чтобы приспособиться к их относительному движению. Более того, было доказано [71] , что однородные шестигранные сетки, ориентированные по оптическому объему, минимизируют ошибки оценки тепловидения. Таким образом, переустановка — единственный способ реализовать многоцелевое моделирование переходных процессов с переменной к
Операцию вентиляции можно реализовать с помощью морфинга, поскольку движение одномерно. Также может потребоваться адаптация сетки вокруг апертуры ограждения и к следу, особенно когда телескоп направлен в сторону от ветра под малыми углами места.

Machine Translated by Google

9.2. Физическое моделирование, алгоритмы и численные методы

В центре внимания десятилетия — точное представление нестационарных, турбулентных отрывных потоков, которые также являются обычным явлением внутри ограждения. Было показано [45] , что модели Навье-Стокса с усреднением по Рейнольдсу (RANS) не способны разрешить оптическую турбулентность и что необходимы моделирование отдельных вихрей (DES) или моделирование больших вихрей (LES).
В настоящее время большие усилия прилагаются к LES с моделированием стен и разрешением стенок. Вихри, подобные тем, которые мы наблюдаем на рисунке 5, лучше всего разрешаются в сочетании со схемами пространственной и временной дискретизации высокого порядка. Схемы второго порядка заменяются схемами третьего, четвертого или пятого порядка. Ученые-вычислители должны следить за развитием событий в реализации этих моделей в доступном программном обеспечении и использовать их. В настоящее время ELT используют модели третьего порядка.

Продолжаются усилия по предсказанию асимптотического значения PSSn с высоким разрешением для тепловидения. В случае TIO с номинальным разрешением OPD ~ 16 мм для разрешения только оптического объема требуется 10 миллиардов элементов. В результате в настоящее время рассматриваются новые подходы для характеристики поведения PSF локального видения на основе более грубого спектрального анализа карты OPD [31,47,69]. С этой целью будут использованы проверочные исследования и искусственный интеллект (см. следующие разделы).

9.3. высокопроизводительные вычисления

Значительные финансовые ресурсы ежегодно инвестируются промышленностью и государственными организациями в приобретение петамасштабных HPC-систем и разработку эксафлопсных HPC-систем, способных выполнять 1015 и 1018 операций с плавающей запятой в секунду (флопс) соответственно. Эти усилия также переходят на квантовые и биокомпьютеры.
Аналогичным образом, значительные средства и усилия тратятся на то, чтобы позволить кодам CFD эффективно использовать новые архитектуры. Существует несколько причин, которые диктуют использование систем HPC для CFD-моделирования

обсерваторий: • Большой объем моделирования. Разрешение LUT, необходимое для характеристики аэротермических характеристик обсерватории (зенитный и азимутальный углы, скорости и направления ветра, сценарии тепловыделения), может привести к сотням симуляций и десяткам сеток. Эти таблицы производительности необходимо обновлять каждый раз, когда происходят серьезные изменения в конструкции, а также их подмножества на регулярной основе для учета торговых исследований; таким образом, требуемый срок выполнения работ составляет несколько

месяцев. • Большие вычислительные сетки. Точное дрожание ветра и тепловизионное наблюдение требуют достаточно высокого разрешения, в результате чего требуется как минимум несколько десятков миллионов элем
Кроме того, чтобы точно оценить чистую теплопередачу на поверхностях корпуса и телескопа, необходимо включить анализ сопряженной теплопередачи, при этом конструкция корпуса, конструкция телескопа и другие важные компоненты должны быть объединены в сетку в одном моделировании. Это удвоит требуемый размер сетки. Наконец, правильная характеристика GL и взаимодействие с вольером требуют, чтобы сетка относительно высокого разрешения простиралась на первые 100 м над топографией.

• Большое количество временных шагов. Расчет тепловизора PSSn требует моделирования более 10 минут виртуального времени при частоте дискретизации 20 Гц или более, особенно если необходимо правильно оценить отклик адаптивного вторичного зеркала. Более того, моделирование сопряженного теплопереноса требует гораздо большего времени интегрирования, что значительно увеличивает количество временных шагов, где также желательно высокоточное решение воздушного потока.

Группы интегрированного моделирования ELT работают над автоматизацией создания сетки и настройки моделирования с помощью сценариев — практика, также используемая крупными производителями аэрокосмической продукции . Производственные запуски CFD развертываются в облачной системе Amazon Web Services (AWS), представляющей собой кластер узлов. Конфигурация кластера AWS определяется объемом памяти и процессоров каждого узла, производительностью процессора и пропускной способностью данных, необходимой для связи между узлами. После выполнения анализа масштабируемости мы можем определить количество узлов экземпляра конкретного типа, обеспечивающее необходимую память, ядра и пропускную способность сети. Автоматизированный процесс настроит и создаст кластер, загрузит файл моделирования и запустит прогон CFD. Расширение пространства параметров CFD, которое обычно требует

Machine Translated by Google

выполнение примерно 100 запусков CFD может легко привести к необходимости создания кластера HPC на 500 узлов, если мы хотим запустить все запуски одновременно.

Давайте рассмотрим пример моделирования GMT AWS CFD [59]. После запуска моделирования запускается локальный процесс, который синхронизирует данные, созданные локально, с удаленным репозиторием S3. Некоторые файлы, загруженные на S3, запускают функции Lambda, которые преобразуют данные в файлах в новые продукты данных, совместимые с входными файлами IM. Каждое моделирование CFD генерирует (на данный момент) около 1 ТБ данных, требующих настройки локального жесткого диска с максимально возможной пропускной способностью операций ввода-вывода для чтения/записи. В конце каждого моделирования выполняется сценарий постобработки, который извлекает и потребляет данные, доступные только после завершения моделирования.

Шаги, необходимые для очистки пространства параметров CFD, следующие:

• Настройте и создайте кластер HPC с помощью ParallelCluster (узлы запрашиваются как спотовые экземпляры); • Загрузите файлы конфигурации CFD в кластер; • Запустить CFD-моделирование на кластере; • Для каждой симуляции запускайте процесс синхронизации; • Для каждого завершенного моделирования выполнить постобработку выходных данных; • Для каждой завершенной и постобработанной симуляции завершить процесс синхронизации; • Для каждого завершенного моделирования удалите локальные данные.

Раньше все эти шаги выполнялись вручную оператором, отвечающим за мониторинг и управление всем циклом моделирования. GMT IM находится в процессе замены их оптимизированным, управляемым событиями рабочим процессом, который использует сервисы AWS для мониторинга и управления циклом моделирования. Например, файл конфигурации CFD загружается в репозиторий S3, который, в свою очередь, запускает событие, которое передает файл в кластер HPC, где выполняется вариант CFD, а связанные процессы упорядочиваются и запускаются автоматически, обеспечивая значительную экономию ручной труд.

9.4. Извлечение знаний Каждое

моделирование HPC генерирует файлы трехмерных температурных полей для теплового наблюдения, двухмерных карт давления на оптических поверхностях для размытия ветром и интегрированных сил на различные компоненты на каждом временном шаге. Кроме того, для целей анимации сохраняются различные «скриншоты» переменных контуров . С увеличением объема моделирования, размера сетки и количества временных шагов манипулирование данными и их постобработка становятся серьезной проблемой как с точки зрения связи, так и с точки зрения замедления моделирования. Этот процесс также требует автоматизации. После начала моделирования требуется процесс синхронизации с удаленным репозиторием AWS с достаточным дисковым пространством для получения файлов выходных данных моделирования. Дополнительные скрипты осуществляют постобработку данных моделирования, данные сохраняются локально, процесс синхронизации завершается, а удаленные данные удаляются.

9.5. Валидация

«Видение CFD 2030» призывает к усилиям по разработке и проведению комплексных экспериментальных испытаний для поддержки кампании вычислительной проверки, которая позволит оценить новые модели и методологии. Астрономическое сообщество уже подготовило испытательные стенды: существующие обсерватории. Учитывая ограниченный объем данных о куполовидении для наземных обсерваторий [56,57,72,73], его значительный вклад в деградацию изображения и уже упомянутые ограничения моделирования, важно продолжать валидацию методологии и результатов CFD с использованием данные действующих телескопов. В настоящее время предпринимаются усилия по созданию приборов для наблюдения за куполом [73,74].

Аналогичным образом, оценка ветрового дрожания конструкции телескопа основана на CFD-моделировании, которое не было полностью подтверждено экспериментально. Одна из самых больших неопределенностей заключается в связи между колебаниями приземного давления и возникающими в результате крутящими моментами крепления телескопа. Можно провести испытания в аэродинамической трубе с использованием физических моделей для проверки анализа сил и крутящих моментов, передаваемых опоре в результате
В частности, требуется проверка результатов моделирования динамической ветровой нагрузки для

Machine Translated by Google

как на поршне M1, так и на верхнем конце опоры, как с точки зрения прогнозирования колебаний перепада давления, так и взаимосвязи между колебаниями скорости, нестационарными силами и результирующим крутящим моментом опоры.

9.6. МДАО

Используя объем результатов CFD-моделирования, а также измерений обсерваторий и аэродинамических труб, можно создать базу данных с различной точностью. Это расширяет существующие стохастические основы, позволяя выполнять количественную оценку неопределенности для различных свойств и источников данных. Это также позволит обсерватории использовать эту базу данных в качестве средства оценки производительности и оптимизатора операций в реальном времени. Это будет особенно полезно, когда необходимо будет провести быструю инженерную оценку для решения проблем во время ввода обсерватории в эксплуатацию.

Некоторые из уже определенных стратегий уменьшения ошибок, такие как кондиционирование воздуха в дневное время и вентиляция в ночное время, основаны на воздействии окружающей среды. Текущее моделирование зависит от определенных эталонных условий с наветренной стороны, которые, кроме того, грубо дискретизированы в пространстве параметров. Однако информация, используемая операторами обсерваторий, будет основана на доступных данных от инженерных датчиков и системы мониторинга условий объекта или окружающей среды , описывающих температуру, скорость ветра, направление ветра, атмосферные наблюдения и т. д. Ожидается, что эти измерения будут отклоняться от эталонного моделирования. условия, и на них могут влиять объекты на высшем уровне. Таким образом, должен быть сформулирован оперативный план, позволяющий повторно сопоставлять LUT с этими показаниями. Методы анализа чувствительности и методологии искусственных нейронных сетей (ИНС), использующие результаты моделирования в местах мониторинга в качестве обучающих данных, могут использоваться для прогнозирования изменений в реакции системы на изменяющиеся входные параметры почти в реальном времени (порядка минут и даже секунд). Применимость этого инструмента, работающего в режиме реального времени, будет включать в себя тепловое наблюдение и смягчение ветровой нагрузки за счет работы вентиляционных каналов, а также знания доминирующих масштабов турбулентной длины, ошибок наведения телескопа и стратегий коррекции термического смещения на основе датчиков температуры. Таким образом, в сочетании с детерминированными оптическими ошибками и текущими измеренными данными об атмосфере в любой момент времени будет доступен моментальный снимок производительности системы по выбранному показателю IQ. Наконец, прогнозирование производительности может быть даже возможным за счет сопоставления результатов с вычислительными граничными условиями, которые являются результатами мезомасштабной модели атмосферы или любой другой службы прогнозирования погоды. Поскольку уровни и даже временное поведение атмосферных явлений, скорость ветра и температура могут быть предсказаны на предстоящую ночь за несколько часов вперед, могут быть созданы сценарии IQ, которые могут позволить наблюдать за очередью, то есть выбирать порядок целей, режима работы (наблюдение с ограниченной или адаптивной оптикой) и приборов в течение всей ночи, чтобы опти

Статус аэротермического моделирования обсерваторий, существующие проблемы и возможные пути их решения обобщены в Таблице 2. Как и ожидалось, из-за некоммерческого и чисто научного характера обсерваторий основной проблемой является финансирование. Будущей проблемой также может стать изменение климата/погоды, поскольку ожидается, что ELT будут работать до конца века . Обратите внимание, что небольшие поддерживающие исследования не являются проблемой и проводятся регулярно.

Таблица 2. Статус моделирования обсерватории.

Категория	Статус	Проблемы	Меры по
Стохастические и тепловые сетевые модели с использованием многолетних данных об окружающей среде	Развитый	Изменение климата.	снижению воздействия Системы экологического мониторинга на объекте и периодическое обновление записей.
Модели сопряженной теплопередачи подсистем	Частично развит; большинство инструментов все еще находятся в стадии разработки, и CAD не являются зрелыми	Подготовка/обновление САПР.	контроль конфигурации САПР; сетка по частям, чтобы минимизировать время обновления во время разработки проекта.

Machine Translated by Google

Таблица 2. Продолжение.

Категория	Статус	Проблемы	Смягчения
CFD-модели обсерватории	Разработано, но смещенное движение сетки и адаптивность сетки еще не реализованы.	Недостаточное финансирование вычислительных ресурсов и/или времени на завершение. Параллельное моделирование со многими моделями подсистем требует больших вычислительных затрат. Моделирование с желаемым разрешением OPD является вычислительно непомерно трудным. Обработка данных. Валидация.	Ожидайте увеличения вычислительной мощности в будущем по той же цене. Разработайте модели ПЗУ и ИНС. Обработка на месте. Измерения на существующие обсерватории.
Модели ПЗУ и ИНС для работы обсерватории (этап AIVC)	Раннее развитие	Недостаточное финансирование необходимых штатных сотрудников и вычислительных ресурсов. Неопределенность количества параметров, которые ИНС могут стабильно обрабатывать, и количества симуляции, необходимые для обучения.	Если недостаточное финансирование сохраняется, перейдите к операциям и изучите альтернативные пути финансирования. Разбейте на более простые задачи, с небольшим количеством входов/выходов на задачу. Тестирование программного обеспечения на существующих обсерваториях.

10. Заключительные замечания

В данной статье предпринята попытка представить краткий обзор роли, которую аэротермическое моделирование сыграло в наземной астрономии за последние два десятилетия, и предложить возможную дорожную карту на предстоящее десятилетие.

От определения характеристик GL до аэродинамической оптимизации корпуса, дневного кондиционирования воздуха в обсерваториях, контроля выделения тепла в ночное время и поддержки проектирования подсистем, CFD и моделирование сопряженной теплопередачи стали незаменимыми инструментами в разработке систем ELT. Было проведено обширное системное моделирование и моделирование для прогнозирования производительности системы и оценки ее технических характеристик (например, качество изображения, рассеивание тепла) и требований (например, точность наведения, экологические ограничения). Такие модели прогнозирования производительности поддерживают четыре важные функции системного проектирования: проверку требований, проверку, снижение рисков и исследование компромиссных решений. Моделирование существенно повлияло на выбор конструкции ELT. Сегодня в торговом пространстве, возможно, существует меньше возможностей для изменения конструкции, чем вместо этого поддерживать интеграцию, проверку, ввод в эксплуатацию и устранение неполадок, а также оптимизировать производительность с помощью операционных стратегий. Однако скрытых проблем и новых возможн

По мере того, как проекты продолжают идти по пути исследований и открытий, будут прилагаться и усилия по преодолению новых проблем. Используя новые методы и современные технологии, аэротермическое моделирование позволит сделать новые открытия, которые обеспечат успех этого новаторского инженерного проекта.

Вклад автора: концептуализация, KV и GA; методика, KB; программное обеспечение, KB и RC; валидация, KB; формальный анализ, KB и RC; расследование, KB; ресурсы, KB и RC; курирование данных , KV и RC; письменное – подготовка оригинального черновика, KB; написание — рецензирование и редактирование, KB; визуализация, KB и RC; надзор, GA, GT и RC; администрация проекта, GA, GT и RC; приобретение финансирования, GA, GT и RC. Все авторы прочитали и согласились с опубликованной версией рукописи.

Финансирование: Данное исследование финансировалось TIO, номер контракта TIO.BUS.CON.24.063 и GMTO, номер контракта GMT-CON-01543.

Заявление о доступности данных. Данные, представленные в этом исследовании, недоступны, поскольку они находятся в хранилищах с контролируемым доступом. Некоторые из них уже невозможно восстановить. Большинство этих исследований продолжаются, а дизайн еще не завершен. Запросы на доступ к наборам данных следует направлять на адреса gtrancho@tmt.org и rconan@gmto.org.

Благодарности: Международная обсерватория TMT (ТИО) благодарит за поддержку членов ТИО и Фонда Гордона и Бетти Мур. Членами и соответствующими сотрудничающими учреждениями являются: Калифорнийский технологический институт (Калифорнийский технологический институт); Националь

Machine Translated by Google

Исследовательский совет Канады (NRC-CNRC); Ассоциация канадских университетов астрономических исследований (ACURA); Департамент науки и технологий правительства Индии (DST); Министерство атомной энергии Индии (DAE); Национальный институт естественных наук Японии (NINS); Национальная астрономическая обсерватория Японии (NAOJ); и регенты Калифорнийского университета (UC). Эту работу также поддержали Ассоциация университетов астрономических исследований (AURA) и Национальный научный фонд США (NSF).

Эта работа была поддержана GMTO Corporation, некоммерческой организацией, действующей от имени международного консорциума университетов и учреждений: Университета штата Аризона, Astronomy Australia Ltd., Австралийского национального университета, Научного института Карнеги, Гарвардского университета, Корейский институт астрономии и космических наук, Исследовательский фонд Сан- Паулу , Смитсоновский институт, Техасский университет в Остине, Техасский университет A&M, Университет Аризоны, Чикагский университет и Институт науки Вейцмана.

Конфликты интересов: Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Ссылки

1. Европейский чрезвычайно большой телескоп. Доступно онлайн: https://elt.eso.org. (по состоянию на 10 июня 2024 г.).
2. Гигантский Магелланов телескоп. Доступно онлайн: https://giantmagellan.org. (по состоянию на 10 июня 2024 г.). 3. Международная обсерватория Тридцатиметрового телескопа. Доступно онлайн: https://www.tmt.org. (по состоянию на 10 июня 2024 г.).
4. Анджели, Г.З.; Робертс, С.; МакМиновски, Д.; Фицсиммонс, Дж.; Данн, Дж.; Вогиацис, К.; Шейнис, А. Инструменты моделирования для оценки характеристик тридцатиметрового телескопа: интегрированный подход; ШПИОН 5497(24); SPIE: Беллингем, Вашингтон, США, 2004 г.
5. Конан Р.; Анджели, Г.; Ситарски, Б.; Дрибуш, К.; Фитцпатрик, Х.; Романо, Х.; Вогиацис, К.; Дас, К. Подход GMTO к интегрированному Системная инженерия на основе моделирования; ШПИОН 11450(26); SPIE: Беллингем, Вашингтон, США, 2020 г.
6. Анджели, Г.З.; Вогиацис, К. Статистический подход к системной инженерии для Тридцатиметрового телескопа; ШПИОН 7738(45); ШПАЙ: Беллингем, Вашингтон, США, 2010 г.
7. Вогиацис, К.; Дас, К.; Ситарски, Б.; Шварц, Д.; Конан, Р.; Анджели, Г. З. Использование стохастического подхода для оценки аэротермических характеристик гигантского Магелланова телескопа; АИАА 2019-2319; Американский институт аэронавтики и астронавтики: Рестон, Вирджиния, США, 2019.
8. Вогиацис, К.; Анжели, Г.З. Система моделирования Монте-Карло для TMT; ШПИОН 7017(29); SPIE: Беллингем, Вашингтон, США, 2008 г.
9. Ситарски, Б.; Вогиацис, К.; Конан, Р.; Анджели, Г.З.; Гудрич, Р. Оценка производительности гигантского Магелланова телескопа с помощью статистического анализа. В материалах AO4ELT6, Квебек, Квебек, Канада, 9–14 июня 2019 г.
10. Со, Б.-Дж.; Анджели, Г.З.; Нельсон, Дж. Анализ нормализованной чувствительности точечного источника как показателя производительности больших телескопов. Дж. Прил. Опция 2009, 48, 5997–6007. [Перекрестная ссылка] [ПабМед]
11. Анджели, Г.З.; Со, Б.-Дж.; Ниссли, К.; Трой, М. Удобный показатель производительности телескопа для получения изображений в условиях турбулентности; ШПИОН 8127(4); SPIE: Беллингем, Вашингтон, США, 2011 г.
12. Конан Р. PSSn как функция аберрации поля и остатков полировки сегмента M1; GMT-DOC-01940; Корпорация ГМТО: Пасадена, Калифорния, США, 2017 г.
13. Сименс Симцентр СТАР-СКМ+. Доступно онлайн: https://plm.sw.siemens.com/en-US/simcenter/fluids-thermal-simulation/star-ccm/ (по состоянию на 10 июня 2024 г.).
14. Математические работы MATLAB. Доступно онлайн: https://www.mathworks.com/products/matlab.html. (по состоянию на 10 июня 2024 г.).
15. Заго Л. Влияние местной атмосферной среды на астрономические наблюдения. доктор философии Диссертация, Политехническая школа Федеральная федерация Лозанны, Во, Швейцария, 1995 г. № 1394.
16. Вогиацис, К.; Томпсон, Х.; Транчо, Г. Аэротермическая поддержка подсистем корпуса Международной обсерватории TMT и объектов на высшем уровне; ШПИЕ 13094(27); SPIE: Беллингем, Вашингтон, США, 2024 г.
17. Ситарский Б.; Вогиацис, К. Тепловое моделирование определения размеров систем отопления, вентиляции и кондиционирования воздуха; GMT-DOC-03957; Корпорация GMTO: Пасадена, Калифорния, США, 2019 г.
18. Вогиацис, К.; Фитцпатрик, Х.; Конан, Р.; Ранка, Т.; Мюллер, Г.; Синь, Б.; Эшби, Д. Система термоконтроля основного зеркала GMT и система моделирования термической деформации; ШПИЕ 13099(102); SPIE: Беллингем, Вашингтон, США, 2024 г.
19. Вогиацис, К.; Де Янг, Д.С. Характеристика местности с помощью вычислительной гидродинамики. В материалах 2-го семинара Бэккаског по чрезвычайно большим телескопам, замок Бэкаског, Швеция, 9–11 сентября 2003 г. SPIE 5382(74).
20. Вогиацис, К.; Хириарт, Д. Численное моделирование ветра для реки Сан-Педро-Мартир-Сьерра в Нижней Калифорнии. Преподобный Мекс. Астрон. Астрофиз. 2004, 40, 81–98.
21. Элс, С.; Вогиацис, К. Исследования TMT по влиянию кратковременных изменений локальных термодинамических условий на зрение: CFD против наблюдений; ШПИЕ 6267(55); SPIE: Беллингем, Вашингтон, США, 2006 г.
22. Элс, С.; Вогиацис, К. Выявление возникновения конвекции в атмосферах планет земной группы. В материалах IAU S239 Конвенция астрофизики, Прага, Чехия, 21–25 августа 2006 г.
23. Элс, С.; Шёк, М.; Скидмор, В.; Травуийон, Т.; Риддл, Р.; Вогиацис, К.; Ван, Л.; Бустос, Э.; Сегель, Дж.; Васкес Дж.; и др. Наблюдения турбулентного приземного слоя атмосферы во время полигонных испытаний Тридцатиметрового телескопа (TMT). В материалах EMS 2007-A-00109, Ежегодное собрание Европейского метеорологического общества и 8-я Европейская конференция по применениям метеорологии, Сан-Лоренцо-де-Эль-Эскориал, Испания, 1–5 октября 2007 г.

Machine Translated by Google

24. Элс, С.; Шёк, М.; Скидмор, В.; Травуийон, Т.; Риддл, Р.; Бустос, Э.; Сегель, Дж.; Васкес Дж.; Вогиацис, К.; Уокер, Д.; и др.
Площадочные испытания Тридцатиметрового телескопа и его потенциальная роль в развитии краткосрочного прогнозирования условий наблюдений. Астрон. Нахрихтен 2007, 328, 7.
25. Элс, С.Г.; Вогиацис, К.; Отарола, А.; Шёк, М.; Травуийон, Т.; Риддл, РЛ; Скидмор, Вашингтон. Оптическая турбулентность над горами в 3D; ШПИОН 7733(58); SPIE: Беллингем, Вашингтон, США, 2010 г.
26. Дас, К.; Вогиацис, К.; Анджели, Г.З.; Розенталь, В.; Буше, А.; Гудрич, В. GMT Проверка аэротермического моделирования на месте измерение; SPIE 10705(2)c; SPIE: Беллингем, Вашингтон, США, 2018 г.
27. Вогиацис, К.; Томпсон, Х.; Робертс, С.; Дюма, К. Исследования наземного слоя альтернативной площадки TMT; ШПИОН 10705(61); SPIE: Беллингем, Вашингтон, США, 2018 г.
28. Вогиацис, К.; Томпсон, Х.; Роджерс, Дж.; Транчо, Г. О взаимосвязи между тепловидением и проектированием обсерваторий; ШПИЕ 12187(74); SPIE: Беллингем, Вашингтон, США, 2022 г.
29. Де Янг, Д.С.; Вогиацис, К. Численное моделирование потока в корпусах чрезвычайно больших телескопов. В материалах SPIE 5382-44, 2-й семинар Беккаскога по чрезвычайно большим телескопам, замок Бэкаског, Швеция, 9–11 сентября 2003 г.
30. МакМиновски, Д.Г.; Анджели, Г.З.; Вогиацис, К.; Фицсиммонс, Дж.; Падин, С. Параметрическое моделирование и контроль вибрации телескопа, вызванной ветром ; ШПИОН 5497(26); SPIE: Беллингем, Вашингтон, США, 2004 г.
31. Вогиацис, К.; Сегурсон, А.; Анджели, Г.З. Оценка влияния ветровой нагрузки на производительность чрезвычайно большого телескопа с использованием вычислительной гидродинамики; ШПИОН 5497(30); SPIE: Беллингем, Вашингтон, США, 2004 г.
32. МакМиновски, Д.Г.; Блаурок, Калифорния; Анджели, Г.З.; Вогиацис, К. Моделирование ветрового удара Тридцатиметрового телескопа; ШПИОН 6271(25); SPIE: Беллингем, Вашингтон, США, 2006 г.
33. МакМиновски, Д.Г.; Вогиацис, К.; Анджели, Г.З.; Фицсиммонс, Дж.; Нельсон, Э.Дж. Ветровые нагрузки на наземные телескопы. Прил. Опция 2006, 45, 7912–7923. [Перекрестная ссылка]
34. Себаг, Дж.; Вогиацис, К. Требования к теплу для камеры LSST с использованием моделирования CFD и тепловидения; ШПИОН 7738(13); ШПАЙ: Беллингем, Вашингтон, США, 2010 г.
35. Себаг, Дж.; Вогиацис, К.; Барр, Дж.; Нил, Д. Корпус саммита LSST: оптимизация конструкции объекта с использованием аэротермического моделирования; ШПИОН 8449(3); SPIE: Беллингем, Вашингтон, США, 2012 г.
36. Чо, М.; Вогиацис, К.; Себаг, Дж.; Нил, Д. Реакция вторичного зеркала LSST на ветер; ШПИОН 8449(4); SPIE: Беллингем, Вашингтон, США, 2012 г.
37. Себаг, Дж.; Вогиацис, К. Оценка купольной видимости для LSST; ШПИОН 9150(26); SPIE: Беллингем, Вашингтон, США, 2014 г.
38. Вогиацис, К.; Синь, Б.; Клавер, К.; Анджели, Г.З.; Селви, Б. Анализ чувствительности купола к LSST; ШПИОН 10705(3); ШПАЙ: Беллингем, Вашингтон, США, 2018 г.
39. Маркиори, Г.; Рампини, Ф.; Миан, С.; Гедин, Л.; Маркуцци, Э.; Брессан, Р. Купол и телескоп ELT: обзор анализа производительности; ШПИОН 10705(13); SPIE: Беллингем, Вашингтон, США, 2018 г.
40. Вогиацис, К.; МакМартин, Д.; Ван, Л.; Транчо, Г. Процедура оценки аэротермических характеристик Международной обсерватории TMT; ШПИЕ 13099(100); SPIE: Беллингем, Вашингтон, США, 2024 г.
41. Вогиацис, К.; Дас, К.; Анджели, Г.З.; Бигелоу, Б.; Бергетт, В. Вычислительное гидродинамическое моделирование GMT; ШПИОН 10705(28); SPIE: Беллингем, Вашингтон, США, 2018 г.
42. МакМартин, Д.Г.; Вогиацис, К. Нестационарные ветровые нагрузки для TMT: замена параметрических моделей на CFD; ШПИОН 9150(25); ШПАЙ: Беллингем, Вашингтон, США, 2014 г.
43. Вогиацис, К.; Томпсон, Х. О точности аэротермического моделирования TMT; ШПИОН 9911(40); SPIE: Беллингем, Вашингтон, США, 2016 г.
44. Вогиацис, К. Влияние построения сетки, параметров решателя и постобработки на метрическое моделирование качества аэрооптического изображения; АИАА 2018-1502; Американский институт аэронавтики и астронавтики: Рестон, Вирджиния, США, 2018.
45. Дас, К.; Вогиацис, К.; Анджели, Г.З. Оценка моделей турбулентности и уточнение сетки для аэрооптического моделирования больших наземных телескопов; АИАА 2018-4156; Американский институт аэронавтики и астронавтики: Рестон, Вирджиния, США, 2018.
46. Вогиацис, К. Среда теплового моделирования для TMT; ШПИОН 7738(11); SPIE: Беллингем, Вашингтон, США, 2010 г.
47. Вогиацис, К.; Конан, Р. Предварительная оценка системы отопления, вентиляции и кондиционирования по Гринвичу с использованием CFD; GMT-DOC-03938; Корпорация ГМТО: Пасадена, Калифорния, США, 2019 г.
48. Томпсон, ХА; Вогиацис, К. Тепловой баланс и температурный менеджмент обсерватории TMT; ШПИОН 9150(83); SPIE: Беллингем, Вашингтон, США, 2014.
49. Паздер Дж.; Вогиацис, К. Оценки видимости купола и зеркала для Тридцатиметрового телескопа; ШПИОН 7017(26); SPIE: Беллингем, Вашингтон, США, 2008 г.
50. Конан, Р.; ван Дам, М.; Вогиацис, К.; Дас, К.; Буше, А. Моделирование купола гигантского Магелланова телескопа с использованием жидкости динамическое моделирование. В материалах AO4ELT6, Квебек, Квебек, Канада, 9–14 июня 2019 г.
51. Вогиацис, К.; Анджели, GZ « Стратегии оценки зеркального и купольного зрения для TMT» ; ШПИОН 6271(27); SPIE: Беллингем, Вашингтон, США, 2006 г.
52. Вогиацис, К.; Аптон, Р. Исследования TMT по моделированию теплового наблюдения: проверка модели зеркального и купольного наблюдения; ШПИЕ 6271(48); SPIE: Беллингем, Вашингтон, США, 2006 г.
53. МакМиновски, Д.Г.; Колавита, ММ; Скидмор, Вашингтон; Вогиацис, К. Модели динамических возмущений первичного зеркала для TMT: вибрация и ветер; ШПИОН 7738(14); SPIE: Беллингем, Вашингтон, США, 2010 г.
54. Вогиацис, К.; Макминовски, Д.Г. Нестационарное аэродинамическое моделирование ветровой нагрузки на сегмент основного зеркала TMT; ШПИОН 7738(61); SPIE: Беллингем, Вашингтон, США, 2010 г.
55. Солер, М.; Вогиацис, К.; Козар-Кастеллано, Дж.; Бонаке, С.; Белло-Асин, М.; Нуньес Кагигаль, М.; Баретто Кабрера, М. Местное видение Анализ для Европейского солнечного телескопа; ШПИОН 13094(153); SPIE: Беллингем, Вашингтон, США, 2024 г.

Machine Translated by Google

56. Вогиацис, К.; Отарола, А.; Скидмор, В.; Травуийон, Т.; Анджели, Г.З. Проверка моделирования локального тепловидения посредством обсерваторских измерений; ШПИОН 8449(1); SPIE: Беллингем, Вашингтон, США, 2012 г.
57. Салмон, Д.; Бенедикт, Т.; Барил, М.; Ван, С.-Ю.; Танджавур, К.; Вогиацис, К.; Расин, Р. Гидродинамическое исследование купола CFHT с использованием испытаний CFD и водного туннеля; ШПИОН 8449(2); SPIE: Беллингем, Вашингтон, США, 2012 г.
58. Вогиацис, К. Основы аэротермического моделирования для TMT. В трудах комплексного моделирования сложных оптомеханических систем, Кируна, Швеция, 15–17 августа 2011 г. SPIE 8336(10).
59. Вогиацис, К.; Фитцпатрик, Х.; Дас, К.; Конан, Р.; Анджели, Г.; Ситарски, Б.; Романо, Р.; Дрибуш, К.; Уоллс, Б. Аэротермическое моделирование для поддержки проектирования, проверки требований и оценки производительности подсистем GMT; ШПИЕ 12187(22); SPIE: Беллингем, Вашингтон, США, 2022 г.
60. Чо, М.; Корредор, А.; Вогиацис, К.; Анджели, Г.З. Термический анализ структуры телескопа TMT; ШПИОН 7738(12); ШПАЙ: Беллингем, Вашингтон, США, 2010 г.
61. Вогиацис, К.; Саджадпур, А.; Робертс, С. Тепловая модель структуры телескопа TMT; ШПИОН 9150(72); SPIE: Беллингем, Вашингтон, США, 2014 г.
62. Фитцпатрик, Х.; Конан, Р.; Вогиацис, К.; Дас, К.; Дрибуш, К. Вычислительная система для изучения суточного термомеханического поведения гигантского Магелланова телескопа; ШПИЕ 13099(98); SPIE: Беллингем, Вашингтон, США, 2024 г.
63. Вогиацис, К.; Бойер, К.; Вэй, К.; Тан, Дж.; Эллербрук, Б. Аэротермическое моделирование установки TMT Laser Guide Star; ШПИОН 9148(243); SPIE: Беллингем, Вашингтон, США, 2014 г.
64. Вогиацис, К.; Ван, Л.; Трубей, М.; Ираразавал, Б.; Бойер, К. Аэротермическое моделирование лазерного указателя Международной обсерватории TMT. Звездный объект; ШПИЕ 13099(101); SPIE: Беллингем, Вашингтон, США, 2024 г.
65. Вогиацис, К. Моделирование ионного пучка; Документ TMT.SEN.TEC.20.070; Международная обсерватория TMT: Пасадена, Калифорния, США, 2020 г.
66. Маккуиллен И.; Фелпс, Л. Заводские приемочные испытания и доработка модели узла воздушного ножа солнечного телескопа Дэниела К. Иноуе; ШПИОН 10705(25); SPIE: Беллингем, Вашингтон, США, 2018 г.
67. Мартинс, Д.; Хольцлонер, Р.; Верино, К.; Кляйнклаус, К. Ошибка переходного волнового фронта из-за охлажденного воздуха с подветренной стороны телескопа-паука; ШПИОН 12187(12); SPIE: Беллингем, Вашингтон, США, 2022 г.
68. Исследование CFD Vision 2030. Доступно в Интернете: http://ntrs.nasa.gov/search.jsp?R=20140003093. (по состоянию на 10 июня 2024 г.).
69. Веб-сайт Интеграционного комитета AIAA CFD Vision 2030. Доступно онлайн: https://cfd2030.com. (по состоянию на 10 июня 2024 г.).
70. Вогиацис, К. Переходное аэротермическое моделирование для TMT; ШПИОН 9150(24); SPIE: Беллингем, Вашингтон, США, 2014 г.
71. Вогиацис, К.; Томпсон, Х.; Робертс, С. О точности аэротермического моделирования TMT: еще раз; ШПИОН 10705(4); SPIE: Беллингем, Вашингтон, США, 2018 г.
72. Расин Р.; Салмон, Д.; Коули, Д.; Совка, Дж. Зеркало, купол и естественное зрение на CFHT. Опубл. Астрон. Соц. Пак. 1991, 103, 1020–1032. [Перекрестная ссылка]
73. Бустос, Э.; Токовинин А. Купольный монитор и его результаты для 4-метрового телескопа Бланко; ШПИОН 10700; SPIE: Беллингем, Вашингтон, США, 2018 г.
74. Лай, О.; Витингтон, К.; Чун, MR; Ложье, Р. Исследование турбулентности приземного слоя и купола в астрономических обсерваториях с использованием локализованного оптического датчика турбулентности. В материалах Конгресса по визуализации и прикладной оптике, Вашингтон, округ Колумбия, США, 22–26 июня 2020 г.

Отказ от ответственности/Примечание издателя: Заявления, мнения и данные, содержащиеся во всех публикациях, принадлежат исключительно отдельному автору(ам) и соавторам(ам), а не MDPI и/или редактору(ам). MDPI и/или редактор(ы) не несут ответственности за любой вред людям или имуществу, возникший в результате любых идей, методов, инструкций или продуктов, упомянутых в контенте.

Machine Translated by Google

вычисление

MDPI

Статья

Модель реакции-диффузии дробного порядка Дегна – Харрисона: Конечно-временная динамика устойчивости и синхронизации.

Ма'мон Абу Хаммад [1], Иссам Бендиб [2], Васим Гази Альшанти З [3], Ахмад Альшанти [4], Адель Уаннас [5], Амель Хиуал 5* и Шахер Момани 6,7

1 факультет математики, Иорданский университет Аль-Зайтуна, Амман 11733, Иордания; m.abhammad@zuj.edu.jo
2 Лаборатория прикладной математики и моделирования кафедры математики факультета точных наук, Университет братьев Ментури, Константин 25000, Алжир; Bendib.issam@doc.umc.edu.dz
3 факультет математики, Иорданский университет Аль-Зайтуна, Амман 11733, Иордания; w.alshanti@zuj.edu.jo
4 Департамент кибербезопасности, Иорданский университет Аль-Зайтуна, Амман 11733, Иордания; a.alshanty@zuj.edu.jo
5 Кафедра математики и информатики Университета Ума Эль-Буаги, Ум Эль-Буаги 04000, Алжир; ouannas.adel@univ-oeb.dz
6 Центр исследований нелинейной динамики (NDRC), Университет Аджмана, Аджман 346, Объединенные Арабские Эмираты; s.momani@ajman.ac.ae
7 Департамент математики, Иорданский университет, Амман 11942, Иордания
* Переписка: amel.hioual@univ-oeb.dz

Аннотация: Целью данного исследования является рассмотрение темы синхронизации за конечное время внутри определенного подмножества. реакционно-диффузионных систем Дегна–Харрисона дробного порядка. Для достижения этой цели мы начнем с введение новой леммы, специфичной для анализа устойчивости за конечное время. Отклонение от существующих критериям, эта лемма представляет собой значительное расширение предыдущих результатов, закладывая основу для последующих расследований. Опираясь на этот фундамент, мы приступаем к разработке эффективных зависимые линейные контроллеры, предназначенные для организации синхронизации за конечное время. Использование степени функции Ляпунова получены новые робастные условия, обеспечивающие достижение синхронизация в заранее заданные сроки. Этот инновационный подход не только расширяет наши понимание синхронизации за конечное время, но также предлагает практические решения для ее реализации в сложные системы. Чтобы подтвердить эффективность и применимость предложенной нами методологии, было проведено обширное исследование. проводится численное моделирование. Посредством этого всестороннего анализа мы стремимся внести свой вклад ценную информацию в области реакционно-диффузионных систем дробного порядка, одновременно прокладывая путь к практические реализации в реальных приложениях.

Ключевые слова: синхронизация за конечное время; Реакционно-диффузионные системы Дегна–Харрисона; устойчивость на конечном времени; функция Ляпунова

check for updates

Цитирование: Хаммад, Массачусетс; Бендиб, И.; Альшанти, В.Г.; Альшанты, А.; Уаннас, А.; Хиуаль, А.; Момани, С. Дегн – Харрисон дробного порядка Реакционно-диффузионная модель: конечно-Временная динамика устойчивости и Синхронизация. Расчет 2023, 12, 144. https://doi.org/10.3390/вычисление12070144

Академические редакторы: Эндре Ковач, Денис Бутусов и Валерий Островский

Поступило: 3 июня 2024 г.
Пересмотрено: 7 июля 2024 г.
Принято: 10 июля 2024 г.
Опубликовано: 12 июля 2024 г.

Копирайт: © 2023 авторов. Лицензиат MDPI, Базель, Швейцария. Эта статья находится в открытом доступе. распространяется на условиях и условия Creative Commons Лицензия с указанием авторства (CC BY) (https://Creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

1. Введение

Разработка соответствующих контроллеров важна для динамического анализа системы, особенно для достижения синхронизации. Исследователи изучили различные математические модели, чтобы понять уникальные шаблоны синхронизации этих систем. Математический модели, такие как уравнения реакции-диффузии, используются для описания непрерывного пространства. такие системы, как колеблющиеся биологические или химические среды, обнаруживающие сложные динамические структуры, такие как бифуркации, пространственные закономерности и поворотную нестабильность. Исследования показывают, что Реакционно-диффузионные системы, напоминающие низкоразмерные осцилляторы, могут проявлять синхронизацию . Например, в [1] рассмотрена синхронизация в модели Дегна–Харрисона. Реакционно-диффузионная система, ссылка [2] посвящена управлению синхронизацией в Лендьель-Система Эпштейна и ссылка [3] обсуждают синхронизацию в системе ФитцХью – Нагумо. модель с использованием конкретного подхода к управлению. За последнее десятилетие произошло значительное рост интереса к фракционным реакционно-диффузионным системам, особенно в части синхронизации [4]. Например, в [5] синхронизация в конкретном типе дробного порядка

Machine Translated by Google

Пространственно-временные системы с частными производными исследовались с использованием дробного метода Ляпунова. Кроме того, был разработан гибридный подход для синхронизации двух реакционно-диффузионных систем целого и дробного порядка с применением к конкретным химическим моделям, обсуждаемым в [6].

В рамках этой структуры появились различные методы и стратегии для решения проблемы синхронизации уравнений в частных производных. Эти подходы охватывают широкий спектр, охватывая методы активного управления наряду со схемами линейного и нелинейного управления , как указано в [7,8]. Были описаны различные формы синхронизации, каждая из которых имеет свои уникальные характеристики и приложения. К ним относятся синхронизация за конечное время , фазовая синхронизация, ожидаемая синхронизация, полная синхронизация, синхронизация с задержкой, синхронизация функций QS, проективная синхронизация и обобщенная синхронизация, как подробно описано в ссылках [9–11]. Посредством обширного и тщательного обзора различных методологий наша цель — глубоко углубиться в сложности синхронизации в уравнениях в частных производных. Мы стремимся объяснить разнообразие подходов, которые исследователи и практики разработали и использовали в этой области. Объединяя идеи из широкого спектра существующей литературы и синтезируя коллективные результаты многочисленных прошлых исследований, мы стремимся внести значимый вклад в продолжающуюся научную дискуссию вокруг теории синхронизации.

Наша работа не только освещает текущее состояние исследований, но и определяет потенциальные пути для будущих достижений, тем самым способствуя дальнейшему прогрессу в этой важной области исследований.

Синхронизация за конечное время относится к определенному типу синхронизации, при котором скоординированное поведение систем достигается в течение заранее определенного и конечного интервала времени. В отличие от традиционной синхронизации, для которой может потребоваться неопределенный период времени для сходимости, синхронизация с ограниченным временем гарантирует, что системы достигнут синхронности в течение определенного периода времени. Эта концепция находит применение в различных областях, таких как системы управления, сети связи и робототехника. Например, в области робототехники синхронизация за конечное время может повысить эффективность и сотрудничество между несколькими роботизированными агентами, гарантируя их скоординированное движение в течение заданного периода времени. В сетях связи быстрая синхронизация имеет решающее значение для обеспечения эффективной и надежной передачи данных, как подчеркивается в источниках [12–15]. Несмотря на свою важность , исследования по конечновременной синхронизации пространственно протяженных систем, описываемых реакционно-диффузионными системами (РДС), остаются ограниченными.

В последние годы были разработаны различные численные методы эффективного решения уравнений реакции-диффузии. Стандартные методы, такие как метод конечных разностей, метод конечных элементов и спектральные методы, широко используются благодаря их надежности и вычислительной эффективности [16–18]. Достижения в численном анализе привели к появлению новых методов, таких как адаптивное уточнение сетки и параллельные вычисления, повышающие точность и эффективность моделирования. Для систем дробного порядка, таких как модель реакции-диффузии Дегна – Харрисона, были предложены специализированные методы, такие как дробные конечные разности и дробные спектральные методы. Эти методы эффективно решают уникальные проблемы дробных производных и обеспечивают более глубокое понимание динамики системы [19,20].

Это исследование представляет собой значительный и оригинальный вклад в изучение конечновременной синхронизации внутри определенного подмножества пространственно-временных систем с частными производными дробного порядка. Наша главная цель — провести всестороннее исследование как устойчивости, так и синхронизации за конечное время во взаимосвязанных дробных системах реакция-диффузия. Эти системы характеризуются сложным динамическим поведением, на которое влияют пространственные и временные переменные, что делает их сложными, но важными для изучения. Для достижения устойчивости на конечном времени мы используем дробный метод Ляпунова.
Этот подход предполагает построение подходящей функции Ляпунова, которая помогает найти условия, при которых точка равновесия системы может быть достигнута за конечное время. Этот метод имеет решающее значение, поскольку он гарантирует, что состояние системы приблизится к желаемому равновесию в течение заранее определенного периода времени, тем самым повышая предсказуемость и контроль над такими системами. Для достижения синхронизации за конечное время мы предлагаем робастную лине

Machine Translated by Google

техника контроля. Эта стратегия управления предназначена для синхронизации состояний фракционных реакционно-диффузионных систем, гарантируя, что они демонстрируют согласованное поведение в течение конечного интервала времени. Наш подход достаточно общий, чтобы быть применимым к широкому спектру фракционных систем реакции-диффузии, что делает его универсальным инструментом для исследователей и практиков в этой области. Чтобы проиллюстрировать эффективность и практичность предложенных нами методов управления, мы проводим подробный анализ поведения синхронизации взаимосвязанных систем Дегна – Харрисона дробного порядка. Эти системы служат показательным примером из-за их сложности и актуальности в различных приложениях. Посредством моделирования и теоретического анализа мы демонстрируем, как наши методы управления могут эффективно достигать синхронизации за конечное время , тем самым подтверждая надежность и применимость н

Статья структурирована следующим образом: В разделе 2 мы углубляемся в основополагающие принципы исчисления дробей, предоставляя читателям полное понимание математических основ, необходимых для понимания последующих обсуждений. В разделе 3 представлено описание моделей Дегна-Харрисона. Раздел 4 направлен на исследование устойчивости точек равновесия в конечном времени в моделях реакции-диффузии. Этот анализ имеет решающее значение для понимания переходного поведения системы и определения того, может ли она достичь стабильного состояния за конечное время. Практические последствия этого анализа значительны, включая применение в разработке систем управления, формировании закономерностей в химических и биологических процессах и синхронизации динамических систем. Раздел 5 посвящен созданию схемы синхронизации за конечное время для систем реакции-диффузии, в частности, посредством изучения системы реакции-диффузии Дегна-Харрисона. В разделе 6 представлен разнообразный набор примеров, иллюстрирующих принципы стабильности и синхронизации за конечное время в системе Дегна-Харрисона.

2. Основные инструменты

Цель этого раздела — представить фундаментальные определения и ключевые теоремы, связанные с дробным исчислением, которые необходимы для понимания последующего анализа.

Определение 1 ([21,22]). Интегральный оператор Римана–Лиувилля дробного порядка произвольной интегрируемой функции E можно определить как:

$$я\ {}^{א}_{з}E(z) = \frac{1}{\Gamma(א)} \int_{0}^{я} (г - ς)^{א-1} E(ς)dς, \tag{1}$$

где z 0, 0 < א < 1 и Г(.) — гамма-функция.

Определение 2 ([21,22]). Дробная производная Капуто от E определяется как:

$${}^{C}_{0}Д^{א}_{з}E(z) = \frac{1}{\Gamma(1 - א)} \int_{0}^{я} (г - ς)^{-א} \frac{д}{dς} E(ς)dς, \tag{2}$$

где 0 < א < 1.

Рассмотрим следующую нелинейную систему дробного порядка:

$$\begin{aligned} &{}^{C}_{0}Д^{א}_{я}E(z) = χ(z, E(z)), \quad א \in (0, 1), z > 0, \\ &E(0) = E0. \end{aligned} \tag{3}$$

где $χ : Rn \to Rn$, $E(z) \in Rn$ и , и ${}^{C}_{0}D^{א}_{я}$ — дробная производная Капуто порядка א, точка $E \in Rn$ — точка равновесия нелинейной системы дробного порядка (3) , если $χ(E) = 0$.

Определение 3 ([23]). E называется начальной точкой равновесия дробного порядка нелинейной -система (3) , если E0 = Б или, что то же самое, E(z) E , z [z , +).

Machine Translated by Google

Определение 4 ([23]). E называется точкой равновесия в конечное время нелинейной дробной порядков если существует z > 0, такой что E(z)≠ E ,z [0,z), и E(z) E , z [z , +). система (3),

Определение 5 ([23]). Предположим, что D Ω — открытая окрестность точки 0, если существует функция z (E0) : D\{0} R+ , называемая временем установки, удовлетворяющая следующим условиям, то E называется стабильной с конечным временем. точка

равновесия системы (3). 1. E0 D\{0}, E(z) = E(z, E0) D\{0}, z [0,z (E0)), limz z (E0) E (z) = 0, и E(z) 0 для z [z (E0), +).
2. Для каждой открытой окрестности Uε точки 0 существует открытое подмножество Uδ, содержащее 0 в D, такое, что для E0 Uδ\{0} и z [0,z (E0)), E(z) = E(z, E0) Uε .

Теорема 1 ([23]). E является конечной точкой устойчивости устойчивости нелинейных систем дробного порядка (3) , если существует дифференцируемая функция Ляпунова L : [0, +) × Ω R+. три функции класса M β1, β2, β3 и δ > 0 такие, что 1. β1 E(z)

L(z, E(ʐ)) β2 E(z) , 2. L
(z, E(z)) < β3E(z, E(z)), <
3. $\int_0^{\epsilon} \frac{d\Theta}{\beta_3(E)} + \lambda(\epsilon) : 0 < \epsilon \quad \delta).$

Лемма 1 ([24,25]). Для всех E(z) Rn и א (0, 1) справедливо следующее неравенство

$$\frac{1}{2}\mathrm{D}_{0\zeta}^{\aleph}\left[\mathrm{E}^{\mathrm{T}}(z)\mathrm{E}(z)\right] \quad \mathrm{E}^{\mathrm{T}}(z)\left[\mathrm{D}_{0\zeta}^{\aleph}\mathrm{E}(z)\right], \quad 0. \tag{4}$$

Определение 6 ([26]). Функция Миттаг-Леффлера с א > 0 , отмеченная Eא и определяемая формулой

$$\mathrm{E}_{\aleph}(z) = \sum_{j=0}^{+} \frac{z^{\aleph}}{\Gamma(\aleph j + 1)}, \tag{5}$$

Теорема 2 ([27]). Пусть L(z) — непрерывная и положительно определенная функция, удовлетворяющая условию

$$\mathrm{D}_{0\zeta}^{\aleph} L(z) \quad QL(z), \quad z \quad 0, \tag{6}$$

где 0 < א < 1 и Q — положительная константа. Затем,

$$L(z) \quad L(0)E_{\aleph} \quad Qz^{\aleph}, \quad z \quad [0,z \quad), \tag{7}$$

где Eא — функция Миттаг-Леффлера с временем установления.

$$\text{я} = \left[\frac{\Gamma(\aleph + 1)}{\text{вопрос}}\right]^{\frac{1}{\aleph}}, \tag{8}$$

Более того, L(0) положительна и L(z) = 0 при z z .

3. Описание моделей

Система Дегна-Харрисона иллюстрирует процесс реакции с участием двух веществ: кислорода, обозначаемого как E1, и питательного вещества, обозначаемого как E2. Ключевым аспектом этой системы является то, что избыток кислорода подавляет дыхание, что представлено нелинейной функцией скорости $\frac{E1}{1 + qE_1^2}$. Эта функция улавливает эффект насыщения, при котором тормозящее влияние кислорода увеличивается с увеличением его концентрации, но выравнивается из-за наличия квадратичного члена в знаменателе.

Учитывая, что подобные тормозные явления можно описать с помощью сопоставимых Схемы реакций E1 расширяем закон торможения, используя ту же нелинейную функцию $\frac{1}{1 + qE_1^2}$.

Machine Translated by Google

Это расширение позволяет моделировать более широкий спектр реакционных процессов, в которых ингибирование играет решающую роль.

Модель реакции-диффузии, созданная на основе этого расширенного закона ингибирования, известна как модель реакции-диффузии Дегна-Харрисона. Эта модель характеризуется дифференциальными уравнениями в частных производных, которые описывают пространственную и временную эволюцию концентраций E1 и E2 . Основные уравнения реакционно-диффузионной модели Дегна – Харрисона имеют вид:

$$\begin{cases} \frac{\partial E1(r,z)}{\partial t} = k1 \quad E1 + a \quad E1 \quad z\,1+qE \quad \frac{E1E2}{1}^{2}, & r \quad \Omega, z > 0, \\ \frac{\partial E2(r,z)}{\partial t} = k2 \quad E2 + b \quad \frac{E1E2}{1+qE\ 1}^{2}, & r \quad \Omega, z > 0, \\ \frac{E1}{r} = \frac{E2}{r} = 0, & r \quad \Omega, z > 0, \end{cases} \tag{9}$$

$$E1(r, 0) = E1,0(r) > 0, E2(r, 0) = E2,0(r) > 0, r \quad \Omega.$$

В этом контексте Ω представляет собой ограниченную область в Rn с достаточно гладкой границей, обозначаемую как Ω. Коэффициенты k1 и k2 обозначают скорости диффузии реагентов E1 и E2 соответственно. Параметр q действует как масштабный коэффициент, влияющий на силу взаимодействия между переменными E1 и E2. Эти коэффициенты диффузии являются важнейшими параметрами, которые определяют, насколько быстро вещества распространяются по области Ω.

Константы a, b, q, k1 и k2 считаются положительными на протяжении всего процесса реакции. Эти константы обычно представляют параметры скорости реакции и другие конкретные характеристики кинетики системы.

Оператор Лапласа, учитывающий пространственную диффузию реагентов, равен обозначается . В n-мерном пространстве оператор Лапласа определяется как:

$$= \sum_{\text{я}=1}^{\text{н}} \frac{}{r\,2\,\text{я}},$$

2 где представляет собой вторую частную производную по i-й пространственной координате r 2 ri . В ссылках [28,29] представлена дополнительная математическая основа и применение оператора Лапласа в системах реакция-диффузия, подчеркивая его важность для описания пространственных аспектов процесса.

Модель реакции-диффузии, включающая эти определения и предположения, имеет решающее значение для анализа поведения системы Дегна-Харрисона под влиянием диффузии и нелинейных реакций. Точная формулировка модели позволяет детально изучить динамику и свойства синхронизации системы в области Ω.

4. Анализ устойчивости

Целью исследования точек равновесия устойчивости за конечное время в моделях реакции-диффузии является понимание переходного поведения системы и определение того, может ли она перейти в стабильное состояние в течение конечного периода времени. Этот тип анализа имеет решающее значение для прогнозирования поведения системы в течение ограниченных периодов времени, что имеет важное значение для различных практических приложений. Эти приложения включают проектирование систем управления, формирование закономерностей химических и биологических процессов и синхронизацию динамических систем.

В нашем исследовании мы фокусируемся на единственной точке равновесия, которая служит решением следующей системы уравнений (10). Анализируя эту точку равновесия, мы можем получить представление о свойствах стабильности и синхронизации реакции-диффузии.

Machine Translated by Google

система. Этот анализ помогает гарантировать, что система быстро достигает желаемого состояния и поддерживает это состояние, несмотря на наличие возмущений или изменений в начальных условиях.

$$\begin{aligned} k1 \quad E_1 \quad + a \quad E_1 \quad \frac{E_1 E_2}{1+qE_1^{*2}} = 0, \\ k2 \quad E_2 \quad + b \quad \frac{E_1 E_2}{1+qE_1^{2}} = 0, \end{aligned} \tag{10}$$

Единственная точка равновесия систем (10) определяется выражением

$$Э \quad = (E \quad {}_{E_2)\text{ знак равно а - б, б 1}}, \quad \frac{1 + д(a - б)}{a - б}^{2}, \tag{11}$$

Лемма 2 ([30]). Имеет место следующее неравенство

$$\frac{E\ 1E}{2\ 1 + qE_1^2} \quad \frac{E1E2}{1 + qE_1^2} \quad P\ \bar{E} \quad 1 \quad E1 + \bar{E} \quad 2 \quad E2, \tag{12}$$

где

$$P \quad \text{макс.} \quad \frac{5}{4}K, \frac{1}{\frac{q}{2}}, \quad E2 < \overline{K.} \tag{13}$$

Лемма 3 ([31]). Ω — ограниченная область в Rm с гладкой границей, обозначаемой Ω, которая (Ω) относится к классу C^2 H1 | Ω = θ.Тогда представляет вещественную функцию, и Ξ(r) . Ξ(r)

$$\zeta 1 \quad {}_{\text{Ом}} |\Xi(r)|^{2}{}_{\text{доктор}} \quad {}_{\text{Ом}} | \quad \Xi(r)|^{2}{}_{\text{доктор,}} \tag{14}$$

где ζ1 определяется как положительное собственное значение следующей задачи:

$$\begin{aligned} \Xi(r) = \zeta\Xi(r), \ r \quad \Omega, \quad \Xi(r) \ r \\ \Omega. = 0, \quad \eta \end{aligned} \tag{15}$$

Теорема 3. Точка равновесия E = a b, b $\frac{1 + д(a - б)}{a - б}^{2}$ представляет собой конюшню с конечным временем

точка равновесия нелинейных систем дробного порядка (9) при выполнении следующих условий :

$$|E2| < K, P \quad \text{макс.} \quad \frac{5}{4}K, \frac{1}{\frac{q}{2}}, \quad \min\{k1\zeta1 \quad 2P + 1, k2\zeta2 \quad 2P\} > 0. \tag{16}$$

Время устойчивости точки равновесия за конечное время оценивается как

$$_{я\ 1} = \frac{L2(0)}{2\ \min\{k1\zeta1 \quad 2P + 1, k2\zeta2 \quad 2P\}L2(zmax)}. \tag{17}$$

Доказательство. Положительную функцию Ляпунова построим следующим образом:

$$L2(z) = \frac{1}{2}_{\text{Ом}} (E1 \quad E\ 1)^{2} + (E2 \quad E\ 2)^{2}{}_{\text{доктор,}} \tag{18}$$

где 0Dz обозначает нормальную производную. Таким образом, согласно лемме 2 получаем:

Machine Translated by Google

$$
\begin{aligned}
0DzL2(z) &= \frac{1}{2\,Ом} 0Dz(E1\ \ E\ \ )\Big|^2 + 0Dz(E2\ \ E\ \ 2\ )\Big|^2 \ \text{доктор} \\
&= \int_{Ом} (E1\ \ E\ \ 1\ )0Dz(E1\ \ E\ \ )_1 dr + \int_{Ом} (E2\ \ E\ \ 2\ )0Dz(E2\ \ E\ \ 2\ )\,dr \\
&= \int_{Ом} (E1\ \ E\ \ _1)\,k1\ \ (E1\ \ E\ \ _1)\ \ (E1\ \ E\ \ ) \frac{E1E2}{1 + дЭ\ \ ^2_1}\ \ \frac{Э^*_{1\,2}{}^{E}{}_{2}}{1 + дЭ\ \ _1} \ \text{доктор} \\
&+ \int_{Ом} (E2\ \ E\ \ 2\ )\,k2\ \ (E2\ \ E\ \ 2\ )\ \ \frac{E1E2}{1 + qE\ \ ^2_1}\ \ \frac{Э^*_{1\,2}{}^{E}{}_{2}}{1 + дЭ\ \ _1} \ \text{доктор} \\
&\int_{Ом} (E1\ \ E\ \ _1)(k1\ \ (E1\ \ E\ \ _1)\ \ (E1\ \ E\ \ ))\,dr + \int_{Ом} |E1\ \ E\ \ 1\ \frac{E1E2}{|\ 1 + дЭ\ \ ^2_1}\ \ \frac{Э^*_1 Э^*_2}{1 + дЭ\ \ _1{}^2} \ \text{доктор} \qquad (19) \\
&+ \int_{Ом} (E2\ \ E\ \ 2\ )k2\ \ (E2\ \ E\ \ 2\ )\,dr + \int_{Ом} |E2\ \ E\ \ 2\ \frac{E1E2}{|\ 1 + дЭ\ \ ^2_1}\ \ \frac{Э^*_1 Э^*_2}{1 + дЭ\ \ _1{}^2} \ \text{доктор} \\
&к1 \int_{Ом} (E1\ \ E\ \ _1)\ \ (E1\ \ E\ \ )_1 dr \int_{Ом} (E1\ \ E\ \ _1)\Big|^2 \ \text{доктор} \\
&+ П \int_{Ом} |E1\ \ E\ \ 1\ |(|E1\ \ E\ \ 1\ | + |E2\ \ E\ \ 2\ |)\,dr \\
&+ л2 \int_{Ом} (E2\ \ E\ \ 2\ )\ \ (E2\ \ E\ \ 2\ )\,dr + P \int_{Ом} |E2\ \ E\ \ 2\ |(|E1\ \ E\ \ 1\ | + |E2\ \ E\ \ 2\ |)\,др.
\end{aligned}
$$

Используя формулу Грина, мы достигаем:

$$
\begin{aligned}
0DzL2(z) &\ \ k1 \int_{Ом} |\ (E1\ \ E\ \ 1\ )|^2\,др\ \ к2 \int_{Ом} |\ (E2\ \ E\ \ 2\ )|^2\,др - (1 - П) \int_{Ом} (E1\ \ E\ \ _1)\Big|^2 \ \text{доктор} \\
&+ П \int_{Ом} (E2\ \ E\ \ 2\ )^2\,др + 2П \int_{Ом} |E1\ \ E\ \ _1\,|E2\ \ E\ \ 2\,| \ \text{доктор} \\
&\ \ k1 \int_{Ом} |\ (E1\ \ E\ \ 1\ )|^2\,др\ \ к2 \int_{Ом} |\ (E2\ \ E\ \ 2\ )|^2\,др - (1 - П) \int_{Ом} (E1\ \ E\ \ _1)\Big|^2\,др \qquad (20) \\
&+ П \int_{Ом} (E2\ \ E\ \ 2\ )^2 \ \text{доктор} + П \int_{Ом} |E1\ \ E\ \ 1\ |^2 + |E2\ \ E\ \ 2\ |^2 \ \text{доктор} \\
&\ \ k1 \int_{Ом} |\ (E1\ \ E\ \ 1\ )|^2\,др\ \ к2 \int_{Ом} |\ (E2\ \ E\ \ 2\ )|^2\,др - (1 - 2П) \int_{Ом} (E1\ \ E\ \ _1)\Big|^2\,др \\
&+ 2П \int_{Ом} (E2\ \ E\ \ 2\ )^2\,др.
\end{aligned}
$$

Используя лемму 3, получаем:

$$
\begin{aligned}
0DzL2(z) &\ \ (k1ζ1\ \ 2P + 1) \int_{Ом} (E1\ \ E\ \ _1)\Big|^2 dr\ \ (k2ζ2\ \ 2P) \int_{Ом} (E2\ \ E\ \ 2\ )^2\,др \\
&\ \ 2\ \min\{k1ζ1\ \ 2P + 1, k2ζ2\ \ 2P\}L2(z). \qquad (21)
\end{aligned}
$$

Пусть $\beta 3,1 = 2\ \min\{k1ζ1\ \ 2P + 1, k2ζ2\ \ 2P\}$ — строго положительная константа. Таким образом,

$$
\int_0^{\epsilon} \frac{1}{\ \ } dς = < + \ \ , \frac{\epsilon}{\beta 3,1\ 2\ \min\{k1ζ1\ \ 2P + 1, k2ζ2\ \ 2P\}} \qquad (22)
$$

Функция Ляпунова L2 убывает на интервале $0 \ \ z < z_1 \ \ zмакс$. Этот следует, что $L2(z) > L2(z\ \ ) > L2(zmax)$. Кроме того, у нас есть:

$$
\begin{aligned}
L2(z) &\ \ L2(0)\ \ 2\ \min\{k1ζ1\ \ 2P + 1, k2ζ2\ \ 2P\} \int_0^{я} L2(s)\,dς \\
&\ \ L2(0)\ \ 2\ \min\{k1ζ1\ \ 2P + 1, k2ζ2\ \ 2P\} \int_0^{я} L2(zmax)\,dς \\
&= L2(0)\ \ 2\ \min\{k1ζ1\ \ 2P + 1, k2ζ2\ \ 2P\}L2(zmax)z.
\end{aligned}
$$

Machine Translated by Google

Применяя определения 4 и 5, при приближении z к z L2(z) 1 , функция L2(z) стремится к нулю: (23)

$$\lim_{г\ з\ 1} L2(0) \quad 2\min\{k1\zeta 1 \quad 2P + 1, k2\zeta 2 \quad 2P\}L2(zmax)z \quad = 0. \qquad 1$$

Время урегулирования можно определить как:

$$_{я\ 1} = \frac{L2(0)}{2\min\{k1\zeta 1 \quad 2P + 1, k2\zeta 2 \quad 2P\}L2(zmax)}.$$

Таким образом, E = a b, b a $b^{\frac{1+q(a-б)}{}^{2}}$ представляет собой устойчивую точку равновесия нелинейных систем (9) за конечное время , как указано в теореме 1. □

5. Схема конечной синхронизации.

Целью синхронизации за конечное время в системах реакция-диффузия является достижение скоординированного поведения элементов системы в течение заданного и ограниченного времени . Это гарантирует, что системы синхронизируются в течение определенного периода времени, что важно для различных приложений, таких как проектирование систем управления, создание шаблонов и синхронизация в сложных сетях.

В этом исследовании мы изучаем реакцию системы реакция-диффузия Дегна-Харрисона, которая определяется набором дифференциальных уравнений в частных производных, включающих нелинейные члены реакции и диффузионные процессы. Поведение системы описывается:

$$\begin{aligned}
&{}_{0}^{C}Д^{\chi}_{я}\ E\ 1(r,z) = k1 \quad E\ 1 + a \quad E^{-}\ ^{1+qE^{-}2\frac{E\ 1E\ 2}{1}} + C1,\ 1 && r \quad \Omega, z > 0,\\
&{}_{0}^{C}Д^{\chi}_{я}\ E\ 2(r,z) = k2 \quad E\ 2 + b \quad \frac{E\ 1E}{2\ 1+qE_{1}2} + C2, && r \quad \Omega, z > 0,\\
&E^{-}_{1} = \quad E^{-}_{2} = 0, && r \quad \Omega, z > 0, E\\
&E\ 1(r,\ 0) = E\ 1,0(r) > 0, \qquad 2(r,\ 0) = E\ 2,0(r) > 0,\ r \quad \Omega.
\end{aligned} \tag{24}$$

Учитываются расхождения синхронизации в уравнениях (9)–(24) .

$$e(r,z) = \begin{matrix} e1 \\ e2 \end{matrix} = \begin{matrix} э^{-}1 \quad E1 \\ э^{-}2 \quad E2 \end{matrix}, \tag{25}$$

В последующем обсуждении мы определим линейные контроллеры C1 и C2 , которые приближают решение системы ошибок к нулю, когда z приближается к z.

Определение 7 ([32,33]). Если существует определенный параметр времени z > 0 такое, что

$$\lim_{г\ з} \quad e1(z) \quad + \quad e2(z) \quad = 0, \tag{26}$$

и

$$e1(z) \quad + \quad e2(z) \qquad 0, \quad z \quad z \quad , \tag{27}$$

тогда системы производных реакций (9)–(24) синхронизируются за конечное время.

Теорема 4. Системы «главный-подчиненный», обозначенные уравнениями (9) и (24), достигают стабильного и синхронизированного состояния в течение конечного времени за счет использования двумерного линейного закона управления.

$$\begin{aligned}
C1 &= (1 \quad 2P)e1,\\
C2 &= \quad 2Pe2,
\end{aligned} \tag{28}$$

а время синхронизации оценивается как

$$_{я\ 2} = \frac{\Gamma(\chi + 1)\ 2}{\min\{k1\zeta 1, k2\zeta 2\}}^{\chi\ 1}. \tag{29}$$

Machine Translated by Google

Доказательство. Интегрируя описанное в теореме управление в систему ошибок, получаем следующую динамику:

$$\begin{aligned}
&{}_{0}^{C}D_{я}^{\varkappa} e1(r,z) = k1 \quad e1 \quad 2Pe1 \quad \frac{E\,1E}{2\,1+qE_{1}2} \quad \frac{E1E2}{1+qE\ {}_{1}^{2}}, \quad r \quad \Omega, z > 0,\\
&{}_{0}^{C}D_{я}^{\varkappa} e2(r,z) = k2 \quad e2 \quad 2Pe2 \quad \frac{E\,1E}{2\,1+qE_{1}2} \quad \frac{E1E2}{1+qE\ {}_{1}^{2}}, \quad r \quad \Omega, z > 0,\\
&e1 = \quad e2 = 0, \quad r \quad \Omega, z > 0,\\
&e1(r,\,0) = \bar{E}\,1,0(r) \quad E1,0(r),\ e2(r,\,0) = \bar{E}\,2,0(r) \quad E2,0(r),\ r \quad \Omega.
\end{aligned} \tag{30}$$

Мы используем прямой метод Ляпунова в сочетании с положительно определенной функцией Ляпунова.

$$L3(z) = \frac{1}{2\,\bar{Ом}} \quad {}^{2\,2+ee}_{1\,2} \quad {}_{доктор,} \tag{31}$$

Используя леммы 1–3, имеем:

$$\begin{aligned}
{}_{0}^{C}{}_{3}^{\varkappa Д} \quad L3(z) &= \frac{1}{2\,\bar{Ом}} \quad {}_{z}^{C}{}_{Д}^{\varkappa 2} e\,0\,1 \quad 1\,др \quad \frac{}{+\,2\,Ом} \quad {}_{z}^{C}{}_{Д}^{\varkappa 2} e\,0\,2 \quad {}_{доктор}\\
&\quad {}_{Ом}^{\varkappa} e10D_{я} \quad e1\,др + \quad {}_{Ом}^{\varkappa} e20D_{я} \quad e2\,доктор\\
&= \quad {}_{Ом} e1\ k1 \quad e1 \quad 2Pe1 \quad \frac{E\,1E}{2\,1+qE_{1}2} \quad \frac{E1E2}{1+qE\ {}_{1}^{2}} \quad {}_{доктор}\\
&+ \quad {}_{Ом} e2\ k2 \quad e2 \quad 2Pe2 \quad \frac{E\,1E}{2\,1+qE_{1}2} \quad \frac{E1E2}{1+qE\ {}_{1}^{2}} \quad {}_{доктор}\\
&\quad к1 \quad {}_{Ом} e1 \quad e1\,dr + k2 \quad {}_{Ом} e2 \quad e2\,dr \quad 2P \quad {}_{Ом}{}_{и_{1}}^{2} доктор \quad 2П \quad {}_{Ом}{}_{2}^{2} др\ e\\
&+ \quad {}_{Ом} 2\,(|e1| + |e2|)\,\frac{E\,1E}{1+qE\,2_{\,1}} \quad \frac{E1E2}{1+qE\ {}_{1}^{2}} \quad {}_{доктор}\\
&\quad k1 \quad {}_{Ом} |\ e1|^{2}\,др \quad к2 \quad {}_{Ом} |\ e2|^{2} \quad доктор \quad 2П \quad {}_{Ом} \quad {}^{2\,2+ee}_{1\,2} \quad {}_{доктор}\\
&+ П \quad {}_{Ом}(|e1| + |e2|)\,\bar{E} \quad 1 \quad E1 + \bar{E} \quad 2 \quad E2\,др\\
&\quad k1 \quad {}_{Ом} |\ e1|^{2}\,др \quad к2 \quad {}_{Ом} |\ e2|^{2} \quad доктор \quad 2П \quad {}_{Ом} \quad {}^{2\,2+ee}_{1\,2} \quad др + 2П \quad {}_{Ом} \quad |e1|^{2} + |e2|^{2} \quad {}_{доктор}\\
&\quad k1\zeta 1 \quad {}_{Ом} e_{1}^{2}\,др \quad k2\zeta 2 \quad {}_{Ом}{}_{2}^{2} др\ e\\
&= \quad 2\,\min\{k1\zeta 1, k2\zeta 2\} L3(z).
\end{aligned} \tag{32}$$

Когда параметр ϰ приближается к 1 слева, выражение 0DzL3(z) [34]. Эта ${}_{0}^{C}Д_{я}^{\varkappa}$ L3(z) сходится к конвергенция подразумевает

$$0DzL3(z) \quad 2\,\min\{k1\zeta 1, k2\zeta 2\} L3(z), \tag{33}$$

где β3,2 = 2 min{k1ζ1,k2ζ2} — строго положительная константа. Следовательно, мы можем вывести

$$\int_{0}^{\epsilon} \frac{1}{} d\varsigma = < + \quad , \frac{\epsilon}{2\,\min\{k1\zeta 1, k2\zeta 2\}\,\beta 3,2} \tag{34}$$

Используя теорему 1, устанавливаем, что нулевое решение системы ошибок (30) указывает на конечную устойчивость точки равновесия (e1, e2) = (0, 0). Более того, используя теорему 2, получаем:

Machine Translated by Google

$$L3(z) \quad L3(0)E\text{א} \quad 2\min\{k1\zeta1,k2\zeta2\}z \quad \text{א}, \quad z \quad [0,z \quad 2), \tag{35}$$

с расчетным временем

$$\text{я}\,2 = \frac{\Gamma(\text{א}+1)}{2\ \text{мин}\{k1\zeta1,k2\zeta2\}}^{\text{א}\ 1},$$

когда $z \quad z \quad 2 = \frac{\Gamma(\text{א}+1)}{2\ \text{мин}\{k1\zeta1,k2\zeta2\}}^{\text{א}\ 1}$, мы можем заключить, что

$$L3(z) \quad 0, \tag{36}$$

Следовательно, системы «главный-подчиненный», обозначенные уравнениями (9) и (24), достигают стабильные и синхронизированные состояния в пределах конечной продолжительности согласно определению 7. □

6. Численные примеры с моделированием

В этом разделе мы представляем разнообразный набор примеров, иллюстрирующих принципы стабильности и синхронизации за конечное время в системе Дегна – Харрисона.

В этих примерах рассматриваются различные сценарии, включая различные начальные условия, значения параметров и стратегии управления, что дает представление о поведении системы. Посредством детального анализа и численного моделирования мы стремимся обеспечить всестороннее понимание того, как стабильность и синхронизация в конечном времени проявляются в практическом контексте, проливая свет на динамику системы Дегна – Харрисона.

Численное моделирование в этих примерах проводится с использованием метода конечных разностей, важного инструмента для анализа реакционно-диффузионных систем Дегна – Харрисона дробного порядка. Этот метод дискретизирует уравнения в частных производных в алгебраические уравнения, обеспечивая точную численную аппроксимацию и детальное моделирование динамики системы.

Упрощая моделирование сложных явлений, анализ стабильности и оптимизацию параметров, метод конечных разностей расширяет наше понимание химических и биологических систем.

Пример 1. Определим область определения Ω = [0, 25] и параметр z в пределах [0, 100]. Значения параметров выбираются следующие:

Переменная	Ценить
к1	1
к2	1
а	0,78
б	0,01275
д	0,75
П	0,5774
ζ1	104
ζ2	104
א	0,99
Н	150

с начальными условиями:

$$\begin{aligned} E1,0(r) &= 0,5(1 \quad \cos(5r)), \\ E2,0(r) &= 0,15(1 \quad \sin(4r)). \end{aligned} \tag{37}$$

Условия теоремы 3 выполнены:

$$|E2| < K = 0,3, \ P \quad \text{макс.} \quad \frac{5}{4}K, \frac{1}{2} \frac{}{q} = 0,5774,$$

$$\min\{k1\zeta1 - 2P + 1, k2\zeta2 - 2P\} = 9,9988 \times 103 . \tag{38}$$

Machine Translated by Google

При расчете получаем:

$$\begin{aligned} L2(0) &= 16{,}8056, \\ L2(100) &= 8{,}4449 \times 10^{6}, \end{aligned} \tag{39}$$

Время конечной устойчивости точки равновесия оценивается как:

$$_{я\,1} = \frac{L2(0)}{1{,}k2\zeta 2 \quad 2P\}L2(100)} = 99{,}5134 \text{ с, 2 мин}\{k1\zeta 1 \quad 2P + \tag{40}$$

где

$$L2(99{,}5082) = 8{,}6830 \times 10^{6}. \tag{41}$$

Представленные на рисунках 1 и 2 рисунки изображают пространственно-временные решения системы (9) с однородными граничными условиями Неймана. Согласно теореме 3, эти решения являются примером устойчивости на конечном времени в точке равновесия E = (0,7672, 0,0240). Чтобы проверить это утверждение численно, на рисунке 3 показаны пространственно-временные решения системы вместе с соответствующими ошибками, уделяя особое внимание одномерному пространству. Это визуальное представление убедительно иллюстрирует, что функция Ляпунова сходится к нулю при приближении z к z = 99,5134 с (как показано на рисунке 4).

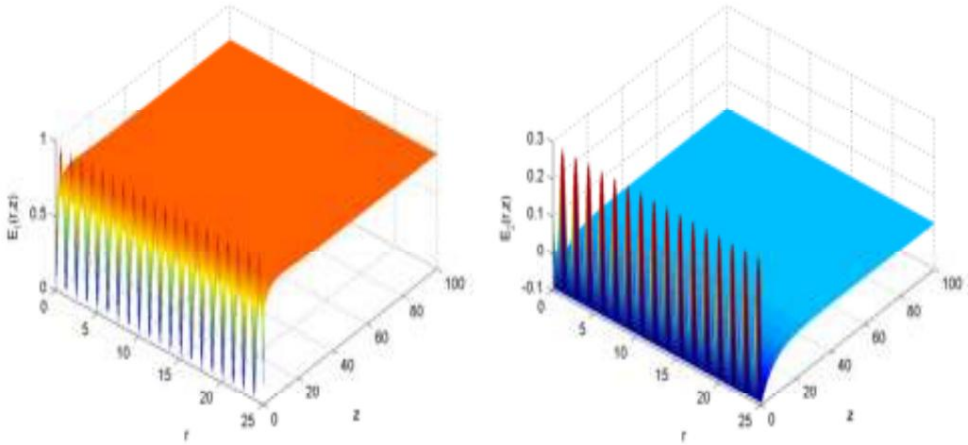


Рис. 1. Динамическое поведение системы (9): E1(r,z) и E2(r,z).

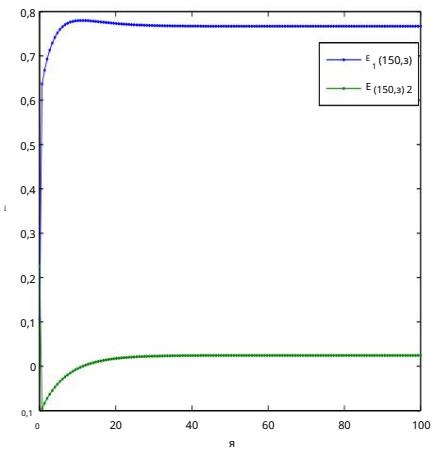


Рис. 2. Решения системы (9): E1(150,z), E2(150,z).

Machine Translated by Google

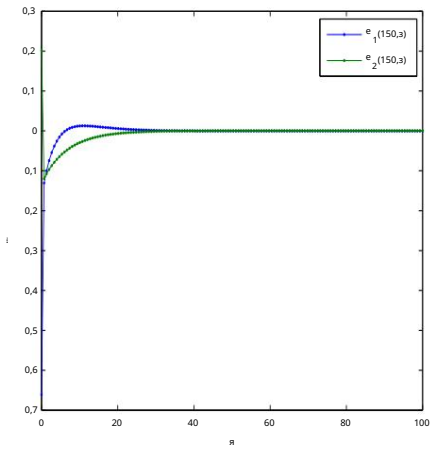


Рис. 3. Решения системы ошибок (9): e1(150,z), e2(150,z).

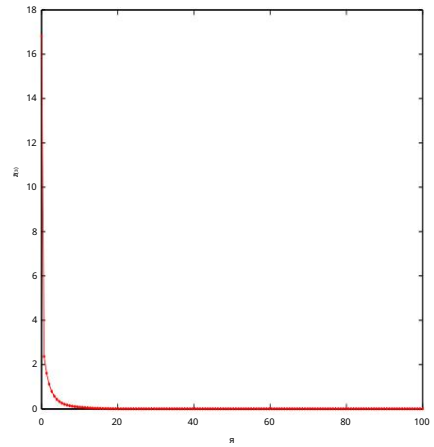


Рис. 4. Оценка функции Ляпунова L2(z) .

Пример 2. Параметры указаны следующим образом:

Параметр	Ценить
к1	0,1885
к2	0,1885
а	3
б	1,25
	1
д א	0,9
п	3.7
ζ1	0,6
ζ2	0,6
Н	50

с областью определения Ω = [0, 10] и z [0, 5]. Начальные условия для систем ведущий-подчиненный (9) и (24) устанавливаются следующим образом:

$$\begin{aligned} E1,0(r) &= 1,5, \qquad \bar{E}\,1,0(r) = 1, \\ E2,0(r) &= 1,5, \qquad \bar{E}\,2,0(r) = 1, \end{aligned} \tag{42}$$

Мы стремимся сформулировать два контроллера, обозначенные как C1 и C2, как описано ниже:

$$\begin{aligned} C1 &= 6,4e1, \\ C2 &= 7,4e2, \end{aligned} \tag{43}$$

Machine Translated by Google

имеем L3(0) = 12,5 и

$$L3(z) \quad M(z) = 12{,}5E0{,}9 \quad 0{,}2262z^{0{,}9}, \quad z \quad [0, z\,2), \tag{44}$$

Время синхронизации оценивается как:

$$_{я\,2} = \frac{\Gamma(\varkappa + 1)}{2\ \text{мин}\{k1\zeta1, k2\zeta2\}}^{\varkappa^{1}} = 4{,}9937\ \text{с}, \tag{45}$$

и

$$L3(5) \quad L3(4{,}9937) = 4{,}6605 \times 10^{\quad 6}, \tag{46}$$

где 4,9937 z 5. Можно заключить, что

$$L3(z) \quad 0. \tag{47}$$

На рисунках 5–7 показана пространственно-временная динамика систем (9) и (24), дающая представление как о двумерных, так и об одномерных пространствах. Чтобы предоставить численные доказательства, мы представляем пространственно-временные решения системы синхронизации ошибок (30) на рисунках 7 и 8. Эта эволюция ясно демонстрирует, что ошибки сходятся к нулю при приближении z к z = 4,9937 с, тем самым иллюстрируя поведение система. Кроме того, рисунок 9 иллюстрирует эту сходимость за конечное время в пределах указанной продолжительности z = 4,9937 с.

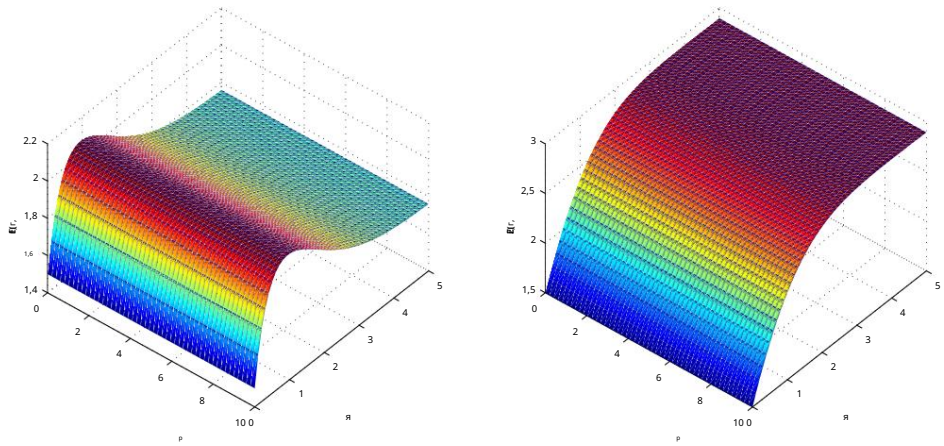


Рис. 5. Динамическое поведение системы (9): E1(r,z) и E2(r,z).

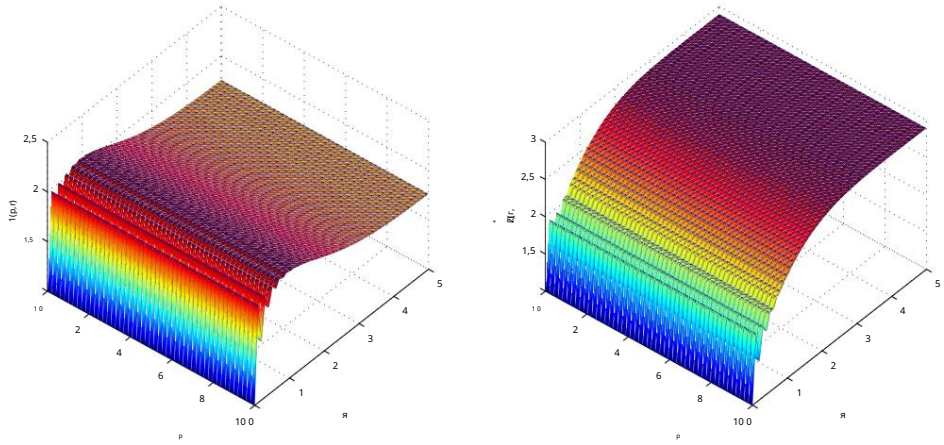


Рис. 6. Динамическое поведение системы (24): E¯ 1(r,z) и E¯ 2(r,z).

Machine Translated by Google

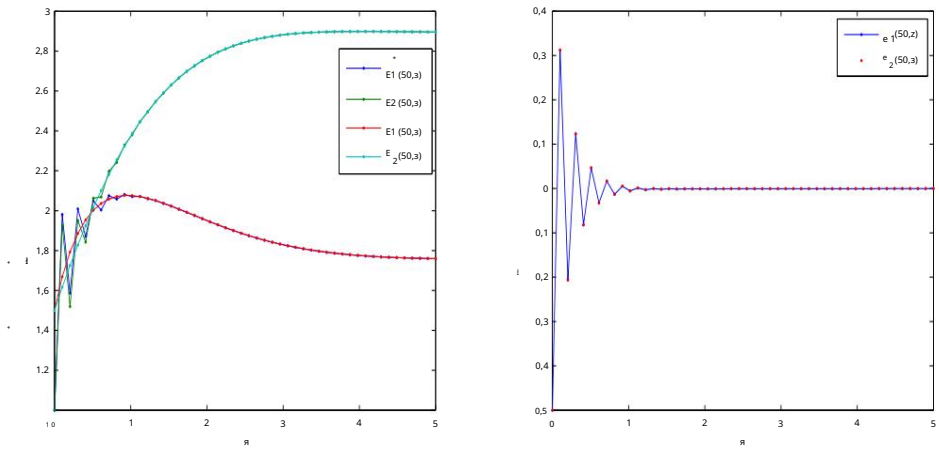


Рис. 7. Решения систем ведущий-ведомый (9), (24) и системы ошибок (30) при r = 50.

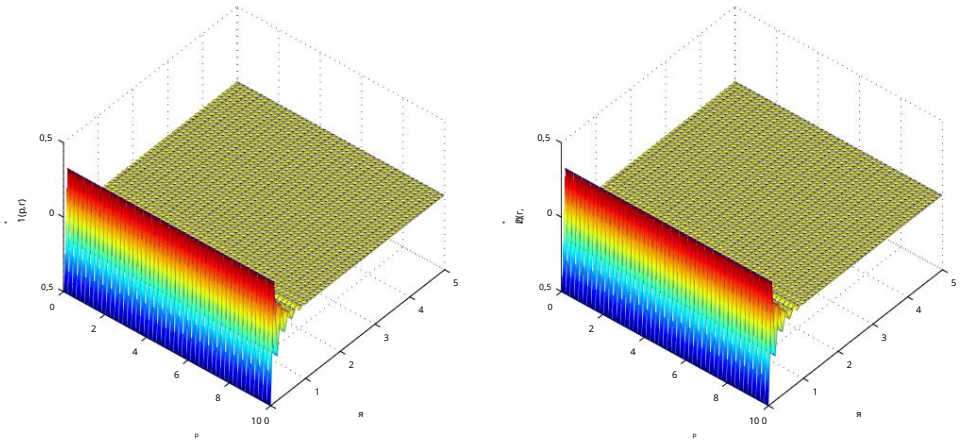


Рис. 8. Динамическое поведение системы ошибок (30): e1(r,z) и e2(r,z).

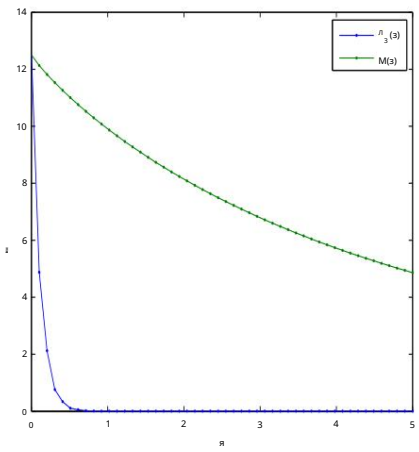


Рис. 9. Оценка функции Ляпунова L3(z) и M(z).

7. Выводы

Это исследование знаменует собой начало инновационного исследования систем реакции-диффузии Дегна-Харрисона, внося новые вариации, которые обещают выявить новые уровни сложности в пространственно-временных моделях. Наше исследование направлено на разработку новаторских методологий для исследования стабильности и синхронизации в конечном времени в рамках этих моделей, обеспечивая всестороннее понимание их динамики, особенно в контексте нелинейных бактериальных колоний. Чтобы начать расследование, мы используе

Machine Translated by Google

основополагающие принципы теории Ляпунова для создания надежных основ для анализа устойчивости точек равновесия и явлений синхронизации за конечное время. Эти теоретические основы служат основой для наших последующих экспериментальных усилий.

Чтобы эмпирически подтвердить эффективность и надежность предлагаемых нами методологий, мы проводим обширные вычислительные эксперименты. Эти эксперименты включают тщательное моделирование систем Дегна-Харрисона дробного порядка, предназначенных для отражения динамики и поведения бактериальных колоний в рамках реакции-диффузии.

По мере продвижения вперед наш следующий этап исследований будет сосредоточен на расширении и совершенствовании наших теоретических основ, изучении новых приложений в биологических системах за пределами бактериальных колоний и совершенствовании наших вычислительных моделей для большей эффективности и точности. Мы планируем подтвердить наши выводы посредством совместной экспериментальной работы, способствуя междисциплинарному сотрудничеству для интеграции различных точек зрения

Кроме того, мы будем активно распространять наши результаты по различным каналам. Благодаря этим усилиям мы стремимся продвинуться в области систем реакции-диффузии и внести вклад в более глубокое понимание сложных пространственно-временных явлений. Наша приверженность расширению границ знаний в этой динамичной области исследований обещает захватывающие открытия и инновации в ближайшем будущем.

Вклад авторов: Концептуализация, MAH; Формальный анализ, IB; Расследование, A.A.; Методология , WGA; Ресурсы, AO и AH; Программное обеспечение, CM; Валидация, AO; Визуализация, IB и MAH; Написание – рецензирование и редактирование, AH. Все авторы прочитали и согласились с опубликованной версией рукописи.

Финансирование: Данное исследование не получило внешнего финансирования.

Заявление о доступности данных: оригинальные материалы, представленные в этом исследовании, включены в статью; дальнейшие запросы можно направить соответствующему автору.

Конфликты интересов: Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Ссылки

1. Месдуи, Ф.; Уаннас, А.; Шавагфе, Н.; Грасси, Дж.; Фам, В.Т. Методы синхронизации реакции Дегна-Харрисона. диффузионные системы. IEEE Access 2020, 8, 91829–91836. [Перекрестная ссылка]
2. Уаннас, А.; Абделли, М.; Одибат, З.; Ван, Х.; Фам, ВТ; Грасси, Дж.; Алсаеди, А. Управление синхронизацией в реакции-диффузии системы: Приложение к системе Лендьеля-Эпштейна. Сложность 2019, 2019, 2832781. [CrossRef]
3. Амбросио, Б.; Азиз-Алауи, М.А. Синхронизация и управление связанными реакционно-диффузионными системами типа ФитцХью–Нагумо . Вычислить. Математика. Прил. 2012, 64, 934–943. [Перекрестная ссылка]
4. Туркылмазоглу, М.; Алофи, А.С. Образование вихрей жидкости в закрученном контейнере с учетом дробной производной по времени Капуто. Фрактальный фрактал. 2024, 8, 231. [CrossRef]
5. Уаннас, А.; Ван, Х.; Фам, ВТ; Грасси, Дж.; Хюнь, В.В. Результаты синхронизации для класса пространственно-временных систем с частными производными дробного порядка на основе дробного подхода Ляпунова. Граница. Значение Пробл. 2019, 2019, 74. [CrossRef]
6. Ван, Б.; Уаннас, А.; Караджа, Ю.; Ся, ВФ; Джаханшахи, Х.; Альхатиб, А.Ф.; Нур, М. Гибридный подход к синхронизации между двумя реакционно-диффузионными системами целого и дробного порядка, применяемый к определенным химическим моделям. Фракталы 2022, 30, 2240145. [CrossRef]
7. Шривастава, М.; Ансари, СП; Агравал, СК; Дас, С.; Люнг, АУТ Антисинхронизация между идентичными и неидентичными хаотическими системами дробного порядка с использованием метода активного управления. Нелинейная Дин. 2014, 76, 905–914. [Перекрестная ссылка]
8. Джаханшахи, Х.; Саджади, СС; Бекирос, С.; Али А.А. К вопросу о развитии дробно-гиперхаотической экономической системы переменного порядка с контроллером с прогнозированием нелинейной модели. Фракталы солитонов хаоса 2021, 144, 110698. [CrossRef]
9. Хеннауи, А.А.; Фам, ВТ; Тоаи, вице-президент; Уаннас, А.; Грасси, Дж.; Момани, С. От карты Лози к дробной мемристивной карте Лози. Евро. Физ. Дж. Спец. Вершина. 2023, 232, 2385–2393. [Перекрестная ссылка]
10. Хеннауи, А.А.; Уаннас, А.; Булаарас, С.; Фам, ВТ; Тахер Азар, А. Дробная карта со скрытыми аттракторами: хаос и контроль. Евро. Физ. Дж. Спец. Вершина. 2020, 229, 1083–1093. [Перекрестная ссылка]
11. Уаннас, А.; Хеннауи, А.А.; Ван, Х.; Фам, ВТ; Булаарас, С.; Момани, С. Бифуркация и хаос в дробной форме. Карта типа Энона-Лози. Евро. Физ. Дж. Спец. Вершина. 2020, 229, 2261–2273. [Перекрестная ссылка]
12. Ву, Ю.; Хуанг, Т. Синхронизация хаотических систем за конечное время с изменяющимися во времени задержками и несоответствиями параметров. Нелинейный Дин. 2024, 77, 729–736.
13. Ху, Дж.; Ву, Х. Синхронизация хаотических систем дробного порядка за конечное время. Коммун. Нелинейная наука. Число. Симул. 2018, 59, 440–452.

Machine Translated by Google

14. Хамадне, Т.; Хиуаль, А.; Сааде, Р.; Абдун, Массачусетс; Альмутаири, Дания; Халид, Т.А.; Уаннас, А. Общие методы синхронизации дробных дискретных систем реакция-диффузия, применяемые к модели гликолиза. Фрактальный фрактал. 2023, 7, 828. [CrossRef]
15. Хамадне, Т.; Хиуаль, А.; Альсайед, О.; Аль-Хассауна, Ю.А.; Аль-Хусбан, А.; Уаннас, А. Модель ФитцХью – Нагумо, описываемая дробно-разностными уравнениями: устойчивость и численное моделирование. Аксиомы 2023, 12, 806. [CrossRef]
16. Гарви, М.Р. Конечно-разностные схемы для уравнений реакции-диффузии, моделирующих взаимодействие хищник-жертва в M ATLAB. Бык. Математика. Биол. 2007, 69, 931–956. [Перекрестная ссылка]
17. Хьюстон, П.; Шваб, К.; Сюли, Э. Разрывные методы конечных элементов для решения задач адвекции-диффузии-реакции. СИАМ Дж. Число. Анальный. 2002, 39, 2133–2163. [Перекрестная ссылка]
18. Буэно-Оровио, А.; Кей, Д.; Беррейдж, К. Спектральные методы Фурье для дробных в пространстве уравнений реакции-диффузии. БИТ Число. Математика. 2014, 54, 937–954. [Перекрестная ссылка]
19. Месдуи, Ф.; Шавагфе, Н.; Уаннас, А. Глобальная синхронизация систем диффузии реакций N-компонентов дробного и целого порядка : применение к биохимическим моделям. Математика. Методы Прикл. наук. 2021, 44, 1003–1012. [Перекрестная ссылка]
20. Сонг, Г.; Чжан, Х.; Ван, З.; Чен, Ю.; Чен, П. Асимптотический локальный метод конечных разностей дробного волнового уравнения и его моделирование вязкого сейсмического волнового поля. Геофизика 2020, 85, T179–T189. [Перекрестная ссылка]
21. Аль-Хусбан А.; Дженина, Н.; Сааде, Р.; Уаннас, А.; Грасси, Дж. Новый несоизмеримый дробный порядок COVID 19: моделирование и динамический анализ. Математика 2023, 11, 555. [CrossRef]
22. Самко, С.Г.; Килбас, А.А.; Маричев, О.И. Дробные интегралы и производные: теория и приложения; Издательство Gordon and Breach Science : Базель, Швейцария, 1993.
23. Фэн, З.; Сян, З. Устойчивость нелинейных систем дробного порядка на конечном времени. Хаос 2024, 34, 023105. [CrossRef] [ПабМед]
24. Уаннас, А.; Абдельмалек, С.; Бендуха С. Сосуществование некоторых типов синхронизации хаоса в дифференциальных уравнениях дробного порядка; Техасский государственный университет, факультет математики: Сан-Маркос, Техас, США, 2017 г.
25. Агила-Камачо, Н.; Дуарте-Мермуд, Массачусетс; Гальегос, Дж. А. Функции Ляпунова для систем дробного порядка. Коммун. Нелинейный наук. Число. Симул. 2014, 19, 2951–2957. [Перекрестная ссылка]
26. Ягуб З.; Данан, Дж.; Хаммуш, З.; Аллали, К. Математический анализ эпидемической модели SEIR дробного порядка двух штаммов. Результаты Нелинейный анализ. 2024, 7, 156–175.
27. Цзян Дж.; Ли, Х.; Чжао, К.; Цао, Д.; Гуйрао, Л.Г. Стабильность в конечном времени и управление скользящим режимом для неопределенной дробной переменной заказать нелинейные системы. Адв. Отличие. уравнение 2021, 2021, 127. [CrossRef]
28. Файрен В.; Веларде, М.Г. Периодические во времени колебания в модели дыхательного процесса бактериальной культуры. Дж. Математика. Биол. 1979, 8, 147–157. [Перекрестная ссылка]
29. Лисена Б. Некоторые глобальные результаты для системы Дегна — Харрисона с диффузией. Медитировать. Дж. Математика. 2017, 14, 91. [CrossRef]
30. Абу Фалаха, И.; Хиуаль, А.; Омар Аль-Кадри, М.; АЛЬ-Хассауна, Ю.А.; Аль-Хусбан, А.; Хамадне, Т.; Уаннас, А. Синхрониза- Решение дробных уравнений в частных производных линейными методами. Аксиомы 2023, 12, 728. [CrossRef]
31. Пан, Дж.; Лю, Х.; Чжун, С. Критерии устойчивости импульсных реакций-диффузии нейронных сетей Коэна-Гроссберга с изменяющимися во времени задержками. Математика. Вычислить. Модель. 2010, 51, 1037–1050. [Перекрестная ссылка]
32. Ван, Л.; Ян, Х.; Лю, Х.; Чен, Х. Синхронизация за конечное время сетей регуляции отложенных генов дробного порядка с комплексным значением . Фрактальный фрактал. 2023, 7, 347. [CrossRef]
33. Ли, Ю.; Ян, Х.; Ши, Л. Синхронизация за конечное время для конкурентных нейронных сетей со смешанными задержками и неидентичными возмущениями. Нейрокомпьютинг 2016, 185, 242–253. [Перекрестная ссылка]
34. Подлубный И. Дробные дифференциальные уравнения: введение в дробные производные, дробные дифференциальные уравнения, в методы Их решение и некоторые из их приложений; Elsevier: Амстердам, Нидерланды, 1998 г.

Отказ от ответственности/Примечание издателя: Заявления, мнения и данные, содержащиеся во всех публикациях, принадлежат исключительно отдельному автору(ам) и соавторам(ам), а не MDPI и/или редактору(ам). MDPI и/или редактор(ы) не несут ответственности за любой вред людям или имуществу, возникший в результате любых идей, методов, инструкций или продуктов, упомянутых в контенте.

Machine Translated by Google

вычисление

MDPI

Статья

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЛАВЛЕНИЯ ДУПЛЕКСА ДНК С серебряно-опосредованной парой оснований цитозин-цитозин

Елена Борисовна Гусарова и Наталья Александровна Ковалева *

Федеральный исследовательский центр химической физики имени Н.Н. Семенова Российской академии наук, Россия, 119991, Москва, ул. Косыгина, 4 * Адрес для корреспонденции: natykov@gmail.com

Аннотация: Металлопосредованные пары оснований в молекулах двойной спирали ДНК открывают широкие возможности для биосенсоров на основе кластеров ДНК с серебром благодаря их низкой токсичности и возможности применения в дизайне лекарственных средств. Несмотря на интенсивные экспериментальные и вычислительные исследования, молекулярные механизмы стабилизации двойной спирали парами оснований, опосредованными серебром, в основном неизвестны. Мы провели полноатомное молекулярно-динамическое моделирование 3додекамерной двойной спирали ДНК (последовательность 5'- TAGGTCAATACT -'- 3'ATCCACTTATGA-5') с несоответствием цитозин-цитозин или цитозин-Ag+-цитозин в центре дуплекса. Мы расширили ранее предложенный набор параметров взаимодействия иона серебра в серебро-опосредованной паре, чтобы учесть его диссоциацию. Используя этот новый потенциал, мы изучили, как добавление иона серебра может стабилизировать двойную спираль ДНК, содержащую одно несоответствие цитозин-цитозин. В частности, мы обнаружили, что спираль с цитозин-Ag+-цитозиновым несоответствием имеет большую температуру плавления, чем спираль с цитозин-цитозиновым. Этот стабилизирующий эффект иона серебра качественно согласуется с экспериментальными данными. Центральная область дуплекса с несоответствием цитозин-Ag+-цитозин (в отличие от несоответствия цитозин-цитозин) достаточно стабильна, чтобы предотвратить образование пузырьков при умеренных температурах во время плавления. Результаты этого моделирования могут быть использованы для разработки новых структур ДНК, опосредованных металлами.

Ключевые слова: пара металл-основание; ДНК, опосредованная серебром; температура плавления; молекулярная динамика

check for updates

Цитирование: Гусарова, Е.Б.; Ковалева, Н. А. Молекулярно-динамическое моделирование плавления дуплекса ДНК с опосредованной серебром парой оснований цитозин-цитозин. Вычисление 2024, 12, 145. https://doi.org/ 10.3390/ Computation12070145.

Академический редактор: Клаудио Амовилли

Поступила: 2 мая 2024 г.
Пересмотрено: 4 июля 2024 г.
Принято: 10 июля 2024 г.
Опубликовано: 12 июля 2024 г.

Копирайт: © 2024 авторов. Лицензиат MDPI, Базель, Швейцария. Эта статья находится в открытом доступе. распространяется на условиях и условия Creative Commons Лицензия с указанием авторства (CC BY) (https://creativecommons.org/licenses/by/ 4.0/).

1. Введение

Двойная спираль ДНК часто используется в нанотехнологиях для широкого спектра применений. Одним из многообещающих примеров является обширный поиск альтернатив водородным связям (H-связям) между комплементарными азотистыми основаниями. Привлекательным подходом является создание пары оснований с катионами металлов, имеющими высокое сродство к азотистым основаниям. Такой подход перспективен для создания наноматериалов на основе ДНК с улучшенными термическими, механическими и химическими свойствами, а также с новыми функциональными возможностями [1–4]. Двойная спираль ДНК, в которой нуклеотидные основания соединены ионами металлов вместо водородных связей в парах оснований Уотсона-Крика, называется металлизированной ДНК (M-ДНК) [5]. Такие системы представляют интерес в связи с их потенциальным использованием в качестве чувствительных и специфичных металлосенсоров и биосенсоров [6,7]. Как правило, включение неканонических пар оснований в гомохиральную или гетерохиральную ДНК приводит к снижению стабильности двойной спирали [8]. Такое уменьшение во многом зависит от конкретной структуры неканонических пар оснований, их природы и последовательности, в которую они включены. В 2009 г. Оно и Мияке [9] описали две структуры с металлопосредованными парами, в частности, цитозин–Ag+–цитозин (C:Ag:C). Их исследования открыли широкие возможности для ДНК-нанотехнологий, наноэлектроники и ДНК-оригами благодаря высокой специфичности связывания серебра [10,11]. Ионы серебра привлекли особое внимание из-за их низкой токсичности и возможности применения в разработке лекарств [12,13]. В результате появились многочисленные исследования искусственной ДНК, содержащ
В природной ДНК спаривание, опосредованное серебром, было исследовано в канонических двойных спиралях с несоответствием пар оснований [9] и в цепях без канонических пар [18–21]. Высокая химия

Machine Translated by Google

продемонстрирована термическая стабильность пары оснований C:Ag:C [22–26] и изучена роль pH в стабильности пары оснований C:Ag:C [27]. Экспериментально наблюдалось влияние серебра на температуру плавления двойной спирали ДНК с включениями цитозин-цитозин (C:C) в качестве комплементарной пары [28,29]. Температура плавления олигонуклеотида с несоответствием C:C повышается в присутствии ионов серебра в растворе.

К настоящему времени разработан ряд теоретических моделей динамики спаривания оснований в ДНК различной степени детализации. Эти модели стимулируют значительный прогресс в области плавления ДНК [30,31]. Предлагаемые модели варьируются от мезоскопического уровня (модели, основанные на модели Пейрара-Бишопа (ПБ) [32,33]) до крупнозернистой модели (КГ) с несколькими шариками на нуклеотид [34]. Мезоскопические модели, такие как модель ПБ и ее вариации, используют набор эффективных потенциалов для описания основных взаимодействий в двойной спирали ДНК, а именно водородных связей и стэкинг-взаимодействий [35–38]. С помощью мезоскопических моделей было исследовано влияние одиночных, двойных и тройных несовпадений на стабильность дуплексов. Было обнаружено, что многие комбинации множественных несовпадений удивительно стабильны [39]. Рассчитаны температуры плавления последовательностей, содержащих металлопосредованные пары C:C и тимин-тимин [40]. Использование модели CG, в которую включены только одновалентные и двухвалентные ионы, позволяет воспроизвести экспериментальные температуры плавления олигонуклеотидов [41]. Во многих мезоскопических и компьютерных моделях эффективный нелинейный потенциал, потенциал Леннарда-Джонса [42–44] или потенциал Морзе [45–47] используются для имитации водородной связи для описания процессов плавления.

Плавление ДНК также изучалось с помощью полноатомного молекулярно-динамического моделирования (МД) [48–50]. Однако количество исследований полноатомного МД-моделирования ДНК с парами, опосредованными металлами, очень ограничено. Ранее был изучен максимально короткий Ag+ -опосредованный дуплекс гомооснований цитозина — тетрамер, образованный Ag+ -мостиками между двумя нитями ДНК [16]. Группа Лопеса-Асеведо сообщила об исследовании Ag+ -парных нитей гомооснования цитозина с использованием комбинации квантовых и классических МД-расчетов [51]. Они показали, что параллельная двойная спираль обладает высокой стабильностью, тогда как антипараллельная двойная спираль раскручивается и теряет свою спиральную структуру. Цитозины спарены в трансоидной конформации в параллельной двойной спирали, тогда как в антипараллельной двойной спирали они находятся в цисоидной конформации (см. рис. 1а, б). Связь в паре C:Ag:C в цисоидной конформации слабее, чем в трансоидной, за счет дополнительной водородной связи , образующейся между кислородом одного цитозина и аминогруппой комплементарного цитозина [51–53]. Подход, развитый в работах Лопеса-Асеведо и др. [51] был успешно использован при МД-моделировании опосредованного серебром спаривания оснований в параллельно-цепочечной ДНК [29]. Однако МД-моделирование разрушения пары C:Ag:C на сегодняшний день представляет собой сложную задачу. Потенциалы обычно используют для описания связи иона серебра с азотом цитозина как ковалентной связи. Описание ковалентной связи МД основано на гармоническом потенциале, который не дает возможности разрыва связи. Поэтому для описания разрушения пары C:Ag:C приходится использовать другой потенциал. Одна из возможностей — использовать потенциал Морса, который явно включает эффекты разрыва связи и существование несвязанных состояний.

В данной статье мы предлагаем использовать потенциал Морзе для описания связи иона серебра с цитозином по аналогии с водородной связью в некоторых мезоскопических моделях. Мы смоделировали антипараллельную двухцепочечную спираль ДНК с несоответствием C:Ag:C. Мы подобрали параметры потенциала Морзе, воспроизводящие процесс плавления пары при посредничестве серебра. Получены кривые плавления и оценены температуры плавления. Мы полагаем, что исследования температуры плавления M-ДНК, безусловно, расширят наши знания о свойствах двойной спирали ДНК, связанных с парами оснований, опосредованными металлами.

Machine Translated by Google

Расчет 2024, 12, 145 3 из 11

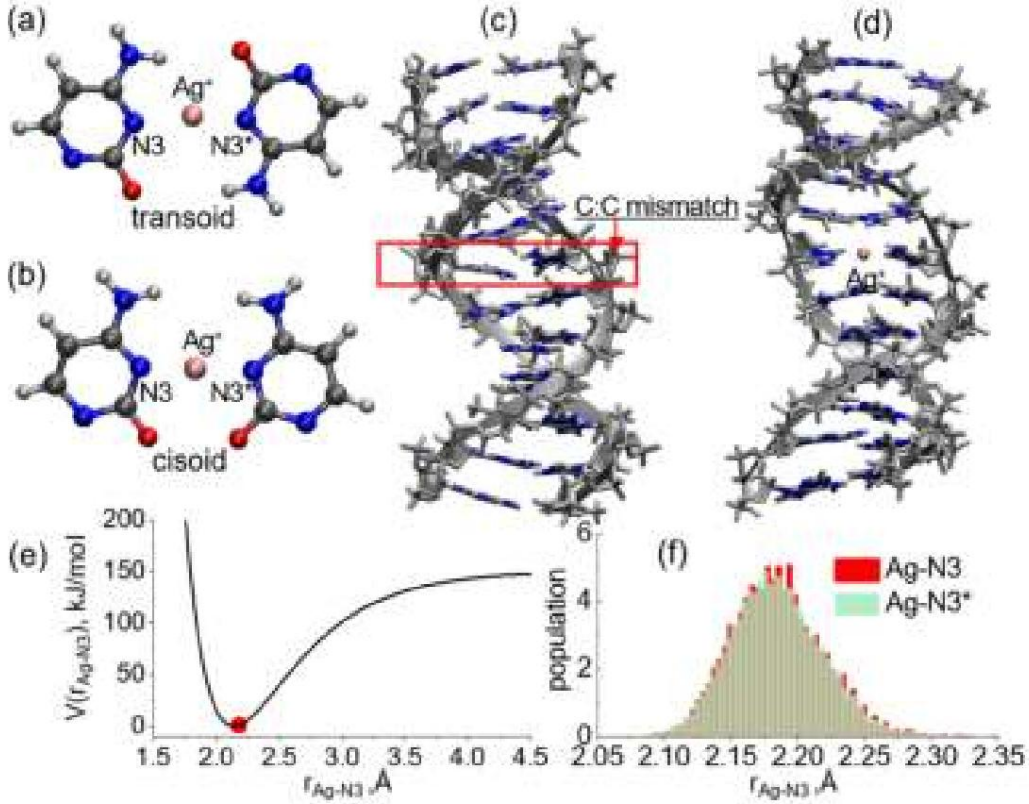


Рисунок 1. Структурные вариации пары оснований C:Ag:C. (а) трансоидная и (б) цисоидная конформации.
N3* определяет атом N3 в комплементарном основании. Двойная спираль ДНК: (c) с чистым несоответствием C:C
и (d) с C:Ag:C, образовавшимся в ходе классической МД. Снимок двойной спирали при t = 100 нс и (г) с C:Ag:C,
показано. (д) Направленная потенциальная кривая Морса. Красная точка соответствует равновесному значению rAg- . (д)
N3 при МД-моделировании при температуре 300 K. (e) Гистограмма (населенность в процентах) rAg-N3 при МД-
расстояние между ионом серебра и цитозиновым азотом rAg-N3 при температуре 300 K. Гистограмма представляла собой
построен с использованием 75 бункеров между 2,05 и 2,35.

Рисунок 1. Структурные вариации пары оснований C:Ag:C. (а) трансоидная и (б) цисоидная конформации.
определяет атом N3 в комплементарном основании. Двойная спираль ДНК: (c) с чистым несоответствием C:C N3*
образовавшимся во время классической МД. Снимок двойной спирали при t = 100 нс.
Подобранная потенциальная кривая Морса. Красная точка соответствует равновесному значению
моделировании при температуре 300 K. (e) Гистограмма (населенность в процентах)
расстояние между ионом серебра и цитозиновым азотом rAg-N3 при температуре 300 K. Гистограмма представляла собой
построен с использованием 75 бункеров между 2,05 и 2,35.

и методы.

В этой статье мы предлагаем использовать потенциал Морзе для описания связи серебра 2. Материалы
ион с цитозином по аналогии с водородной связью в некоторых мезоскопических моделях. Мы
смоделировали антипараллельную двухцепочечную спираль ДНК с несоответствием C:Ag:C. Мы
подали ’ -ATCCACTTATGA-5’ с несоответствием комплементарности в шестой позиции, так как C:C
Рассмотрены параметры потенциала Морзе, воспроизводящие процесс плавления пары
опосредованно . Исходная структура была создана с помощью программы Авогадро [54].
по серебру. Получены кривые плавления и оценены температуры плавления. Мы считаем , что изначально двойная
спираль ДНК была помещена в кубический ящик так, чтобы минимальное расстояние
что исследования температуры плавления М-ДНК, безусловно, расширят наши знания о том, что расстояние между
спиралью и краями коробки превышает 1 нм. Затем молекулы воды были
Свойства двойной спирали ДНК, связанные с парами оснований, опосредованными металлами.
добавлен в систему. Мы использовали водную модель TIP3P. Чтобы нейтрализовать заряд
В расчетную ячейку было добавлено 22 иона Na+ . Расчеты были проведены
2. Материалы и методы.
в периодической ячейке с использованием стохастической динамики в качестве термостата. Уравнения движения были
использованием чехардыалгоритма верле. Этапы интеграции были
поддерживалось с помощью стохастического термостата.
поддерживалось с помощью баростата Парринелло-Рахмана с постоянной времени 2 пс.
Двухцепочечная спираль ДНК (12 пар оснований) с последовательностью 5'-TAGGTCAATACT- интегрирована с
3'-3’-ATCCACTTATGA-5’ с несоответствием комплементарности в шестой позиции, как 2 фс. Постоянная температура
Рассматривалось C:C. Исходная структура была создана с помощью программы Авогадро [54]. Давление
LINCS было ограничение минимальное количество связей с атомами водорода. Прекращение
Первоначально двойная спираль ДНК была помещена в кубический ящик так, чтобы с помощью алгоритма
расстояние между спиралью и краями ящика превышало 1 нм. Затем в систему были добавлены молекулы воды. Мы
радиусы кулоновского и ван-дер-ваальсового взаимодействий были приняты равными 15 Å, метод ПМЕ
использовали водную модель TIP3P. Для нейтрализации заряда было использовано рассмотрение дальнодействующих
В расчетную ячейку было добавлено 22 иона Na+ . Расчеты проводились с использованием 2023.1 пакета программ
[55]. Параметры потенциала Морзе, воспроизводящие процесс плавления пары C:Ag:C, были
в периодической ячейке с использованием стохастической динамики в качестве термостата. Уравнения движения
интегрированы с помощью алгоритма Верле-Шанти. Параметры потенциала Морзе, воспроизводящие процесс
[56] плавления пары C:Ag:C, были получены с использованием 2 фс. поле
температуры поддерживалось с помощью стохастического термостата, а константа взаимодействия
Давление поддерживалось с помощью баростата Парринелло-Рахмана с постоянной времени 2 пс.
модификации следующим образом. Первичные заряды атомов цитозина, взаимодействующих с ионами серебра
Связи с атомами водорода были ограничены с помощью алгоритма LINCS [57]. Модель Нозе-Гувера [58,59] была
для кулоновского и ван-дер-ваальсового взаимодействий принимались равными 15 Å. Был использован метод ПМЭ,
использующий для взаимодействий Ван-дер-Ваальса. Значения параметров, описывающего взаимодействия

Machine Translated by Google

потенциал ЛД для Ag+ (σ = 2,731 Å и ε = 0,16316922 кДж/моль) и парциальный заряд иона серебра (qAg = 0,38272) взяты из работы [57], которые ранее были подтверждены для опосредованного серебром спаривания оснований в двойных -цепочечная ДНК в [29,51].

Для моделирования диссоциации связи иона серебра от атома N3 цитозина был выбран потенциал Морзе. Потенциал Морса явно включает в себя эффекты разрыва связей, такие как существование несвязанных состояний:

$$V(r) = De(1 \quad e \quad \alpha(r \quad re))^2, \qquad (1)$$

где r — расстояние между атомами N3 и Ag, re — равновесное расстояние связи, De — глубина ямы, а α контролирует «ширину» потенциала. Расстояние равновесной связи re = 2,14 Å известно из квантово-механических расчетов и успешно используется в МД-моделировании как трансоидных, так и цисоидных пар C:Ag:C [29,51]. Параметры потенциала Морса α и De были получены в результате процедуры оптимизации, описанной ниже.

Процедура оптимизации параметров потенциала Морса состояла из двух этапов. Сначала мы определили значение параметра α. Идея состоит в том, чтобы сохранить геометрию пары C:Ag:C, определенную из квантово-механических расчетов [51], в частности, путем подгонки равновесного значения угла N3-Ag+ -N3* к значению, полученному методом DFT. Для проведения этой процедуры задали параметр De = 200 кДж/моль, который превышает энергию водородной связи. Столь большое значение De необходимо для предотвращения самопроизвольной диссоциации пары C:Ag:C при тепловых колебаниях. Начальное значение параметра α было выбрано таким образом, чтобы «ширина» потенциала Морса была аналогична «ширине» гармонического потенциала из [51].

Авторы исх. [51] ввели гармонический потенциал связи, а также угловой и двугранный потенциалы, чтобы сохранить угол N3-Ag+ -N3* близким к квантово-химическим значениям. Вместо этих потенциалов мы использовали потенциал Морзе и поэтому пришлось оптимизировать «ширину» потенциальной ямы.

Мы выбрали диапазон значений параметра α. Для каждого значения α было проведено МД-моделирование при температуре 300 K длительностью 10 нс и определено равновесное значение валентного угла N3-Ag+ -N3*. Оказалось, что α = 2,0 Å 1 дает наиболее близкие к квантовохимическим значениям [51].

Следующим шагом стала оптимизация параметра De . Параметр De связан с энергией диссоциации. Мы провели серию МД-симуляций нагрева системы, как описано выше. Мы уменьшали параметр De для каждого моделирования. Мы рассчитали кривые плавления при каждом значении параметра De . Оптимизированное значение De = 150 кДж/моль.
Дальнейшее уменьшение сопровождалось плавлением двойной спирали с ионом серебра при тех же температурах, что и без иона серебра. На рис . 1д показана аппроксимированная кривая потенциала Морса с оптимизированными параметрами.

Мы провели два типа МД-моделирования двойной спирали ДНК: равновесную динамику при 300 K и моделирование плавления. Оба моделирования начинались со стадии релаксации, за которой следовал производственный цикл. Этап релаксации заключался в минимизации энергии с использованием метода сопряженных градиентов и МД-моделирования в условиях постоянного объема (ансамбль NVT) и постоянного давления (ансамбль NPT) при постоянном давлении 1,0 бар и температуре 300 K в течение 10 нс. После релаксации динамика системы рассчитывалась в течение 100 нс при температуре 300 K. Моделирование плавления начиналось с конфигурации системы, взятой из равновесной динамики при 300 K. Система нагревалась каждые 20 нс с температурой шаг 10 K. МД-моделирование проводилось при температурах от 300 до 460 K.

На основе полученных МД-траекторий были рассчитаны водородные связи (H-связи). При обнаружении H-связей использовался известный геометрический критерий: H-связь между парами оснований существует, если расстояние между двумя электроотрицательными атомами меньше 3,5 Å и угол H-связи меньше 30 [58].

Machine Translated by Google

3. Результаты

3.1. Динамика и стабильность двойной спирали ДНК с несовпадением C:C или C:Ag:C

Поскольку мы предлагаем новый потенциал, мы исследовали стабильность двойной спирали додекамера в присутствии иона серебра. Поэтому после завершения процесса уравновешивания проводили МД-моделирование при постоянной температуре (300 K) и давлении (NPT) в течение 100 нс, из которых последние 50 нс использовались для анализа. Исходный потенциал был использован для описания взаимодействия иона серебра с атомами цитозина. Эти изменения не влияют ни на какие другие параметры взаимодействия и не должны влиять на структуру двойной спирали за пределами несоответствия пары C:C. Двойная спираль в присутствии иона серебра при 300 K была стабильной и имела среднее число водородных связей даже больше, чем при моделировании с несоответствием C:C в отсутствие иона серебра. Присутствие ионов серебра в системе с несоответствием C:C приводит к увеличению устойчивости двойной спирали. На рисунках 1c,d показаны типичные снимки в конце моделирования в отсутствие и присутствии иона серебр

На рис . 1e представлена гистограмма расстояния rAg-N3 между ионом серебра и азотом цитозина. Видно, что равновесное расстояние rAg-N3 = 2,18 ± 0,003 Å при МД-моделировании разбросано в непосредственной близости от равновесного расстояния между ионом серебра и азотом цитозина, что согласуется с литературными данными [51]. Мы также сравнили это равновесное расстояние с потенциальным минимумом (рис. 1e). Равновесное значение близко к потенциальному минимуму. Смещение обусловлено наличием в непосредственной близости от связи азот–серебро других высокозарядных атомов цитозина.

Увеличение стабильности пары C:C в присутствии иона серебра хорошо характеризуется расстоянием rN3-N3 между атомами азота N3 цитозинов в серебряно-опосредованной паре. На рисунке 2a показано расстояние rN3-N3 . Среднее расстояние между атомами N3 цитозинов в отсутствие ионов серебра при температуре 300 K расстояние N3-N3 составляет rN3-N3 = 3,97 ± 0,27 Å. В присутствии иона серебра расстояние N3-N3 составляет rN3-N3 = 4,31 ± 0,07 Å, что выше, чем в паре C:C, но пара C:Ag:C более стабильна, о чем свидетельствуют стандартное отклонение от среднего. При этом мы наблюдали большие деформации пары C:C и временное образование водородной связи между группой NH2 одного цитозина и атомом N3 другого цитозина. Однако такая водородная связь оказывается нестабильной.

Мы также рассчитали параметры локальных пар оснований двойной спирали ДНК в отсутствие и в присутствии иона серебра. Параметры локальных пар оснований пары C:C существенно отличаются от соседних пар из-за отсутствия иона серебра.
Наиболее заметными оказались параметры локальных пар оснований, такие как раскрытие, сдвиг и растяжение (см. рис. 3a–в).

В присутствии иона серебра профиль параметров сдвига и растяжения вдоль спирали практически плоский (см. рис. 3г,д). Это указывает на большую стабильность в опосредованной серебром паре C:C. Нетипичное значение раскрытия свидетельствует о цизоидной конформации пары C:C и отражает особенности этой неканонической пары.

Структура серебряно-опосредованной пары цитозинов в трансоидной и цисоидной конформациях может быть различной, как было показано в [51] методом DFT. В нашем случае пара C:C находится в цисоидной конформации, как и в антипараллельных спиралях. Исходная цисоидная конформация в процессе моделирования не трансформируется в трансоидную. Углы, образующиеся между ионом серебра и цитозинами в координационной связи, представлены в табл. 1. Наблюдается небольшое смещение равновесных углов, что указывает на смещение иона серебра в сторону атомов кислорода цитозина.

Machine Translated by Google

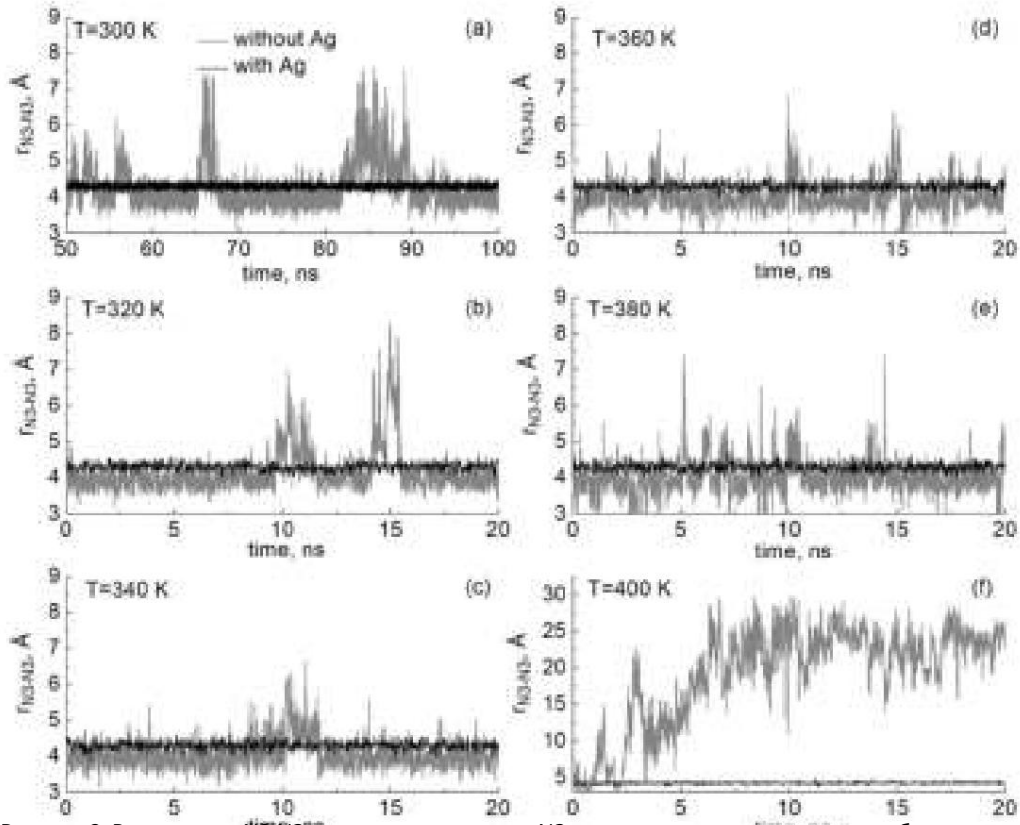


Рисунок 2. Расстояние rN3-N3 между атомами азота N3 цитозинов в отсутствие иона серебра (толстая серая линия) и в присутствии иона серебра (тонкая черная линия) отражает стабильность C:C и пары C:Ag:C: (a) Интервал 50 нс в конце анализируемого интервала времени для температуры (толстая серая линия) и в присутствии иона серебра (тонкая черная линия) отражает стабильность C:C и Интервал 50 нс в конце анализируемого интервала времени для температуры 300 K. C:Ag:C: (a) интервал температур 320 K (b), 340 K (c), 360 K (d), 380 K (e), 400 K (f).

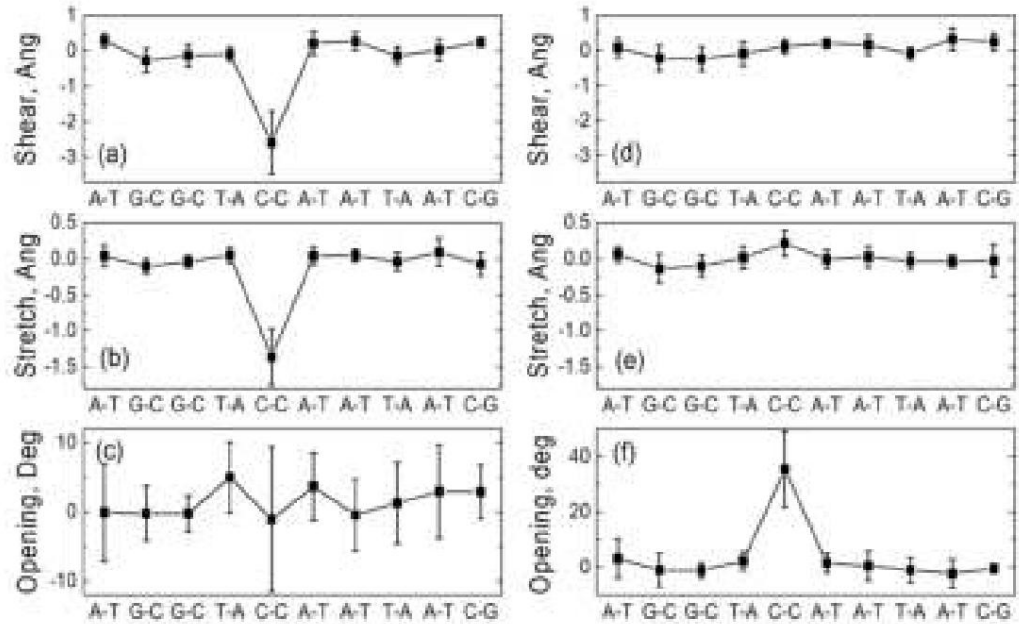


Рисунок 3. Параметры локальной пары оснований: сдвиг, растяжение и раскрытие в случае отсутствия (a–c) и присутствия (d–f) иона серебра. (г–е) иона серебра.

В присутствии иона серебра профиль параметров сдвига и растяжения вдоль спирали практически плоский (см. рис. 3г,д). Это указывает на большую стабильность в серебряно-медном

Machine Translated by Google

1. Наблюдается небольшой сдвиг равновесных углов, свидетельствующий о смещении иона серебра в сторону атомов кислорода цитозина.

Таблица 1. Углы, образуемые координационной связью между ионом серебра и атомом азота N3 о цитозином. Использовались стандартные обозначения атомов для нуклеотидных оснований.

Таблица 1. Углы , образуемые координационной связью между ионом серебра и атомом азота N3 цитозин. Использовались стандартные обозначения атомов для нуклеотидных оснований.

N3-Ag+-N3*	θ, (град)
Ag+ -N3-C2 Угол	163 ± 8
Ag+-N3-C4 N3-Ag+ -N3*	103 ± 7
Ag+ -N3-C2 3.2. Плавление	138 ± 7

	163 ± 8
	103 ± 7
нагрева ДНК	138 ± 7

двойной спирали ДНК с несовпадением C:C или C:Ag:C Ag+ -N3-C4. Мы провели МД-моделирование

в диапазоне от 300 до 400 K с помощью 3.2. Плавление двойной спирали ДНК с несоответствием C:C или C:Ag:C.

температурный шаг 10 K. С ростом температуры расстояние несоответствия C:C сильно флуктуирует, что часто

сопровождается раскрытием пары C:C. Рисунок. Мы провели МД-моделирование нагрева ДНК в диапазоне

показывает rN3-N3 для некоторых температур в диапазоне от 300 до 400 K. При температуре 0 сильно

колеблется, что часто сопровождается раскрытием пары C:C. Рисунок 2

иона серебра при температуре 400 K пара C:Ag:C стабильна. Разрушение этой паи 400 K, пара C:C уже полностью

разрушена (рис. 2f). В присутствии

совпадает с плавлением двойной спирали при 410 K. Ион серебра

при температуре 400 K пара C:Ag:C стабильна. Разрушение этой пары

Максимальное количество водородных связей в комплементарных парах оснований в th совпадает с

плавлением двойной спирали при 410 K.

водородных связей в комплементарных парах оснований в

рассматриваемая последовательность равна 25. Однако в ходе МД-моделирования максимальное количество

рассматриваемая известная последовательность равна 25. Однако в ходе МД-моделирования

меньшее количество водородных пар наблюдается в результате изнашивания пар оснований,

ДНК с парой C:C без серебра. Количество водородных связей, наблюдается двойная спираль

процесс в моделировании МД. Когда двойная спираль ДНК с парой C:C без серебра

ион нагревается, плавление начинается с концевых пар оснований двойной спирали и с нагревания иона,

Пара C:C. Без устойчивой связи между этими цитозинами двойная спираль образует пару C:C. Без устойчивой

при этом образуются три горячие точки плавления: две терминальные пары и C: пузырь, и в этом случае

связи между этими цитозинами образуется двойная спираль

образуются три горячие точки плавления: две терминальные пары и C:C.

несоответствие. Если ион серебра находится между двумя цитозинами, мы наблюдаем более стабильное двойное

несовпадение. Когда ион серебра находится между двумя цитозинами, мы наблюдаем более стабильный двойной

спиралью, и плавление происходит только с концевых пар оснований. Кривые плавления спирали , причем

плавление происходит только с концевых пар оснований. Кривые плавления ДНК

спираль ДНК в присутствии иона серебра и в его отсутствие представлена на рисунке 4. Она может

Двойная спираль ДНК в присутствии иона серебра и в его отсутствие представлена на рисунке 4. Двойная

видно, что в присутствии иона серебра кривая плавления смещается в сторону. Видно, что в присутствии

иона серебра кривая плавления смещается в сторону больших

[28] температуры, как это было показано в экспериментах [29].

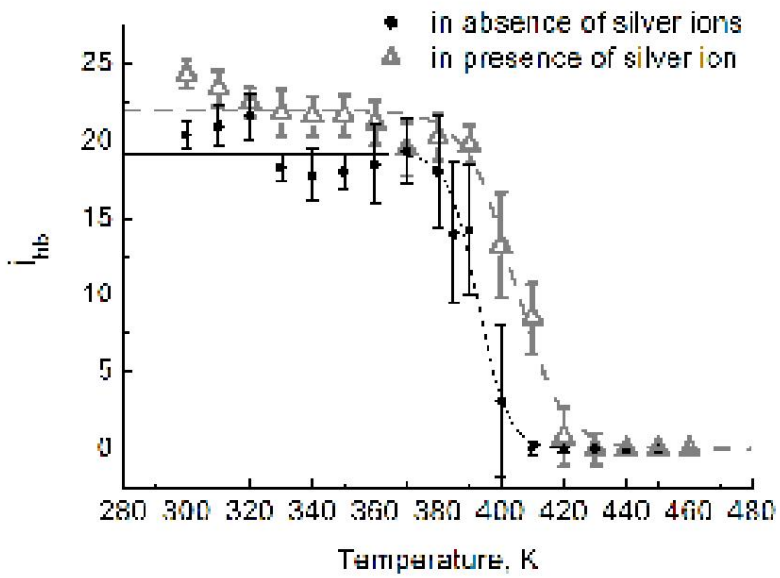


Рисунок 4. Присутствие иона серебра смещает кривую плавления в сторону более высоких температур.
температурная зависимость числа водородных связей ihb без (кружки) и с (треугольники)
присутствует ион серебра.

В табл. 2 приведены температуры плавления двойной спирали ДНК в отсутствие и
наличие ионов серебра. Как обычно для МД-моделирования, мы получаем более высокий абсолютный
значения температур плавления в обоих случаях (за счет перегрева, см. Обсуждение);
однако нас интересует относительный эффект — сдвиг температуры плавления из-за

Machine Translated by Google

наличие ионов серебра. Этот сдвиг в нашем случае составляет 12 K, что близко к экспериментальному значению 7,5 K. При плавлении ДНК металл-опосредованная пара распадается, и ион серебра высвобождается в раствор. Металлопосредованная пара C:Ag:C термически более стабильна, чем водородные связи комплементарных оснований, но в этом случае она имеет одну серебряноопосредованную пару оснований, которая также подвержена термическому разрушению, как это наблюдалось в эксперименте [28].

Таблица 2. Температуры плавления двойной спирали в отсутствие и в присутствии иона серебра в сравнении с экспериментальными данными. В нижнем ряду показано смещение температуры плавления из- за присутствия ионов серебра.

Ион серебра	ТМ Эксперимент [1], K	Тм МД, K
отсутствие	299,5	392
присутствие	307	404
температурный сдвиг Tm	7,5	12

[1] Экспериментальные результаты взяты из [28] для той же последовательности, что и исследованная в данной работе.

4. Обсуждение

Мы использовали эту последовательность как надежный объект для потенциальной проверки, поскольку ее экспериментально установленная температура плавления хорошо известна как в отсутствие, так и в присутствии ионов серебра [28]. Мы выбрали стандартную антипараллельную двойную спираль, поскольку для таких объектов подход МД хорошо обоснован.

Введя потенциалы связей для описания координационной связи между ионом серебра и цитозином, мы смогли напрямую смоделировать динамику разрыва координированных связей, что ранее было невозможно при рассмотрении этих связей как ковалентных. Основная особенность нашего потенциала по сравнению с ранними работами состоит в том, что структура пары C:Ag:C не фиксируется вблизи положения равновесия, а может существенно колебаться вблизи него вплоть до разрушения пары при повышении температуры. Наши расчеты показывают, что структура пары соответствует ранней работе [51].

Расхождения в абсолютных значениях температур плавления между экспериментами [28] и МД-моделированием являются общими и объясняются методологией, используемой для моделирования наноразмерных образцов [59]. В МД-моделировании точка плавления определяется «медленным» нагревом; таким образом, скорость изменения температуры по сравнению с реальным экспериментом очень высока и может превышать экспериментальное значение на несколько порядков. Поскольку переход происходит не мгновенно, а требует небольшого (в экспериментальных масштабах) времени, то сдвиг наблюдается. Этот эффект можно исправить, используя моделирование Монте-Карло вместо молекулярной динамики, но это требует более дорогостоящих вычислений. Кроме того, на разницу температур плавления влияют размеры моделирующей ячейки и используемые термостаты. В молекулярной динамике мы имеем дело с маленькой клеткой размером в нанометры. При этом изменение температуры происходит мгновенно во всем объеме. В эксперименте измеряемая ячейка является макроскопической, и изменения температуры внутри нее на молекулярном уровне происходят неравномерно. Таким образом, мы считаем, что несоответствие температур плавления в реальном эксперименте нашим результатам не является недостатком. Получено качественное согласие сдвига температуры плавления в присутствии иона серебра по сравнению со случаем, когда ион серебра отсутствует. При этом мы наблюдаем удовлетворительный сдвиг температуры плавления, сравним

5. Выводы

Мы предложили и подтвердили потенциал Морзе для связи пары оснований, опосредованной серебром, который может описать разрушение координационной связи между цитозином и ионом серебра. Верифицированные параметры потенциала позволили воспроизвести процесс плавления двойной спирали ДНК с серебряно-опосредованной парой и разрушения координационной связи между ионом серебра и цитозиновым основанием при повышении температуры. Результаты моделирования хорошо согласуются с экспериментальными данными по сдвигу температуры плавления двойной спирали ДНК с несоответствием C:C в отсутствие и в присутствии иона серебра . Поскольку двойная спираль B-формы является основным строительным блоком не только генетического кода

Machine Translated by Google

В живых организмах, но и в нанотехнологиях ДНК двойные спирали, опосредованные металлами, могут использоваться для самосборки динамических наномашин ДНК. Наши результаты открывают новые возможности для разработки новых материалов 3D ДНК, опосредованных металлами, с повышенной устойчивостью к термической, химической и, возможно, ферментативной деградации благодаря дополнительной стабильности, обеспечиваемой парами оснований, опосредованными серебром.

Вклад авторов: Концептуализация, НАК; методология, НАК; валидация, EBG и NAK; расследование, НАК; письменное – подготовка первоначального проекта, НАК; написание-обзор и редактирование, НАК; визуализация, ЭБГ; надзор, НАК. Все авторы прочитали и согласились с опубликованной версией рукописи.

Финансирование: Исследование выполнено при поддержке Программы фундаментальных исследований Российской академии наук (проект № ФФЗЭ-2022-0009).

Заявление о доступности данных: данные содержатся в статье.

Благодарности: Расчеты проводились в Объединенном суперкомпьютерном центре Российской академии наук.

Конфликты интересов: Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Ссылки

1. Ян, Х.; Метера, КЛ; Слейман, НФ ДНК, модифицированная металлокомплексами: применение в создании наноструктур металл-ДНК более высокого порядка . Коорд. хим. Ред. 2010, 254, 2403–2415. [Перекрестная ссылка]
2. Парк, Канзас; Парк, Х.Г. Технологические применения, возникающие в результате взаимодействия оснований ДНК с ионами металлов. Курс. Мнение. Биотехнология. 2014, 28, 17–24. [Перекрестная ссылка] [ПабМед]
3. Шарф, П.; Мюллер, Дж. Нуклеиновые кислоты с парами оснований, опосредованными металлами, и их применение. ChemPlusChem 2013, 78, 20–34. [Перекрестная ссылка]
4. Свази, С.М.; Гвинн, Э.Г. Пары оснований, опосредованные серебром: на пути к динамическим наноструктурам ДНК с улучшенными химическими и Термическая стабильность. Нью Дж. Физ. 2016, 18, 045008. [CrossRef]
5. Альбаркуни, Ю.; Али, Джорджия; Хайрул, Армия; Чонг, К.Ф. На пути металлизации ДНК: принцип, методы и новейшие достижения Приложения. хим. Адв. Матер. 2020, 5, 1–14.
6. Чаттерджи, С.; Лу, XY; Лян, Ф.; Ян, Ю.В. Поверхностно-функционализированные наночастицы золота и серебра для колориметрического и флуоресцентного зондирования ионов металлов и биомолекул. Коорд. хим. Ред. 2022, 459, 214461. [CrossRef]
7. Ибрагим, Н.; Джамалуддин, Северная Дакота; Тан, LL; Мохд Юсоф, Нью-Йорк Обзор разработки биосенсора на основе наночастиц золота и серебра как стратегии обнаружения новых и патогенных РНК-вирусов. Датчики 2021, 21, 5114. [CrossRef]
8. Фунаи, Т.; Адачи, Н.; Аотани, М.; Вада, СИ; Урата, Х. Влияние ионов металлов на термическую стабильность дуплексов ДНК, содержащих гомо- и гетерохиральные несовпадающие пары оснований: сравнение внутренних и концевых замен. Нуклеозиды Нуклеотиды Нуклеиновые кислоты 2020, 39, 310–321. [Перекрестная ссылка] [ПабМед]
9. Оно, А.; Цао, С.; Тогаши, Х.; Таширо, М.; Фудзимото, Т.; Мачинами, Т.; Ода, С.; Мияке, Ю.; Окамото, И.; Танака, Ю. Специфические взаимодействия между ионами серебра (i) и парами цитозин-цитозин в дуплексах ДНК. хим. Коммун. 2008, 39, 4825–4827. [Перекрестная ссылка]
10. Чай, Ю.; Го, Х.; Леонард, П.; Сила, Ф. Гетерохиральная ДНК с комплементарными нитями с конфигурациями α-d и β-d: пары оснований с водородными связями и серебром с влиянием 7-деазапуринов, заменяющих пурины. хим. Евро. Дж. 2020, 26, 13973–13989. [Перекрестная ссылка]
11. Джаш, Б.; Мюллер, Дж. Пары оснований, опосредованные металлами: от характеристики к применению. Хим.–Евр. Дж. 2017, 23, 17166–17178. [Перекрестная ссылка] [ПабМед]
12. Сан, К.; Се, Х.; Сонг, Ю.; Сан, Л. Обзор пар оснований ДНК, опосредованных серебром: Методология и применение. Биоматер. Рез. 2022, 26, 9. [CrossRef] [ПабМед]
13. Раджу, СК; Карунакаран, А.; Кумар, С.; Секар, П.; Муругесан, М.; Картикеян, М. Комплексы серебра как противораковые средства: А. перспективный обзор. Гер. Дж. Фарм. Биоматер. 2022, 1, 6–28. [Перекрестная ссылка]
14. Синха, И.; Фонсека Герра, К.; Мюллер, Дж. Высокостабилизирующая пара оснований, опосредованная серебром (I), в параллельно-цепочечной ДНК. Энджью. хим. Межд. Эд. 2015, 54, 3603–3606. [Перекрестная ссылка] [ПабМед]
15. Йоханнсен, С.; Меггер, Н.; Бёме, Д.; Сигел, RKO; Мюллер, Дж. Структура решения двойной спирали ДНК с последовательными Металлопосредованные пары оснований. Нат. хим. 2010, 2, 229–234. [Перекрестная ссылка]
16. Мандал, С.; Хепп, А.; Мюллер, Дж. Беспрецедентная двуядерная пара оснований, опосредованная серебром (i), с участием повреждения ДНК 1, N6-Этенаденин. Далтон Транс. 2015, 44, 3540–3543. [Перекрестная ссылка] [ПабМед]
17. Полоний, Ф.-А.; Мюллер, Дж. Искусственная пара оснований, опосредованная водородной связью и связыванием ионов металла. Энджью. хим. Межд. Эд. 2007, 46, 5602–5604. [Перекрестная ссылка]

Machine Translated by Google

18. Сваси, С.М.; Леал, Ле; Лопес-Асеведо, О.; Павлович Дж.; Гвинн, EG Серебро(I) как клей ДНК: Ag+ -опосредованное спаривание гуанина Выявляется путем удаления ограничений Уотсона-Крика. наук. Отчет 2015, 5, 10163. [CrossRef] [ПабМед]
19. Бердакин, М.; Такконе, Мичиган; Пино, Джорджия; Санчес, К.Г. Серебряные излучатели, защищенные ДНК: зарядозависимое переключение флюоресценция. Физ. хим. хим. Физ. 2017, 19, 5721–5726. [Перекрестная ссылка]
20. Меггер, Д.А.; Мюллер, Дж. Самоспаривание цитозина, опосредованное серебром (I), предпочтительнее пар оснований типа Хугстина с искусственными Нуклеиновое основание 1,3-дидеаза-6-нитропурин. Нуклеозиды Нуклеотиды Нуклеиновые кислоты 2010, 29, 27–38. [Перекрестная ссылка]
21. Рамазанов Р.Р.; Сыч, Т.С.; Ревегук, З.В.; Максимов Д.А.; Вдовичев А.А.; Кононов, А.И. Эмиттер Ag-ДНК: металлический наностержень или супрамолекулярный комплекс? Дж. Физ. хим.-Летт. 2016, 7, 3560–3566. [Перекрестная ссылка] [ПабМед]
22. Танака, Ю.; Кондо, Дж.; Сихровский, В.; Себера, Дж.; Дайраку, Т.; Санеёси, Х.; Урата, Х.; Ториго, Х.; Оно, А. Структура, физико-химические свойства и применение T-Hg II-T, C-Ag I-C и других пар металлов-оснований. хим. Коммун. 2015, 51, 17343–17360. [Перекрестная ссылка] [ПабМед]
23. Мистри, Л.; Эль-Зубир, О.; Дура, Г.; Клегг, В.; Уодделл, П.Г.; Поуп, Т.; Хофер, Вашингтон; Райт, штат Нью-Йорк; Хоррокс, БР; Хоултон, А. Изучение свойств «Металло-ДНК» с помощью супрамолекулярного дуплекса, опосредованного Ag (i). хим. наук. 2019, 10, 3186–3195. [Перекрестная ссылка] [ПабМед]
24. Марзилли, Л.Г.; Кистенмахер, Ти Джей; Росси, М. Расширение роли O (2) остатков цитозина в связывании ионов металлов. Синтез и строение необычного полимерного комплекса серебра (I) с 1-метилцитозином. Дж. Ам. хим. Соц. 1977, 99, 2797–2798. [Перекрестная ссылка] [ПабМед]
25. Накагава, О.; Аояма, Х.; Фуджи, А.; Кисимото, Ю.; Обика, С. Кристаллографическая структура новых типов пар оснований, опосредованных AgI, в неканоническом дуплексе ДНК, содержащем 2'-O, 4'-C-метиленовые мостики. Нуклеиновые кислоты. хим. Евро. Дж. 2021, 27, 3842–3848. [Перекрестная ссылка] [ПабМед]
26. Хоссейн, Миннесота; Ахмад, С.; Краатц, Х.-Б. Последовательное включение ионов серебра (I) в олигонуклеотиды, содержащие цитозин-Цитозиновые нарушения. ChemPlusChem 2021, 86, 224–231. [Перекрестная ссылка]
27. Бхаи, С.; Гангули, Б. Роль pH в стабильности несоответствия цитозин-цитозин и канонических пар оснований AT и GC, опосредованных ион серебра: исследование DFT. Структура. хим. 2022, 33, 35–47. [Перекрестная ссылка]
28. Чжан А.; Будов-Буссе, С.; Леонард, П.; Сила, Ф. Аномерные и энантиомерные 2'-дезоксицитидины: стабильность пар оснований в отсутствие и присутствии ионов серебра. Хим.–Евр. Дж. 2021, 27, 10574–10577. [Перекрестная ссылка] [ПабМед]
29. Шёнрат И.; Цветков В.Б.; Зацепин Т.С.; Аралов А.В.; Мюллер, Дж. Спаривание оснований, опосредованное серебром (I), в параллельно-цепочечной ДНК с участием люминесцентного аналога цитозина 1, 3-диаза-2-оксофеноксазина. Ж. Биол. Неорг. хим. 2019, 24, 693–702. [Перекрестная ссылка]
30. Манги, М.; Дестейнвилл, Н. Физика динамики спаривания оснований в ДНК. Физ. Отчет 2016, 631, 1–41. [Перекрестная ссылка]
31. Сингх, А.; Майти, А.; Сингх, Н. Структура и динамика дцДНК в клеточноподобной среде. Энтропия 2022, 24, 1587. [CrossRef] [ПабМед]
32. Пейрар, М.; Бишоп, А.Р. Статистическая механика нелинейной модели денатурации ДНК. Физ. Преподобный Летт. 1989, 62, 2755–2758. [Перекрестная ссылка] [ПабМед]
33. Сингх, А.; Сингх, Н. Влияние концентрации соли на стабильность гетерогенной ДНК. Физ. А , 2015, 419, 328–334. [Перекрестная ссылка]
34. Ноттс, Т.А.; Ратор, Н.; Шварц, округ Колумбия; Де Пабло, Дж. Дж. Крупнозернистая модель ДНК. Дж. Хим. Физ. 2007, 126, 084901. [CrossRef] [ПабМед]
35. Родригес Леал, М.; Вебер, Г. Шарп Денатурация ДНК в геликоидальной мезоскопической модели. хим. Физ. Летт. 2020, 755, 137781. [Перекрестная ссылка]
36. Золи М. Флуктуации пар оснований в спиральных моделях нуклеиновых кислот. Дж. Хим. Физ. 2021, 154, 194102. [CrossRef] [ПабМед]
37. Валле-Ореро, Ж.; Уайлдс, Арканзас; Теодоракопулос, Н.; Куэста-Лопес, С.; Гарден, JL; Данилкин С.; Пейрар, М. Термическая денатурация А-ДНК. Нью Дж. Физ. 2014, 16, 113017. [CrossRef]
38. Сингх, А.; Сингх, Н. Вытягивание коротких молекул ДНК, имеющих дефекты в разных местах. Физ. Ред. E 2015, 92, 032703. [CrossRef] [ПабМед]
39. Оливейра, Л.М.; Лонг, А.С.; Браун, Т.; Фокс, КР; Вебер, Г. Измерение температуры плавления и мезоскопическая оценка одиночные, двойные и тройные несовпадения ДНК. хим. наук. 2020, 11, 8273–8287. [Перекрестная ссылка]
40. Сильва, Л.Г.; Вебер, Г. Мезоскопическая модель подтверждает сильную связь, опосредованную парой основных металлов, для T–Hg2+–T и более слабую для C–Ag+–C. хим. Физ. Летт. 2022, 803, 139847. [CrossRef]
41. Фриман, Г.С.; Хинкли, DM; де Пабло, Дж. Дж. Грубозернистая модель ДНК с тремя сайтами на нуклеотид с явными ионами. Дж. Хим. Физ. 2011, 135, 165104. [CrossRef]
42. Флореску, А.; Жойе, М. Термические и механические свойства денатурации модели ДНК с тремя сайтами на нуклеотид. Дж. хим. Физ. 2011, 135, 085105. [CrossRef] [ПабМед]
43. Саяр, М.; Авшароглу, Б.; Кабакчо глу, А. Скручивающее разделение в крупнозернистой модели миникольца ДНК. Физ. Ред. E 2010, 81, 041916. [CrossRef] [ПабМед]
44. Самбриски, Э.Дж.; Ортис, В.; де Пабло, Дж. Дж. Эффекты последовательности при плавлении и ренатурации коротких ДНК-олигонуклеотидов: структура и механизмы. Дж. Физ. Конденсируется. Материя 2009, 21, 034105. [CrossRef]
45. Чжан Ф.; Коллинз, М.А. Модельное моделирование динамики ДНК. Физ. Ред. E 1995, 52, 4217–4224. [Перекрестная ссылка]
46. Друккер, К.; Ву, Г.; Шац, Г.К. Модельное моделирование динамики денатурации ДНК. Дж. Хим. Физ. 2001, 114, 579–590. [Перекрестная ссылка]
47. Оулдридж, Т.Э.; Луи, А.А.; Дой, Дж.П.К. Структурные, механические и термодинамические свойства крупнозернистой модели ДНК. Дж. Хим. Физ. 2011, 134, 085101. [CrossRef]

Machine Translated by Google

48. Вонг, Кентукки; Петтитт, Б.М. Путь плавления олигомерной ДНК, исследованный с помощью молекулярно-динамического моделирования. Биофиз. Дж. 2008, 95, 5618–5626. [Перекрестная ссылка] [ПабМед]

49. Ломзов А.А.; Воробьёв Ю.Н.; Пышный Д.В. Оценка изменения свободной энергии Гиббса и температуры плавления дуплексов ДНК/ДНК с использованием энтальпии гибридизации, рассчитанной методом молекулярно-динамического моделирования. Дж. Физ. хим. Б 2015, 119, 15221–15234. [Перекрестная ссылка]

50. Кунду, С.; Мукерджи, С.; Бхаттачария, Д. Плавление двойной спирали полимерной ДНК при повышенной температуре: подход молекулярной динамики. Дж. Мол. Модель. 2017, 23, 1–10. [Перекрестная ссылка]

51. Чен, Х.; Карпенко А.; Лопес-Асеведо, О. Двойная спираль, опосредованная серебром: структурные параметры надежного строительного блока ДНК. АСУ Омега 2017, 2, 7343–7348. [Перекрестная ссылка] [ПабМед]

52. Мистри, Л.; Уодделл, П.Г.; Райт, штат Нью-Йорк; Хоррокс, БР; Хоултон, А. Трансоидные и цисоидные конформации в парах оснований цитозина, опосредованных серебром: Водородная связь диктует аргентофильные взаимодействия в твердом состоянии. Неорг. хим. 2019, 58, 13346–13352. [Перекрестная ссыл [ПабМед]

53. Эспиноза Лил, Луизиана; Карпенко А.; Свази, С.; Гвинн, Е.Г.; Рохас-Сервеллера, В.; Ровира, К.; Лопес-Асеведо, О. Роль водородных связей в стабилизации опосредованных серебром тетрамеров цитозина. Дж. Физ. хим. Летт. 2015, 6, 4061–4066. [Перекрестная ссылка] [ПабМед]

54. Ханвелл, доктор медицины; Кертис, Делавэр; Лони, округ Колумбия; Вандермеерш, Т.; Журек, Э.; Хатчисон, Г. Р. Авогадро: продвинутая семантика химический редактор, платформа визуализации и анализа. Дж. Кеминформ. 2012, 4, 4–17. [Перекрестная ссылка] [ПабМед]

55. Ван дер Спул, Д.; Линдал, Э.; Хесс, Б.; Гроенхоф, Г.; Марк, А.Е.; Берендсен, Х.Дж. GROMACS: Быстро, гибко и бесплатно. Дж. Компьютер. хим. 2005, 26, 1701–1718. [Перекрестная ссылка] [ПабМед]

56. Ивани И.; Дэнс, доктор медицинских наук; Ной, А.; Перес, А.; Фаустино, И.; Больница, А.; Вальтер, Дж.; Андрио, П.; Гони, Р.; Балачану, А.; и др. Пармбск1: А уточненное силовое поле для моделирования ДНК. Нат. Методы 2015, 13, 55. [CrossRef]

57. Ли, П.; Песня, НФ; Мерц, К.М. Систематическая параметризация одновалентных ионов с использованием несвязанной модели. Дж. Хим. Теория Вычислить. 2015, 11, 1645–1657. [Перекрестная ссылка]

58. Фильо, Эд; Руджеро, Дж. Р. Моделирование Н-связей в ДНК с использованием изоспектрального потенциала гармонического осциллятора. Физ. Преподобный Е Стат. Физ. Плазменные жидкости. Относитель. Междисциплин. Вершина. 1997, 56, 4486–4488. [Перекрестная ссылка]

59. Цзоу, Ю.; Сян, С.; Дай, К. Исследование эффективности и точности методов расчета температуры плавления путем молекулярно-динамического моделирования. Вычислить. Матер. наук. 2020, 171, 109156. [CrossRef]

Отказ от ответственности/Примечание издателя: Заявления, мнения и данные, содержащиеся во всех публикациях, принадлежат исключительно отдельному автору(ам) и соавторам(ам), а не MDPI и/или редактору(ам). MDPI и/или редактор(ы) не несут ответственности за любой вред людям или имуществу, возникший в результате любых идей, методов, инструкций или продуктов, упомянутых в контенте.

Machine Translated by Google

вычисление

MDPI

Статья

Естественный конвекционный поток жидкости и теплообмен в Полость в форме долины

Сидхартха Бхоумик [1], Лакшми Рани Рой [1], Фэн Сюй [2] и Суваш С. Саха 3,*

[1] факультет математики, Университет Джаганнатха, Дакка 1100, Бангладеш; dr.sidhartha@math.jnu.ac.bd (SB); lrroy.jnu@gmail.com (LRR)

[2] Школа гражданского строительства, Пекинский университет Цзяотун, Пекин 100044, Китай; fxu@bjtu.edu.cn

3 Школа машиностроения и мехатроники, Сиднейский технологический университет, Сидней, Новый Южный Уэльс, 2007 г., Австралия * Адрес для переписки: suvash.saha@uts.edu.au

Аннотация: Явление естественной конвекции является предметом значительного исследовательского интереса в связи с его широким распространением как в природных, так и в промышленных условиях. Это исследование сосредоточено на изучении явлений естественной конвекции внутри треугольных помещений, уделяя особое внимание долинообразной конфигурации. Наше исследование всесторонне анализирует нестационарную, безразмерную, изменяющуюся во времени конвекцию, возникающую в результате естественного потока жидкости внутри полости в форме долины, где наклонные стенки служат горячими поверхностями, а верхняя стенка функционирует как холодная поверхность. Исследуем нестационарные течения естественной конвекции в этой полости с использованием воздуха в качестве рабочего тела, рассматривая диапазон чисел Рэлея от Ra = 100 до 108 . Кроме того, исследуются различные безразмерные времена τ в диапазоне от 0 до 5000 с фиксированным числом Прандтля (Pr = 0,71) и соотношением сторон (A = 0,5). Используя двумерную структуру численного анализа, наше исследование направлено на выявление механизмов нестабильного потока, характеризующихся различными безразмерными временами, включая симметричные, асимметричные и нестационарные модели потока. Численные результаты показывают, что естественные конвекционные потоки остаются устойчивыми в симметричном состоянии для значений Рэлея в диапазоне от 100 до 7 × 103 . Асимметричный поток возникает, когда Ra превышает 7 × 103 . В условиях асимметричности течение приходит в нестационарную стадию, а затем стабилизируется на полностью сформировавшейся стадии при 7 · 103 < Ra < 107 . Данное исследование показывает, что периодические нестационарные течения на переходном этапе переходят в хаотические ситуации, а затем переходят к периодическому поведению на развитом этапе, но хаотическое течение остается преобладающим в нестационарном режиме с большими числами Рэлея. Кроме того, мы представляем анализ теплопередачи внутри полости, обсуждая и количественно оце

Ключевые слова: нестационарное течение; естественная конвекция; полость в форме долины; бифуркации; теплопередача

check for updates

Цитирование: Бхоумик, С.; Рой, ЛР; Сюй, Ф.; Саха, SC Естественная конвекция Поток жидкости и теплопередача в Полость в форме долины. Вычисление 2024, 12, 146. https://doi.org/10.3390/computation12070146 .

Академические редакторы: Али Джемаль Беним, Абдулмаджид А. Мохамад, Санг-Хо Сух, Рашид Беннасер, Павел Оклон и Ян Талер

Поступила: 4 июня 2024 г.
Пересмотрено: 11 июля 2024 г.
Принято: 12 июля 2024 г.
Опубликовано: 14 июля 2024 г.

Копирайт: © 2024 авторов. Лицензиат MDPI, Базель, Швейцария. Эта статья находится в открытом доступе. распространяется на условиях и условия Creative Commons Лицензия с указанием авторства (CC BY) (https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

1. Введение

Исследование естественной конвекции в замкнутых пространствах привлекло значительное внимание ученых из-за ее широкого применения в различных дисциплинах [1,2]. Исследователи использовали различные типы корпусов с различными граничными условиями в качестве экспериментальных установок для изучения естественной конвекции, стремясь углубить наше понимание механизмов теплопередачи и динамики жидкости. Этот интерес проистекает из множества приложений, в которых явления естественной конвекции являются неотъемлемой частью, охватывающих такие области, как геофизика, изоляция зданий, управление геотермальными резервуарами и процессы промышленного разделения. Однако сложность поверхности Земли, характеризующаяся неправильной геометрией, на которую сильно влияют наклонные рельефы, создает проблемы для традиционных геометрических конфигураций. Несмотря на преобладание неправильных форм как в природных, так и в промышленных условиях, естественная конвекция остается предметом постоянных исследований из-за ее важности для понимания поведения потока жидкости. Хотя многие исследования были сосредоточены на естественной конвекции внутри обычных квадратных или прямоугольных корпусов из-за их простоты [3,4], исследование естественной конвекции внутри полостей треугольной формы имеет особое

Machine Translated by Google

важность, поскольку она вносит значительный вклад в наше понимание таких явлений, как конвекция Рэлея – Бенара [5,6]. Недавно Cui et al. В [7] основное внимание было уделено исследованию смешанной конвекции и теплообмена в дугообразной полости с внутренними источниками тепла в условиях подогрева днища и охлаждения верхней стенки. Чухан и др. В работе [8] исследовано тепловое поведение степенной жидкости в плюсовидной полости в результате естественной конвекции с учетом числа Дарси и магнитогидродинамики. Саранги и др. [9] исследовали потери тепла, вызванные излучением и постоянной ламинарной естественной конвекцией в полости солнечной плиты с прямоугольной или трапециевидной полостью.

Расширение нашего понимания потоков естественной конвекции имеет первостепенное значение для улучшения прогнозов теплопередачи и облегчения механизмов управления потоками. Исследователи, заинтригованные этим явлением, могут исследовать подробные объяснения потоков естественной конвекции, вызванных плавучестью [10]. Естественную конвекцию вблизи тепловой границы часто идеализируют как поток, примыкающий к термически хорошо проводимой бесконечной или полубесконечной плоской пластине, что приводит к образованию конвекции Рэлея – Бенара. Исследования Манневиля и Боденшаца и др. [11,12] дают всестороннее представление о результатах неустойчивости Рэлея-Бенара , тогда как Воробей и Гусар [13] сосредоточены на изучении конвекции Рэлея-Бенара на наклонных плоских пластинах. Исследование полостей с вертикальными и горизонтальными градиентами температуры выявляет два различных сценария естественного или свободного конвекционного течения. В то время как естественная конвекция преимущественно изучается в прямоугольных или квадратных полостях из-за их простоты, исследование Бэтчелора [14] предлагает значительное понимание естественных конвекционных потоков в полостях с дифференциальным нагревом, особенно подчеркивая влияние проводимости на теплообмен, особенно при низких числах Рэлея. Когда число Рэлея превышает пороговое значение, конвекция контролирует динамику потока. Ранние исследования в первую очередь исследовали стабильные естественные конвекционные потоки [15–17]. Интригующий феномен бароклинности, порожденный тепловой вертикальной стенкой, вызывает спонтанные конвекционные потоки внутри внутренней полости посредством вязкого сдвига в симметричных условиях [18]. При меньших числах Рэлея тепловой пограничный слой, ближайший к стенке, остается устойчивым, тогда как конвективная неустойчивость индуцирует дискретные бегущие волны по мере увеличения чисел Рэлея [18]. Недавние исследования углубились в динамику и переходный характер переходных потоков естественной конвекции, основываясь на более ранних исследованиях [19,20]. Эти результаты способствуют нашему пониманию сложного взаимодействия между температурными градиентами и динамикой жидкости в замкнутых пространствах, проливая свет на переходные процессы, присущие явлениям естественной конвекции. Недавние исследования указывают на возникновение спонтанных конвекционных потоков, вызванных бароклинностью, и турбулентной конвекции Рэлея–Бенара [21]. Рахаман и др. [22,23] исследуют переходные потоки естественной конвекции в трапециевидной камере, нагреваемой снизу , что подтверждается численными исследованиями, что еще больше обогащает наше понимание этого сложного явле

Естественные конвекционные течения внутри полостей с наклонными стенками привлекли значительное внимание из-за их распространенности и простоты наблюдения [24]. В частности, исследования естественных конвекционных потоков внутри треугольных полостей выявили их значительное усиление конвекции Рэлея – Бенара, как документировано в предыдущих исследованиях [5,6]. Обширные исследования посвящены изучению характеристик и механизмов теплопередачи естественных конвекционных потоков внутри аттических полостей, характеризующихся градиентами температуры между поверхностью дна и наклонными границами [25–31]. Примечательно, что исследования Асана и Намли [25,26] и Салмана [27] изучили нестабильность и бифуркации растворов естественного конвекционного потока в треугольных полостях, выявив эмпирические данные, демонстрирующие глубокое влияние соотношения сторон и числа Рэлея как на температуру, так и на температуру . и поля потока. Результаты анализа показывают, что с увеличением чисел Рэлея соотношения сторон уменьшаются, что приводит к возникновен Пуликакос и Беян [29] исследовали теплопередачу и естественные конвекционные потоки внутри чердачных помещений в ночных или зимних условиях, устанавливая масштабные соотношения и участвуя в дискуссиях относительно динамики естественного конвекционного потока [30]. Флэк [31] объяснил динамику теплопереноса, используя соотношение числа Нуссельта и числа Рэлея , а Хольцман и др. [32] наблюдали переход от симметричного к асимметричному

Machine Translated by Google

картины течения с увеличением числа Грасгофа, идентифицирующие бифуркацию Вил на основе экспериментальных данных. Кроме того, Лей и др. [33] предоставили доказательства существования переходных естественных конвекционных потоков внутри чердачных полостей, что еще больше обогатило наше понимание этого сложного явления.

Эволюция потока при внезапном нагреве и охлаждении проходит три четко выраженные стадии: раннюю, переходную и стационарную или квазистационарную [33]. Было замечено, что более низкие числа Рэлея приводят к нагреву всей зоны течения, а не к расщеплению теплового пограничного слоя, при этом разделение слоев происходит по мере увеличения чисел Рэлея. В частности, в сценариях быстрого охлаждения толщина теплового пограничного слоя превышает расстояние по вертикали от центра наклонной поверхности до горизонтального дна, особенно при более низких числах Рэлея. Тепловой пограничный слой стабилизируется перед охлаждением полости по мере увеличения чисел Рэлея, при этом жидкость проходит наклонную поверхность и контактирует с нижним кончиком перед входом внутрь. Передача тепла на чердаке изучалась под действием тепловых раздражителей Saha et al. [34–38]. Кроме того, исследователи исследовали поведение и динамику теплопередачи естественных конвекционных потоков в клиновидных полостях, служащих моделями различных мелководных водоемов с наклонной поверхностью дна, таких как рукава водоемов и морские берега. Как описано Лей и Паттерсоном [39–41], конвективное течение внутри клиньев проходит три стадии: из изотермического и стационарного состояний. Мао и др. В работах [42–44] утверждается, что горизонтальное расположение клина определяет основной режим теплопередачи и состояние течения при различных числах Рэлея, при этом в мелководной литорали наблюдаются разные режимы течения. Беднарц и др. В работе [45] исследовались естественные конвекционные течения внутри резервуарообразных полостей, наблюдая за формированием двух нагревающихся пограничных слоев: притока у дна и неустойчивого оттока под водой для разных значений Грасгофа. Понимание естественных конвекционных потоков в V-образных полостях имеет решающее значение, учитывая их распространенность как в природных, так и в промышленных системах [46–57]. Кенджерес [58] количественно оценил теплопередачу и турбулентные потоки естественной конвекции в V-образных полостях, отметив, что восходящий поток увеличивается с увеличением числа Рэлея. Кимура и др. В [59] для расчета динамики теплопередачи исп

Характер течения и количество теплопередачи были тщательно измерены в предыдущих исследованиях [30,31]. Несмотря на проведенные детальные исследования, естественные конвекционные потоки внутри чердака или клиновидной треугольной полости могут неточно отражать динамику потока в V-образной полости с течением времени. Учитывая их естественное возникновение, естественные конвекционные потоки внутри V-образных треугольных пространств с противоположными граничными условиями были сочтены заслуживающими тщательного исследования. Бхоумик и др. В работах [60–62] исследован переход от симметричного стационарного течения к асимметричному нестационарному течению в V-образной треугольной камере, где нагрев происходил снизу, а охлаждение сверху. Было замечено, что разные жидкости демонстрируют различное поведение при движении. Несмотря на наблюдаемый переход от регулярного течения к хаотическому в подогреваемой снизу каверне в форме долины, механизмы нестационарного течения в таких кавернах остаются неясными. Насколько известно авторам, ни в одном исследовании не изучались нестационарные структуры потока, присутствующие в разное время в полости в форме долины. Более того, существует необходимость дальнейшего количественного анализа динамики теплообмена в таких конфигурациях.

В этом обзоре литературы подчеркивается важность исследования нестационарной естественной конвекции в V-образных полостях для воздуха, что дает ценную информацию о характере потока, переходных процессах и явлениях теплопередачи в таких системах. Однако всестороннее понимание сложной физики, управляющей механизмами нестационарного течения внутри V-образных полостей, остается обязательным. Анализ существующей литературы показывает недостаток исследований, посвященных характеристике нестационарных структур течения в различные безразмерные моменты времени внутри V-образных полостей. Чтобы устранить этот пробел, настоящее исследование направлено на изучение нестационарного потока в полости в форме долины посредством двумерного численного моделирования, рассматривая воздух с числами Рэлея от 100 до 108 , числом Прандтля 0,71 и соотношением сторон 0,5. В работе рассмотрено влияние различных значений Ra и τ на структуру течения, теплообмен и характеристики неустановившегося течения в полностью сформировавшейся стадии долинной каверны. Это исследование вносит вклад в существующие знания

Machine Translated by Google

путем улучшения нашего понимания того, как характеристики жидкости влияют на поведение потока и переходные процессы. Эволюция механизмов течения и изменения внутри полости выяснены с использованием разницы температуры и скорости во времени. Подобные идеи имеют решающее значение для повышения энергоэффективности инженерных приложений и оптимизации конструкции тепловых систем, таких как теплообменники и системы охлаждения. Следовательно, это исследование призвано внести новый вклад в эту область, предложив четкие и ценные выводы, которые принесут пользу специалистам, занимающимся моделированием и экспериментами в области течения в сложных геометрических формах.

2. Формулировки числовых моделей.

Основной целью данной работы является анализ характеристик естественных конвекционных течений в треугольной полости с долинной конфигурацией. Для достижения этой цели используется метод двумерного численного моделирования. Физическая модель и соответствующие ей граничные условия визуально представлены на рисунке 1. Чтобы исправить сингулярность, присутствующую в соединении между верхом и наклонными стенками, вносится стратегическая корректировка путем удаления соответствующего количества вещества из обоих верхних углов. В частности, 4% длины аккуратно извлекаются в виде мельчайших точек.

Следует отметить, что эта незначительная корректировка не оказывает какого-либо заметного влияния на механику потока жидкости и теплопередачи, как показали предыдущие исследования [18,20–24,29–31].

Размеры полости определяются следующим образом: длина по горизонтали равна 2L, высота H , где L = 2H и отношение A = H/L = 0,5. В момент времени T = T0 жидкость внутри полости изначально имеет однородную температуру и не движется. При заданных температурах Tc = T0 T/2 и Th = T0 + T/2 соответственно в верхней и наклонных стенках происходят мгновенные процессы охлаждения и нагрева. В любых данных обстоятельствах все границы неподвижны.

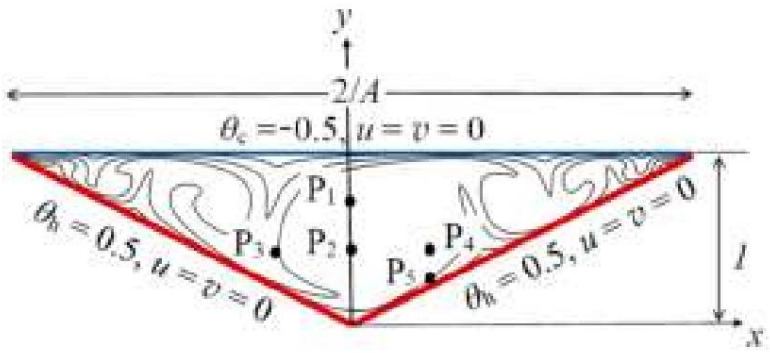


Рисунок 1. Физическая область и безразмерные граничные условия с фигурирующими точками P1 (0, 0,825), P2 (0, 0,46), P3 (-0,5, 0,5), P4 (0,5, 0,5) и P5 (0,5, 0,255).), которые применяются на следующих рисунках.

В этом исследовании анализируются двумерные естественные конвекционные потоки внутри замкнутого пространства в форме долины. Основные уравнения, использованные в этом исследовании, представлены ниже с использованием приближения Буссинеска в качестве упрощающего предположения [62].

$$\frac{U}{X} + \frac{V}{Y} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{1}{\tau}\frac{U}{} + У\frac{U}{X} + V\frac{U}{Y} = -\frac{P}{X\rho} + \nu\left(\frac{2U}{X2} + \frac{2U}{Y2}\right), \quad (2)$$

$$\frac{B}{\tau} + У\frac{B}{X} + B\frac{B}{Y} = -\frac{1}{\rho}\frac{P}{Y} + \nu\left(\frac{2B}{X2} + \frac{2B}{Y2}\right) + g\beta(T - T0), \quad (3)$$

$$\frac{T}{\tau} + У\frac{T}{X} + B\frac{T}{Y} = к\left(\frac{2T}{X2} + \frac{2T}{Y2}\right). \quad (4)$$

Machine Translated by Google

U и V в уравнениях соответственно представляют горизонтальный и вертикальный расход . Для двумерной системы координат: • P – давление; • ρ – плотность; t – время;

•

• T — температура в момент времени T0, где T0 = (Tc + Th)/2, жидкая среда в треугольная полость изотермически стационарна.

Используются следующие безразмерные переменные:

$$x = \frac{\text{Икс}}{\text{ЧАС}},\ y = \frac{\text{Да}}{\text{ЧАС}},\ \text{ты} = \frac{\text{эм-м-м}}{1\ \text{кRa}\ 2},\ v = \frac{VH,}{\text{кPa}\ 2},\ p = \frac{PH2}{\rho\text{к2Ra}},\ \theta = \frac{T\quad T}{Tx - Tc},\ \tau = \frac{t\text{кRa2}}{H2.} \tag{5}$$

В вышеупомянутых уравнениях переменные v, x, y, p, τ и θ представляют собой нормализованные аналоги U, V, X, Y, P, t и T соответственно. Три управляющие переменные, соотношение сторон (A), число Прандтля (Pr) и число Рэлея (Ra), оказывают влияние на естественные конвекционные потоки камеры (подробнее см. в [6]), которые лучше всего описать следующим образом. :

$$A = \frac{\text{ЧАС}}{\text{л}},\ \text{Пр} = \frac{\nu}{\text{к}},\ \text{Ра} = \frac{g\beta(Th\quad Tc)H3}{\nu\text{к}}. \tag{6}$$

Приведенные выше безразмерные переменные добавляются, и тогда уравнения (1)–(4) становятся (для дополнительную информацию см. в [61]):

$$\frac{u}{y}\quad v = 0 + x, \tag{7}$$

$$\frac{u}{x}\quad \frac{u}{y}\quad u + u + v\quad \tau = p + \frac{\text{Пр}}{\text{Ра}\ \frac{1}{2}}\quad \frac{2u}{y}\quad 2\ \frac{2u + x}{2}, \tag{8}$$

$$\frac{v}{x}\quad \frac{v}{y}\quad v + u + v\quad \tau = \frac{p}{y} + \frac{\text{Пр}}{\text{Ра}\ \frac{1}{2}}\quad \frac{2v}{x\ 2} + \frac{2B}{y^2} + \text{Пр}\theta, \tag{9}$$

$$\frac{\theta}{x}\quad \frac{\theta}{y}\quad \theta + u + v\quad \tau = \frac{\text{Пр}}{\text{Ра}\ \frac{1}{2}}\quad \frac{2}{2}\quad x2\theta\ \theta y + \frac{}{2}. \tag{10}$$

В настоящем исследовании использовался решатель Навье-Стокса конечного объема [62] Fluent 15.0 в ANSYS для моделирования естественной конвекции внутри полости в форме долины. Принципы сохранения массы, сохранения импульса и сохранения энергии лежат в основе вычислительной модели, которая используется для моделирования нестационарного естественного конвекционного течения в воздушной полости. Уравнение неразрывности, уравнения Навье-Стокса и уравнения энергии были решены с использованием методов конечных объемов после применения соответствующих численных методов. Неоднородная 2D-сетка создана с помощью коммерческого программного обеспечения ICEM 15.0, а числовые результаты отображены графически с помощью программы постобработки TECPLOT 360.

Основные уравнения (7)–(10) решаются с помощью метода конечных объемов с использованием метода SIMPLE, который подробно объяснен в ссылке [63] и Саха [64].
Численная процедура для метода SIMPLE показана на рисунке 2.

Machine Translated by Google

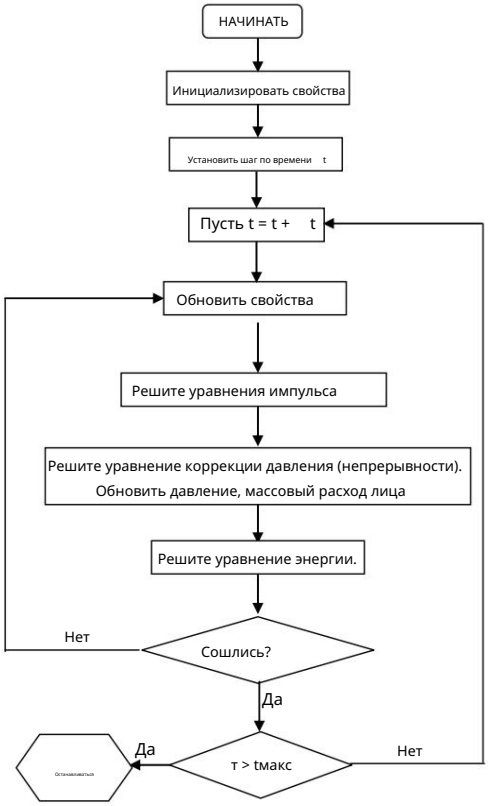


Рисунок 2. Блок-схема метода SIMPLE для неустановившегося потока.

3. Тест на зависимость от сети

Сетка и временная зависимость наибольшего числа Рэлея (Ra = 108) для

В настоящем исследовании исследовались число Прандтля (Pr = 0,71) и соотношение сторон (A = 0,5). В тесте использовались три симметричные неравномерные сетки размером 600 × 100, 800 × 150 и 1200 × 200. Эти сетки были разработаны с учетом более мелкой сетки. вблизи границ и более грубые сетки во внутренней зоне. Сетка 800 × 150 прошла расширение на 3 % в диапазоне от минимальной ширины 0,00025 у стены до максимальной ширины. ширина 0,02 внутри. На рис . 3 показан временной ряд числа Нуссельта при правая стенка полости. Данные были получены с использованием различных сеток и временных шагов. для числа Рэлея 108 . Числа Нуссельта, полученные из разных сеток ϕϕ и временные шаги демонстрируют единообразие на начальном этапе, наряду с некоторым расхождением ϕϕ на стадии зрелости. Кроме того, в таблице 1 приведены расчет и перечень средних значений. Числа Нуссельта на полностью развитой стадии. На основе проведенного анализа было Было установлено, что различия в результатах, наблюдаемые в разных сетках и ϕϕ Шаги по времени находятся в пределах допустимого порога 2%. Принимая это во внимание, При численном моделировании в этом исследовании использовался размер сетки 800 × 150 и шаг по времени 0,0025.

Таблица 1. Числа Нуссельта (Nu) для разных сеток и временных шагов.

Сетка и временной шаг	Среднее Ню	Разница
600 × 100 и τ = 0,0025 800	121,63	1,94%
× 150 и τ = 0,00125 800 ×	122,47	1,27%
150 и τ = 0,0025 1200 × 200	124,04	-
и τ = 0,0025	122,95	0,87%

Machine Translated by Google

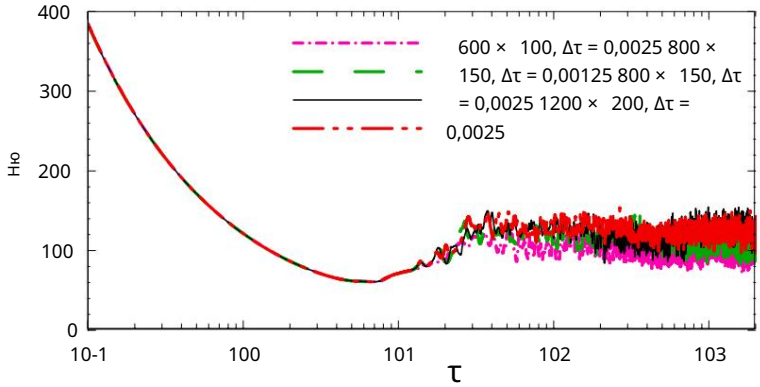


Рис. 3. Временной ряд чисел Нуссельта у правой наклонной стенки в долинной полости для Ra = 108 с определенными сетками и шагами по времени.

4. Валидация

На рисунке 4 сравнивается лабораторный эксперимент, проведенный Holtzman et al. [32] с текущие численные результаты для дополнительного подтверждения. В отличие от треугольной полости в данной работе она перевернута по вертикали и вместо соответствующих чисел Грасгофа использованы числа Рэлея . По сравнению с экспериментальными результатами в Рисунок 4b для чисел Рэлея Ra = 3,5 × 103 , Рисунок для Ra = 7 × 103 и Рисунок 4f для Ra = 7 × 104 численные результаты, изображающие симметричное течение для Ra = 7 × 103 на рисунке 4a, а асимметричный поток для Ra = 1,2 × 104 и Ra = 105 на рисунках 4c,e являются точными. Как указано Xu et al. В [18] и Паттерсоне и Армфилде [20] наличие несоответствий между численными значениями Ra и экспериментальными данными Ra порождает заметное противоречие: если численные данные и результаты эксперимента точны, экспериментальное число Рэлея примерно в 1,5–2,5 раза превышает числовое число Рэлея. Численные методы, использованные в данном исследовании, могут быть использованы для изображения переходного течения в треугольной полости, поскольку экспериментальные и расчетные результаты идентичны.

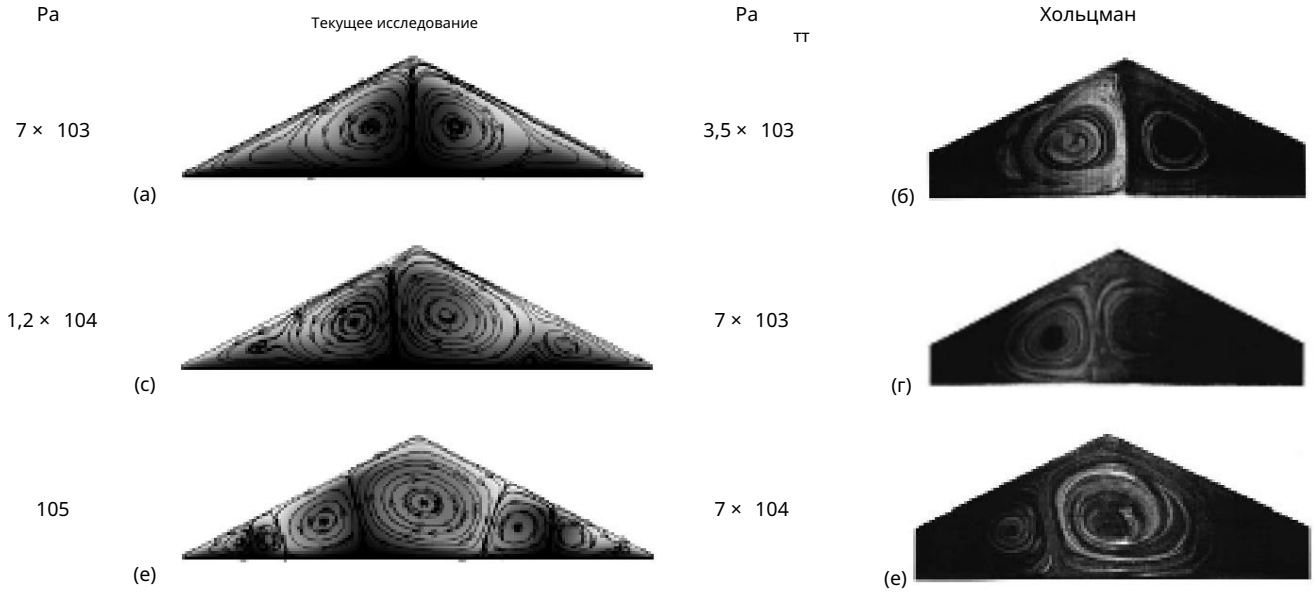


Рисунок 4. Сравнение экспериментальных результатов Хольцмана (б, г, е) [32] для различных чисел Рэлея с текущим исследованием (а, в, д).

5. Численные результаты и обсуждение.

В следующем разделе даются объяснения основных характеристик потоков жидкости внутри V-образной полости, в которой поток стимулируется теплом от

Machine Translated by Google

наклонных стенок и рассеивается за счет охлаждения от верхней стены. Анализ сосредоточен на диапазоне чисел Рэлея от Ra = 100 до соотношения сторон , число Прандтля Pr = 0,71 и 108, A = 0,5. Для всестороннего изучения явления роста потока рассматриваются различные безразмерные времена . В данной работе было проведено 2D численное моделирование . Согласно численному моделированию, эволюцию течения для этих чисел Рэлея в разное время от τ = 0 до 5000 можно разделить на симметричное течение, асимметричное течение и нестационарное течение.

Для получения результатов моделирования использовались высокопроизводительные вычислительные комплексы с 64 процессорами, на которых потребовалось 15 дней для малого Ra = 105 и 20 дней для большого Ra = 108 для безразмерного времени, τ = 5000 с шагом по времени. размер, τ = 0,0025.

5.1. Симметричное

течение. Обнаружено, что при Ra = 100 , 101 и 102, развитие переходного течения с безразмерным временем не демонстрировало возрастающего или уменьшающегося шлейфа, что указывает на то, что для этих чисел Рэлея течение демонстрировало постоянный уровень стабильности из-за преобладающего влияния доминирования проводимости. В этом исследовании , результаты для Ra = 100, 101 и 102 при τ = 0, 0,1, 0,5, 1 и 2000 представлены на рисунке 5. Первоначально при τ = 0 температура постоянна, и в это время наблюдается отсутствие потока жидкости в полости. Потоки жидкости возникают, когда наклонные стенки внезапно нагреваются, а верхняя с На рисунке 5 температура быстро меняется при малых Ra = 100 и 101 при τ = 0,1 и становится симметричной, а при Ra = 102 она становится симметричной при τ = 0,5 и эта симметричная тенденция наблюдается от τ = 0,5 до 2000 г. Для При всех значениях Ra и τ полость содержит пару симметричных ячеек. Конвективные потоки имеют относительно небольшие величины, при этом в ячейках преобладает проводимость, что обеспечивает стабильность.

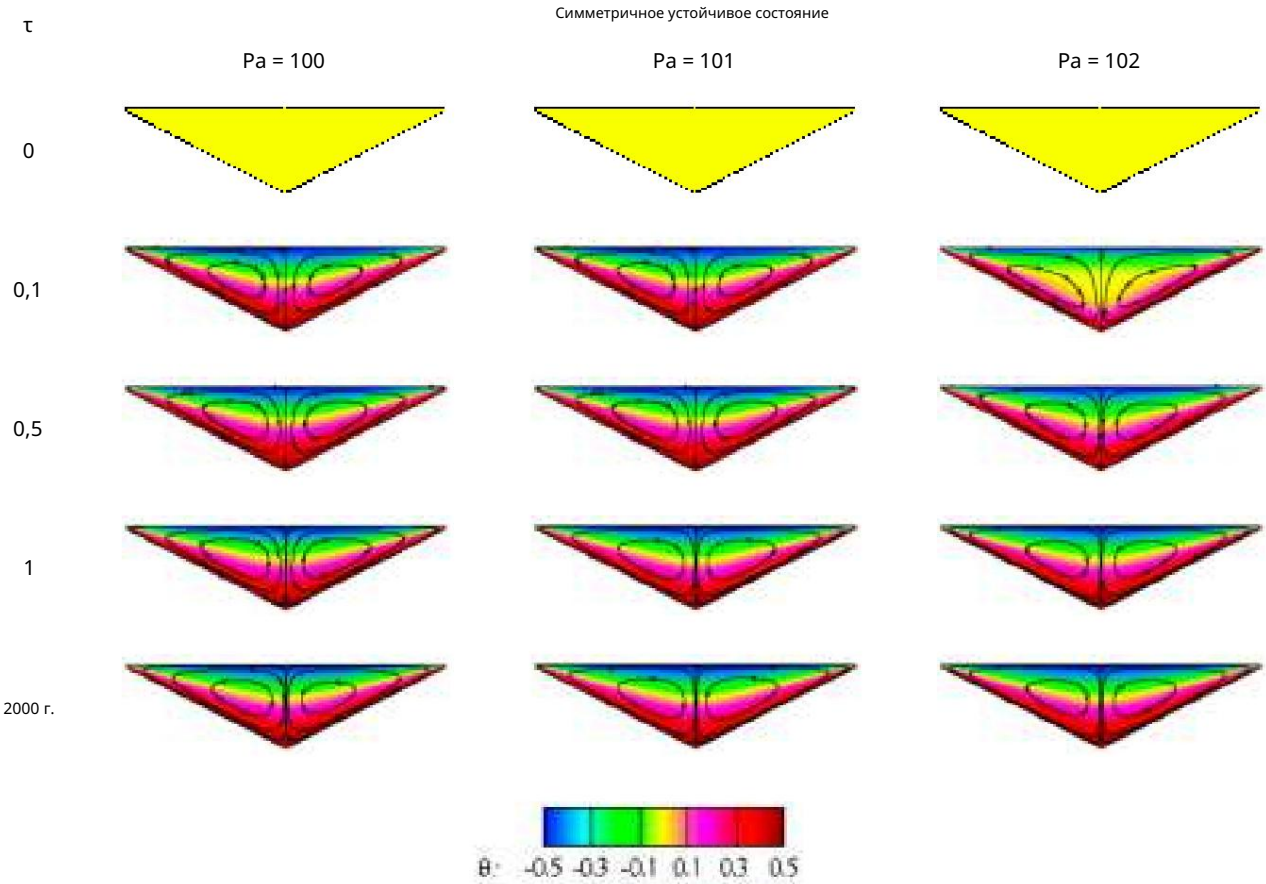


Рисунок 5. Линии тока и изотермы на различных безразмерных интервалах времени τ и различных малых числах Рэлея Ra для симметричного устойчивого состояния.

Machine Translated by Google

5.2. Асимметричный

поток Поток с различными числами Рэлея Ra = 103 , 7×103 и 2×104 показаны на рисунке 6 на основе времени с отображенными линиями тока и изотермами. Первоначально при τ = 0 температура постоянна и жидкость в полости не движется. Потоки жидкости начинаются, когда наклонные стенки внезапно нагреваются, а верхняя стенка внезапно охлаждается. На рисунке 6 температура постепенно меняется для Ra = 103 и 7×103 при τ = 0,1 и становится симметричной, тогда как для Ra = 2×104 она становится симметричной при τ = 1. На начальном этапе, когда τ = 1, стационарные течения для всех чисел Рэлея симметричны. Полость имеет две симметричные ячейки. Поскольку в клетках преобладает проводимость, которая поддерживает их вечную стабильность, конвективные потоки действительно чрезвычайно низки. Бароклинность вблизи наклонных стенок вызывает вязкий сдвиг, который вызывает естественные конвекционные потоки в фундаментальном симметричном состоянии, но с течением времени течение для Ra = 7×103 и 2×104 начинает постепенно становиться асимметричным. Как видно из рисунка, на начальном переходном этапе при τ = 1 конвекция в Ra = 7×103 и 2×104 усиливается, хотя и недостаточно сильна, чтобы нарушить симметричную структуру течения (см. рис. 7), в то время как конвекция при Ra = 103 остается статичной. Хотя при Ra = 103 и Ra = $7 \cdot 103$ ячеек всего две, при Ra = $2 \cdot 104$ при τ = 10 в резонаторе встречаются четыре ячейки . То есть, помимо симметричного нарушения, число Рэлея приводит к увеличению числа клеток в полости. Следует отметить , что в зависимости от начальных возмущений любая из двух ячеек может оказаться крупнее и продвинуться в полость. Конвекция при Ra = 103 оказывается постоянной и слабой на всех последующих этапах времени, например, при τ = 100, 1000, 2000 и 4000, но конвекция при Ra = 7×103 медленно усиливается при τ = 100, 1000. , 2000 и 4000, хотя этого недостаточно , чтобы нарушить симметричное состояние. С другой стороны, при Ra = 2×104 конвекция возрастает настолько сильно, что нарушает симметричную структуру и создает более двух новых ячеек, что проявляется при τ = 100, и течение становится асимметричным (на рис. 7). Шесть ячеек присутствуют для Ra = 2×104 при τ = 100 и 1000. В зависимости от начальных возмущений одна из двух ячеек при τ = 1000 становится больше и доминирует над другой клеткой в полости, перемещаясь к центру полости. При τ = 2000 число ячеек уменьшается до пяти, и эта тенденция сохраняется до τ = 4000. При внимательном рассмотрении видно, что на дальнейшем этапе развития асимметричный поток достиг состояния равновесия, обычно называемого установившаяся ситуация. Переход из симметричного состояния в асимметричное, происходящий в диапазоне от Ra = 7×103 до Ra = 2×104 , можно понимать как сверхкритическую бифуркацию «Вилы». Это преобразование обусловлено возникновением неустойчивости Рэлея – Бенара. Видно, что циркуляция клеток усиливается и характер потока становится постоянно асимметричным.

На рис . 7 представлены временные ряды температуры и скорости для Ra , Pa = 7×103, = 103 и Ra = 2×104 в разных точках P1, P2 и P5. Жидкость внутри полости в форме долины первоначально демонстрирует изотермическое и стационарное поведение. Охлаждение и нагрев верхней стенки и наклонных стенок происходят одновременно, при этом безразмерная температура обозначается как θc для верхней стенки и θh для наклонных стенок. Рисунок 7a демонстрирует, что нет разницы в температуре между любой из точек P1 и P2, а температура различна в точке P5 на ранней стадии при небольшом Ra = 103 . С течением времени температура увеличивается и уменьшается в трех разных точках переходного периода. Наконец, на полностью развитой стадии колебания температуры не происходит, и тогда течение становится устойчивым. Для большей точности определения устойчивости потока здесь мы использовали безразмерные времена от 0 до 5000. На рисунке 7d первоначально скорость равна нулю; с увеличением времени скорость остается прежней в точках P1 и P2; а в точке P5 скорость увеличивается и, наконец, становится постоянной. Аналогичные последствия наблюдались на рис . 7b,e. На рисунках ясно видно, что течение внутри каверны находится в состоянии устойчивой симметрии. Отсюда может показаться, что в симметричных состояниях течение Теперь, на рисунке 7c, температура внезапно снижается, а затем увеличивается в точках P1 и P2 в течение переходного периода и, наконец, стабилизируется на полностью развитой стадии. В точке P5 изменений из-за ее положения нет. Однако скорость (рис . 7f)

Machine Translated by Google

явно внезапно выходит за пределы, а затем становится постоянным на полностью сформировавшейся стадии, а это указывает на то, что течение становится асимметричным установившимся состоянием при Ra = 2 × 104 .

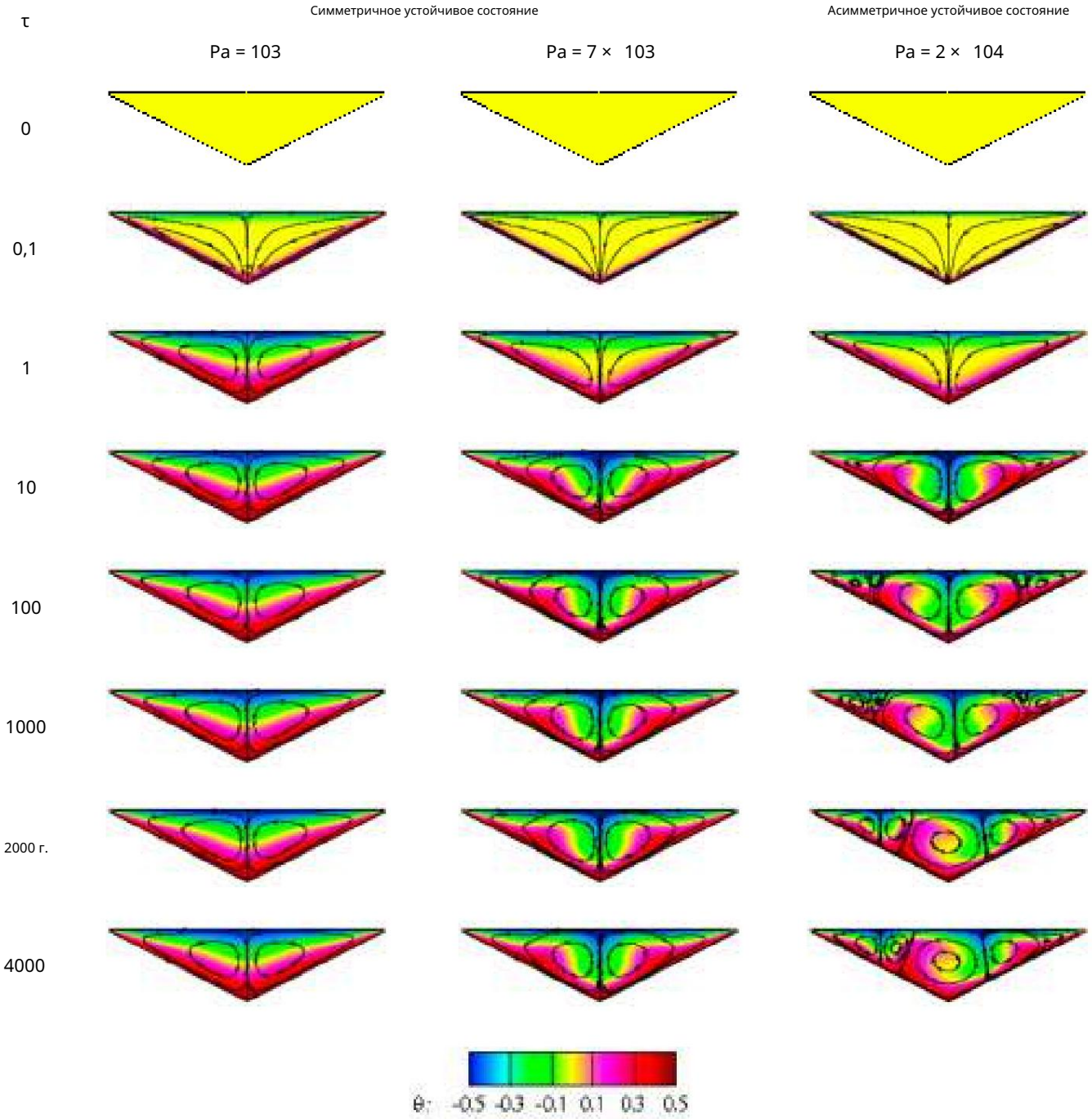


Рис. 6. Линии тока и изотермы на различных безразмерных интервалах времени для установившегося режима. Числа Рэлея, Ra = 103 , Pa = 7 × 103 и Pa = 2 × 104 .

Machine Translated by Google

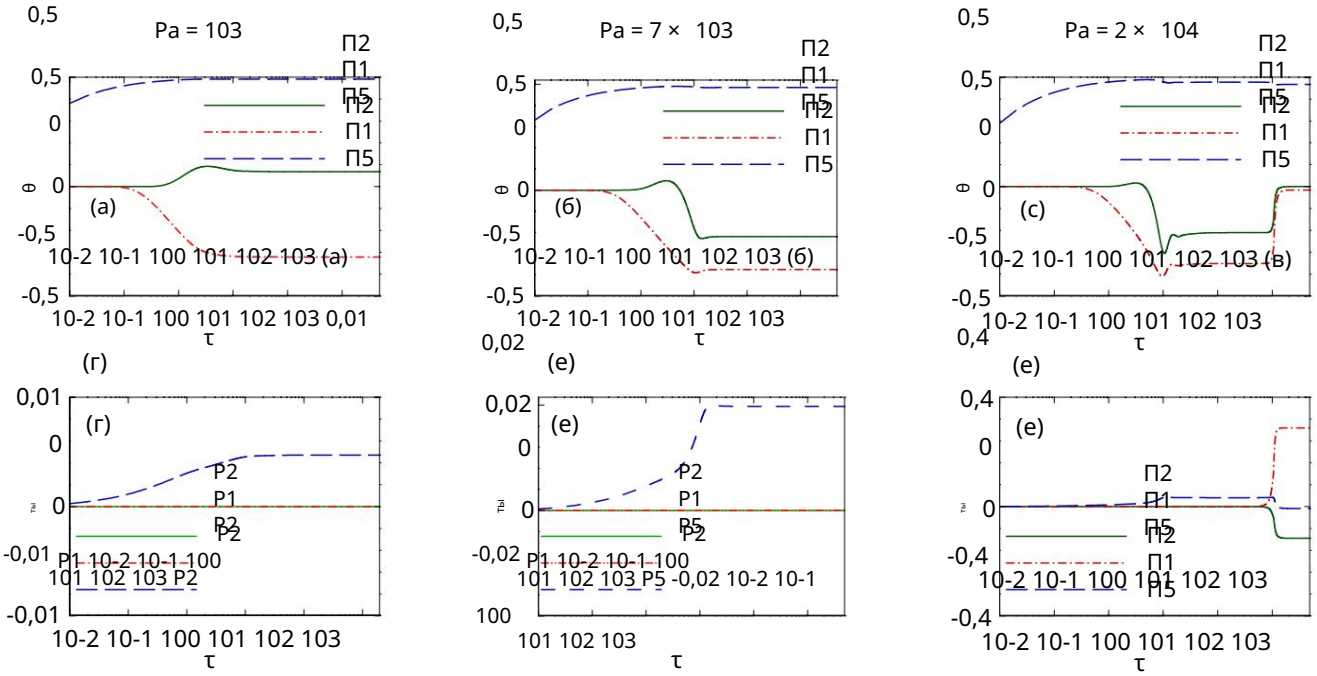


Рисунок 7. Временные ряды температуры и скорости в трех различных точках: P1 (0, 0,825), P2 (0, 0,46) и P5 (0,5, 0,255) для (a,d), когда Ra = 103 , для (б,д) при Ra = 7 × 103 , и для (c,f), когда Ra = 2 × 104 .

5.2.1. Бифуркация вил

На рис . 8 показаны изотермы и линии тока, соответствующие числу Рэлея Ra = 104 . Рисунок 8a демонстрирует сохранение явной симметрии течения при Ra = 7 × 103 . При Ra = 104 и Ra = 1,3 × 104 поток демонстрирует асимметрию, как показано на рис. 8b,c. Следует отметить, что в зависимости от начальных возмущений любая из двух ячеек может вырасти и переместиться в сторону полости. Когда число Рэлея достигает значения Ra = 1,3 × 104 , как показано на рисунке 8в, в правой верхней части полости появляется дополнительная ячейка (в зависимости от начальных возмущений), и такая асимметричная конфигурация потока становится более очевидной. поскольку значение числа Рэлея увеличивается. То есть, помимо симметричного разрыва, число Рэлея отвечает за рост числа клеток внутри полости. Например, на рисунке 8b есть четыре ячейки для Ra = 104, тогда как на рисунке 8c есть пять ячеек для Ra = 1,3 × 104 . Переход, наблюдаемый в Ра = 104, районе перехода симметричного состояния в асимметричное, можно охарактеризовать как сверхкритическую бифуркацию Вил, которая происходит, когда начинает возникать нестабильность Рэлея – Бенара.

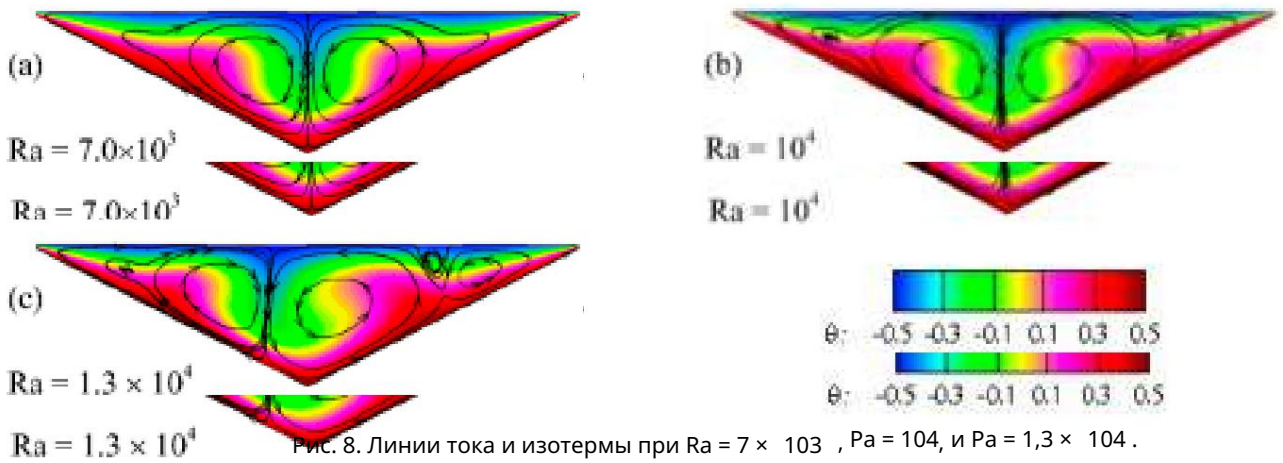


Рис. 8. Линии тока и изотермы при Ra = 7 × 103 , Pa = 104, и Pa = 1,3 × 104 .

Machine Translated by Google

В таблице 2 представлена скорость x в точке P2 (0, 0,46) для различных чисел Рэлея. (Ra = от 101 до 106), чтобы понять переход из симметричного в асимметричное состояние. во время полностью развитой стадии (τ = 2000) бифуркации Вил. Для значений Ra меньше больше или равно 7,5 × 103, скорость x близка к нулю из-за симметрии потока. Как только число Рэлея достигнет или превысит 7,6 × 103., полярность клетки смещается на положительную когда скорость x увеличивается, и отрицательным, когда скорость x уменьшается.

Таблица 2. Скорости в направлении x для различных чисел Рэлея в точке P2 (0, 0,46).

Число Рэлея 101 102	Скорость
103	0
7,5	0
×	0
103 7,6 ×	0
103 104	±9,47 × 10 5
1,2	±0,00669
× 104 1,5	±0,0557
× 104	±0,09
105	±0,096
106	±0,0993

На начальном этапе при τ = 0 температура постоянна, как показано на рисунке 9. На рисунке видно, что течения симметричны и непрерывны на ранней стадии при τ = 1. для Ra = 5 × 104 , Pa = 105 и Pa = 106 . Бифуркация Вил приводит к тому, что поток со временем усиливаются и в конечном итоге становятся асимметричными. На графиках видно асимметричное линии тока и изотермы при числах Рэлея Ra = 5 × 104, Ra = 105 и Ra = 106 в переходные стадии (τ = 100 и 800). Несомненно интересно, что поток колеблется при значительное количество времени с более высоким числом Рэлея. На этом рисунке для всех Pa значений течения в долинной каверне асимметричны и стационарны с прохождением время. Для более высокого Ra = 106, течение становится асимметричным и установившимся при τ = 800, тогда как Ra = 5 × 104 и Ra = 105 требуется больше времени для достижения асимметричной установившейся ситуации.

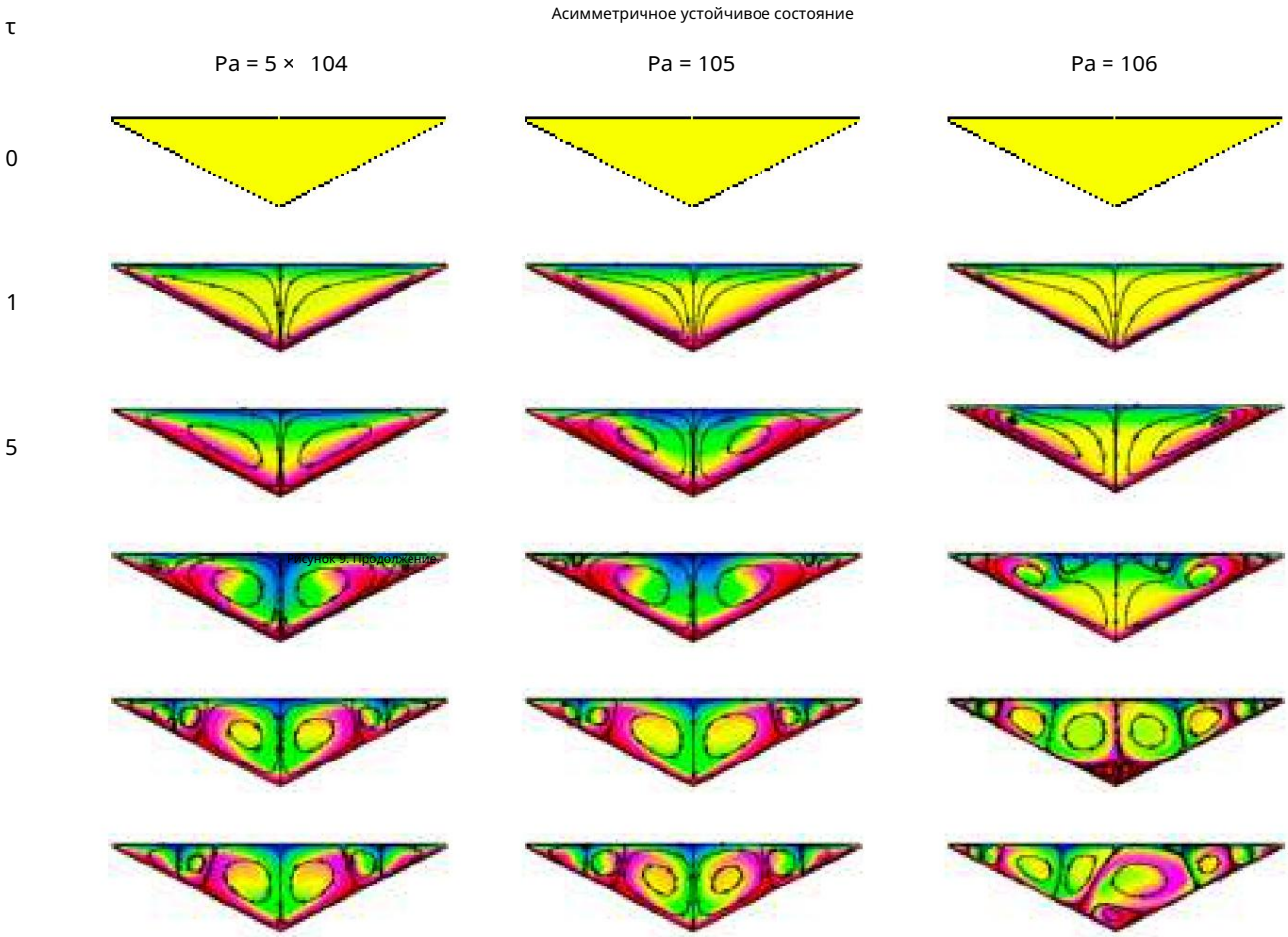


Рисунок 9. Продолжение

Machine Translated by Google

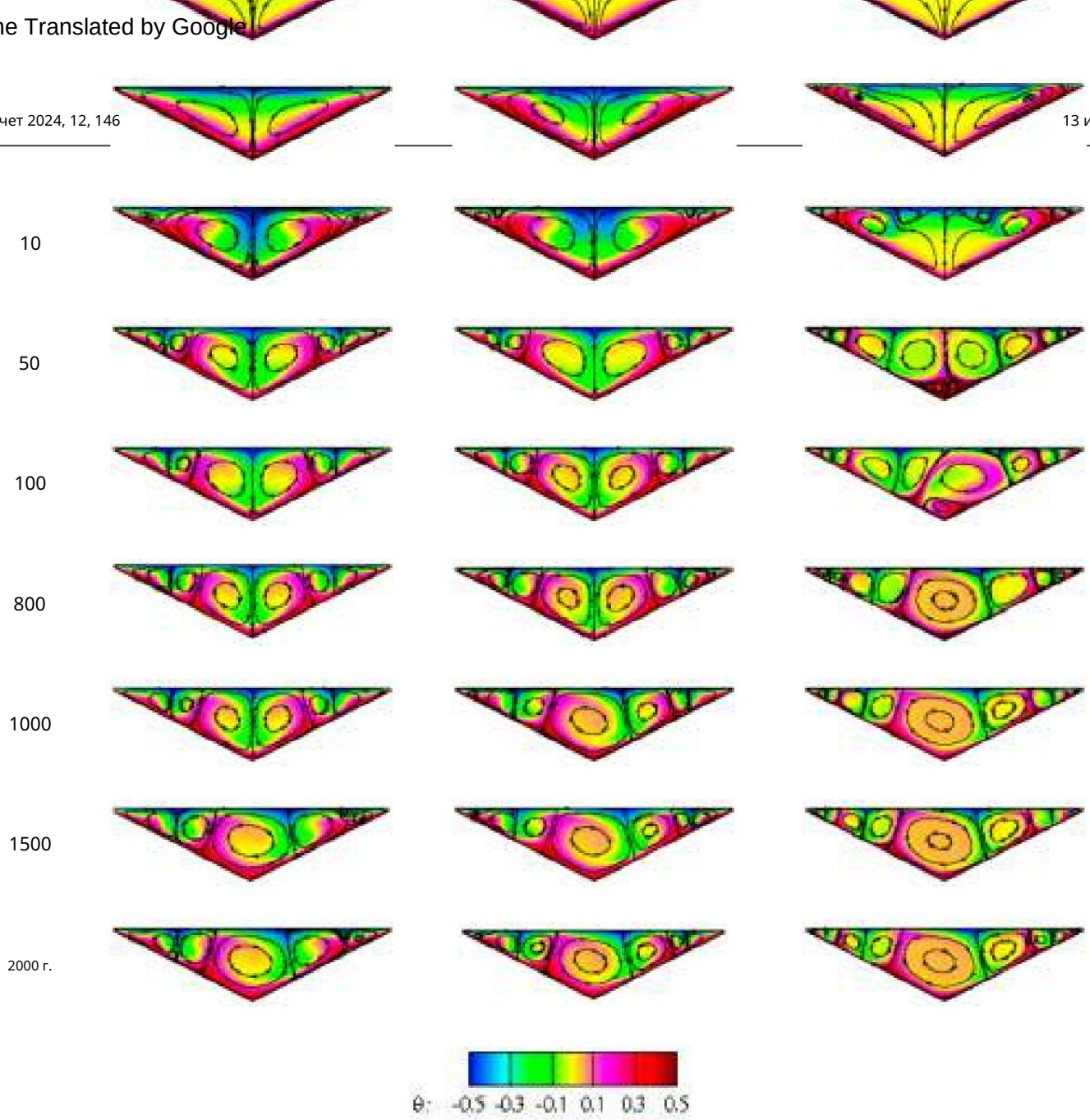


Рис. 9. Линии тока и изотермы на различных безразмерных интервалах времени для Ra = 5 × 104, Pa = 105 и Pa = 106 .

Видно, что температура и скорость влияют на течение в каверне во времени, как и рассчитано на рисунке 10 для большей точности в диапазоне чисел Рэлея и различных точки. Рис. 10а,б демонстрируют, что сначала температуры в точках P1 одинаковы. и П2, но точка П5 расположена близко к нагреваемой стене (см. рисунок 1), что приводит к ее нагреву вверх быстрее, чем другие точки на ранней стадии. С течением времени температура на переходном этапе сначала падает, а затем повышается, достигая в конечном итоге своей постоянной точки в полностью развитой стадии, когда уже нет колебаний температуры. Также, Из рис . 10г,д хорошо видно, что скорость увеличивается с течением времени. выбросы скорости в переходный период, прежде чем стабилизироваться в полностью развитом этап. На рис . 10в видно, что на переходном этапе температура возрастает и становится стабильна в полностью развитой стадии. Напротив, скорость на рисунке 10f колеблется во время переходный период, прежде чем стать постоянным на последнем этапе. Предыдущий цифры и анализ показывают, что в асимметричном состоянии течение становится нестационарным в переходный период, а затем устойчивый в полностью развитых стадиях.

Machine Translated by Google

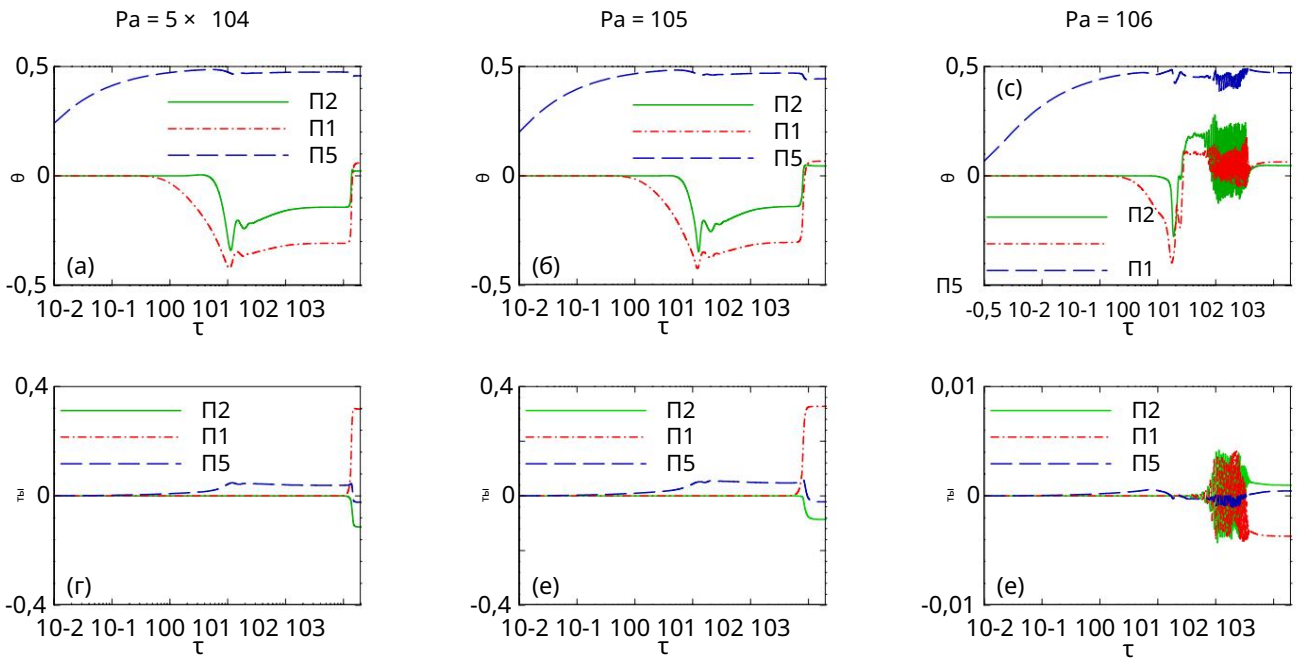


Рисунок 10. Временные ряды температуры и скорости в трех различных точках: P1 (0, 0,825), P2 (0, 0,46) и P5 (0,5, 0,255) для (a,d), когда Ra = 5 × 104 , для (б,д) при Ra = 105 , и для (c,f), когда Ra. = 106 .

5.2.2. Другие бифуркации

Для более высоких чисел Рэлея асимметричные изотермы и линии тока изображены на рисунке 11. Очевидно, что при увеличении числа Рэлея происходит несколько типов дальнейших бифуркаций, приводящих к увеличению числа ячеек, как видно на рисунке 11 . Рисунок 11a, в полости две ячейки. С увеличением Ra мы видим на рисунке 11b , что количество ячеек становится четырьмя; на рисунке 11c число ячеек равно пяти. Например, число клеток увеличивается с шести при числе Рэлея 5 × 104 на рисунке 11d до более шести, как показано в таблице 3. Рисунок 11 демонстрирует, что когда число Рэлея увеличивается, в левой или левой части тела развивается больше новых крошечных клеток. правая часть полости. Однако в центре полости постоянно сохраняется одна крупная клетка . Это указывает на то, что конфигурация течения внутри полости становится все более сложной для асимметричного установившегося состояния с ростом числа Рэлея.

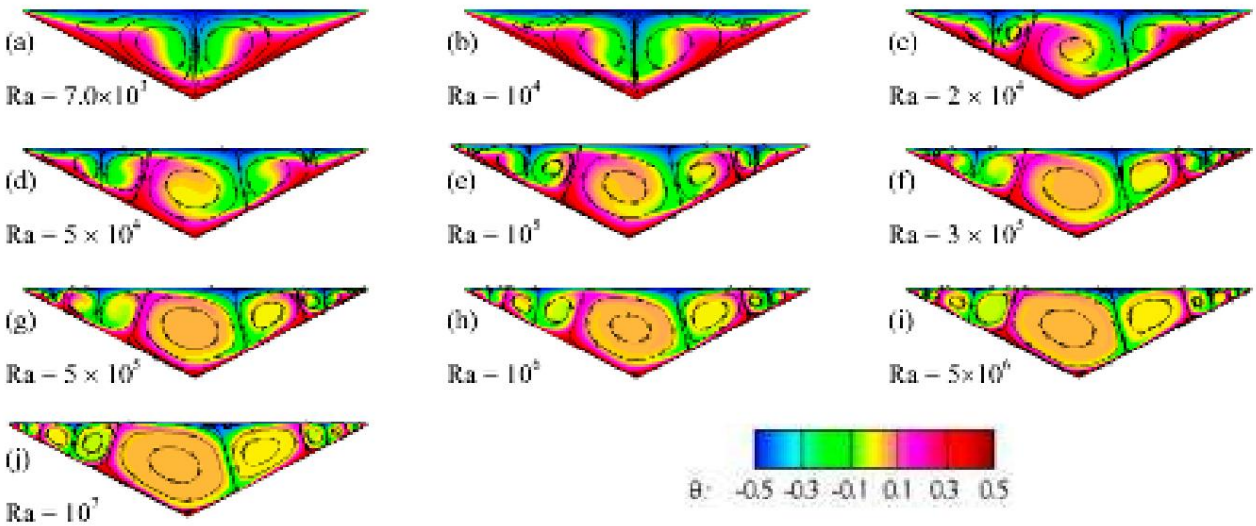


Рисунок 11. На полностью разработанной стадии линии тока и изотермы для различных чисел Рэлея.

Machine Translated by Google

Таблица 3. Количество ячеек с соответствующими числами Рэлея.

Число Рэлея 7 ×	Количество ячеек
103 104	2
2	4
× 104	5
5 × 104	6
105	7
3 × 105	9
5 × 105	10
106	11
5 × 106	13
107	15

Таблица 3 показывает, что число Рэлея и количество ячеек связаны. Число Рэлея увеличилось с 7 × 103 до 107 по мере увеличения числа бифуркаций с двух до пятнадцати ячеек. Для значений Ra от 104 до 107 ясно, что существует почти линейная связь между количеством клеток и Ra.

5.3. Нестационарный

поток. Асимметричная структура потока создается в результате бифуркации вил , возникающей на более поздних стадиях переходного периода. Как уже отмечалось, численное моделирование на ранних этапах испытывает раздвоение вил. На рисунке 12 показаны линии тока и изотермы для Ra = 107 и Ra = 108, чтобы лучше изучить течение при больших числах Рэлея в разные моменты времени. На рисунке 12 первоначально при τ = 0 температура постоянна для всех значений Ra. На рисунке видно, что жидкости симметричны для всех чисел Рэлея при τ = 1, но с течением времени при τ = 5 они становятся асимметричными и создают две дополнительные крошечные ячейки в полости в правом и левом верхних углах. С увеличением количества ячеек все значения Ra при τ = 10 на рисунке 12 демонстрируют одинаковую картину течения. При τ = 50 для Ra = 107 в центре верхней части двух крупнейших ячеек полости появляется крошечная ячейка, но для Ra = 5 × 107 и Ra = 108 при τ = 50 стационарное течение нарушается и становится нестационарным. На рисунке 11 поток более запутан для Ra = 5 × 107 и Ra = 108 при τ = 50, хотя он все еще постоянен, а самая большая ячейка имеет несколько ячеек меньшего размера в верхней правой и левой части. Это указывает на то, что между Ra = 107 и 5 × 107 существует бифуркация Хопфа (подробнее о бифуркации см. в [19]). При Ra = 107 асимметричное установившееся состояние остается одинаковым на всех последующих переходных, развитых переходных и полностью развитых стадиях при τ = 100, 1000, 1500 и 2000 соответственно. Наблюдаемые тенденции остаются неизменными как на развитой переходной стадии (τ = 1000 и 1500), так и на полностью развитой стадии (τ = 2000) для двух различных чисел Рэлея, а именно Ra = 5 × 107 и Ra = 108 . Но по мере увеличения τ , как показано на рисунке 12 для Ra = 108 при τ = 2000, обе клетки растут в середине двух крупнейших ячеек. Самая большая центральная ячейка демонстрирует движение справа налево. Нестационарное течение становится все более сложным из-за отсутствия устойчивости.

Со временем температурный ряд отслеживался и анализировался спектрально, чтобы понять нестационарный поток при более высоких числах Рэлея. На рисунке 13 показано изменение температуры во времени и спектральные плотности мощности в зависимости от различных значений Ra. Рисунок 13a демонстрирует устойчивый поток на протяжении полностью установившейся стадии для Ra = 107, а рисунок 13b демонстрирует периодический поток для Ra = 5 × 107 . Кроме того, на рисунке 13c показана спектральная плотность мощности температуры, показанная на рисунке 13b. Основная частота периодического потока с гармоническими модами равна fp = 0,397. Периодический поток меняется с ростом числа Рэлея. Это указывает на возникновение еще одной бифуркации, при которой периодическое решение переходит в другое. Поскольку число Рэлея продолжает расти, нестабильный поток становится хаотичным, как видно на рисунке 13d, который изображает полностью развитую стадию Ra = 108 . Согласно рис . 13д, уникальная частота с гармоническими модами исчезает при Ra = 108, а на полностью развитой стадии течен

Pa = 5 × 107

Machine Translated by Google

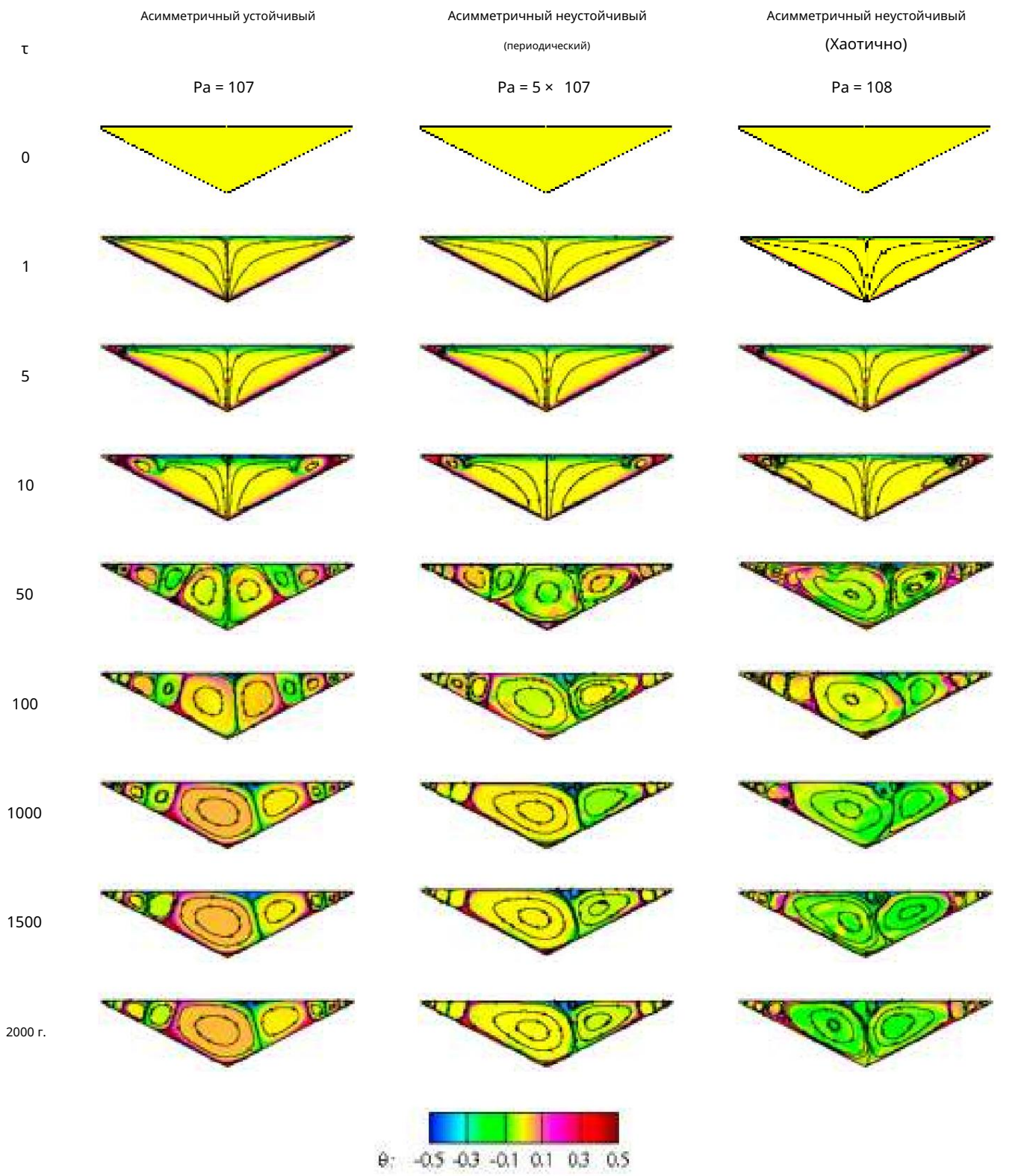


Рисунок 12. Линии тока и изотермы на различных безразмерных интервалах времени для различных высших Числа Рэлея: Ra = 107. , Pa = 5 × 107 и Pa = 108 .

Machine Translated by Google

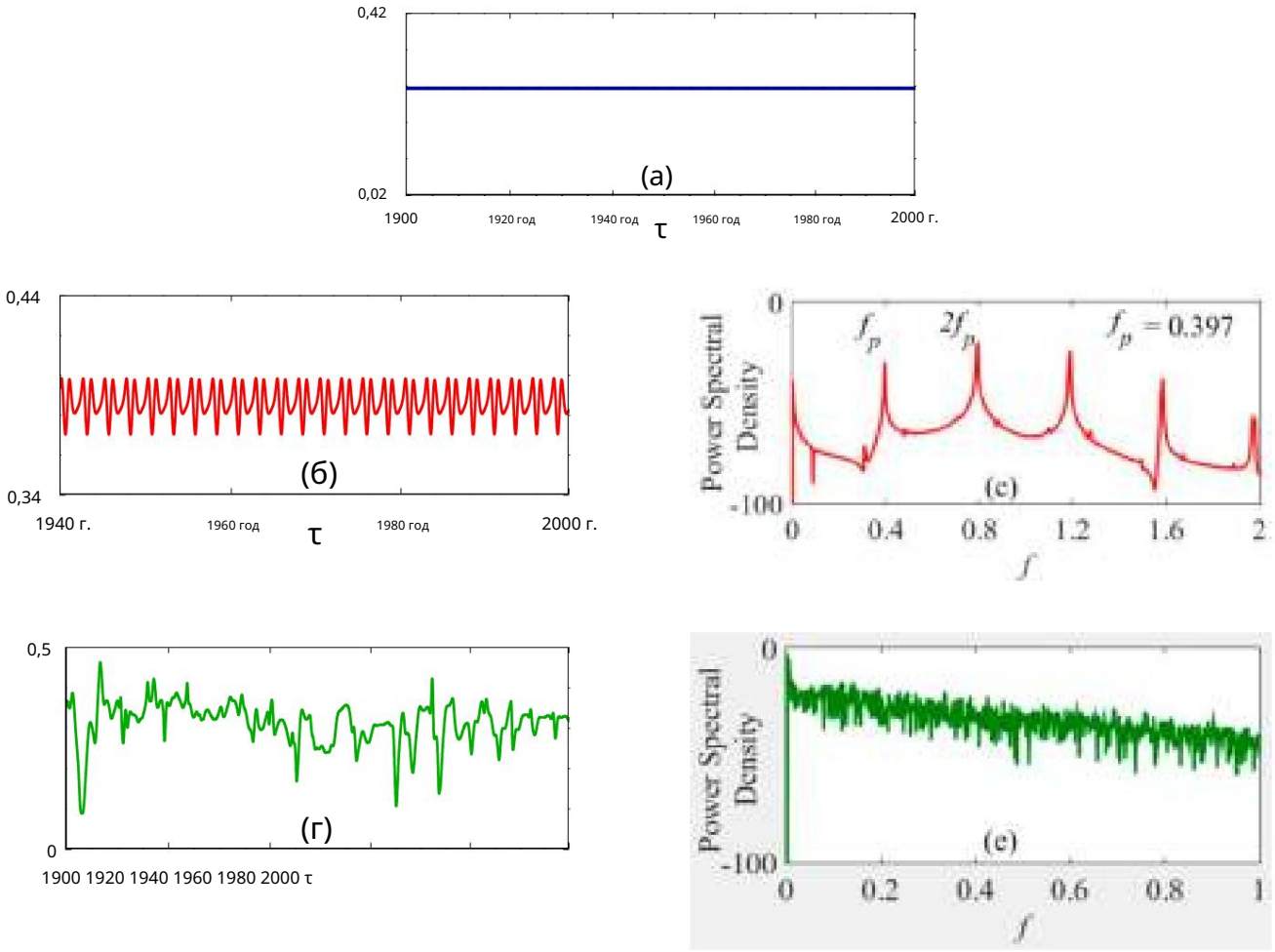


Рис. 13. Временной ряд температуры на полностью развитой стадии и спектральной плотности мощности в точке P5 (0,5, 0,255) (а) для Ra = 107 , (б,в) для Ra = 5 × 107 и (г, д) для Ra = 108 .

На рисунке 14 изображен анализ временных рядов температуры, а также скорости в трех различных точках: P1, P2 и P5, с более высокими числами Рэлея, а именно Ra = 107 5 × 107 и 108 . Поскольку на рисунках 14a–c изначально температура изотермическая и постоянная , она одинакова на разных стадиях ранней стадии для больших чисел Рэлея. В переходный период температура колеблется со временем для каждого Ra на рисунке 14. На продвинутой стадии развития, как показано на рисунке 14a , температура становится постоянной; то есть изменений температуры нет, но на рисунке 14b мы видим, что она становится периодической. На рисунке 14c с увеличением времени поток становится хаотичным и более сложным на полностью развитой стадии. Однако скорость (рис. 14d–f) начинается с нуля и изменяется с течением времени на переходном этапе. На рисунках 14d–f показано, что течение стабильно на развитой стадии, периодично на рисунке 14e и хаотично на рисунке 14f. Кроме того, самое главное, похоже, что на переходном этапе течение периодического состояния меняется с периодического на хаотическое. При этом в хаотическом состоянии течение постоянно хаотично на переходной стадии и на развитых стадиях.

Machine Translated by Google

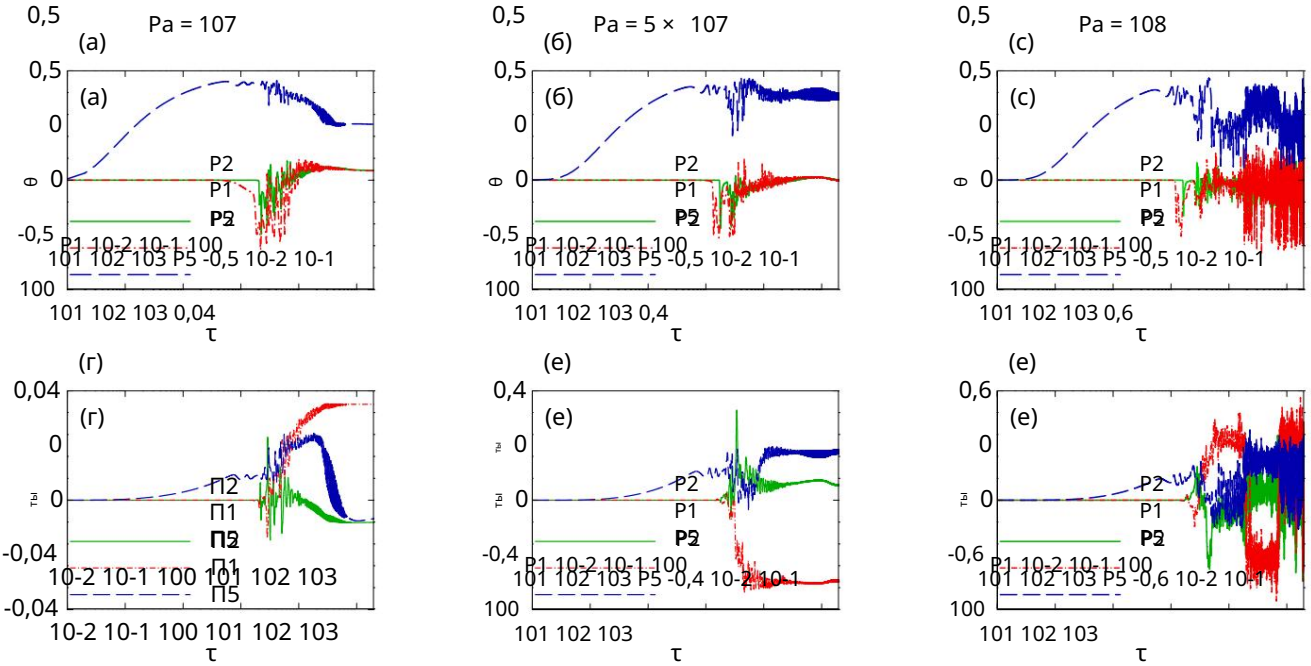


Рисунок 14. Временные ряды температуры и скорости в трех различных точках: P1 (0, 0,825), P2 (0, 0,46) и P3 (0,5, 0,255) для (a,d), когда Ra = 107 , для (б,д) при Ra = 5 × 107 , и для (c,f), когда Ra = 108 .

5.3.1. Бифуркация

Хопфа На рисунке 15 показаны линии тока и изотермы для Ra = 107 и Ra = 2 × 107 , что позволяет более глубоко проанализировать течение в случае больших чисел Рэлея. Рисунок 15a иллюстрирует более сложные течения на полностью развитой стадии для Ra = 107. , хотя он все еще устойчив. Однако более глубокое изучение численных результатов показывает, что попеременно встречаются более двух крошечных ячеек; в результате течение становится нестационарным при Ra = 2 · 107 на полностью развитой стадии. Это указывает на то, что между Ra = 107 и 2 × 107 существует бифуркация Хопфа .

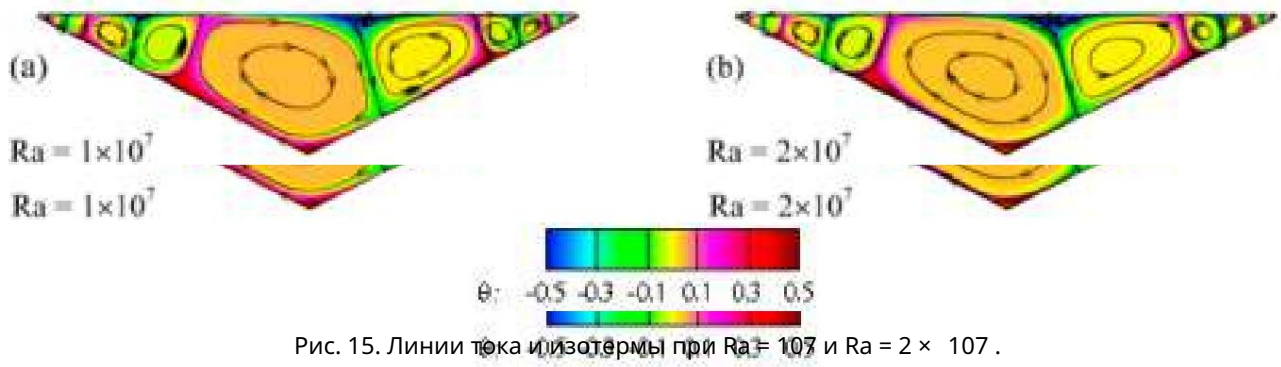


Рис. 15. Линии тока и изотермы при Ra = 107 и Ra = 2 × 107 .

На рисунке 16 показаны аттракторы со значениями в диапазоне от τ = 300 до 2000 для Ra = 107 и τ = 1000 до 1500 для Ra = 5 × 107 в определяющей точке P1 (0, 0,825), чтобы облегчить понимание бифуркации Хопфа. , что имеет место при переходе от установившегося режима к периодическому. На рисунке 16a показано, что плоская кривая u-θ достигает определенного значения, когда Ra = 107 . На рис. 16б показан предельный цикл для Ra = 5 × 107 . В результате при Ra = 5 × 107 , имеет место бифуркация Хопфа (более подробную информацию о бифуркации Хопфа см. в [65]).

Machine Translated by Google

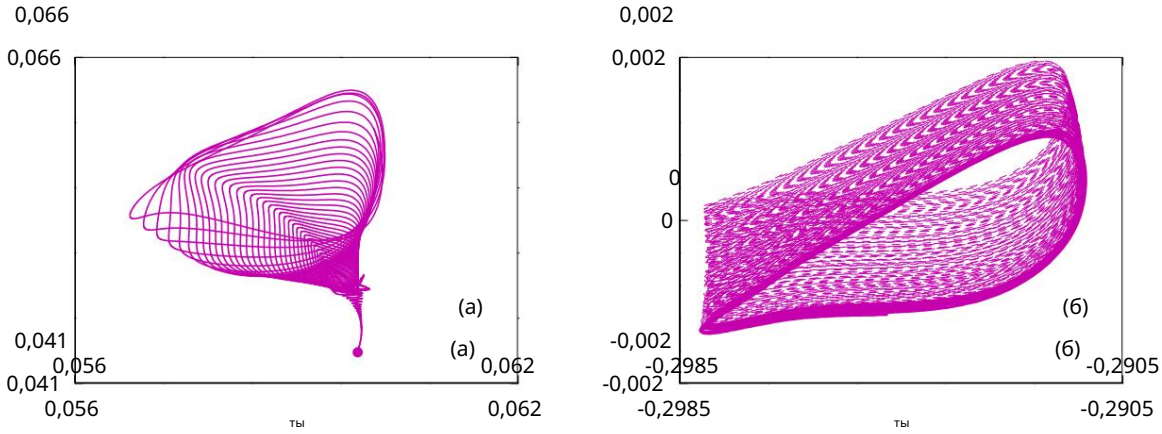


Рис. 16. Предельная точка и предельный цикл для (а) Ra = , а для (б) Ra = 5 × 107 на плоскости u-θ 107 в точке P1 (0, 0,825).

5.3.2. Хаотичный

На рисунке 17a показано, что две ячейки в верхней правой части самой большой ячейки становятся больше именно по мере увеличения числа Рэлея. Самая большая ячейка в центре также перемещается как по правой, так и по левой стороне, когда Ra = , как показано на рисунке 17b. 108. Нестационарное течение становится все более сложным, что известно как хаотическое.

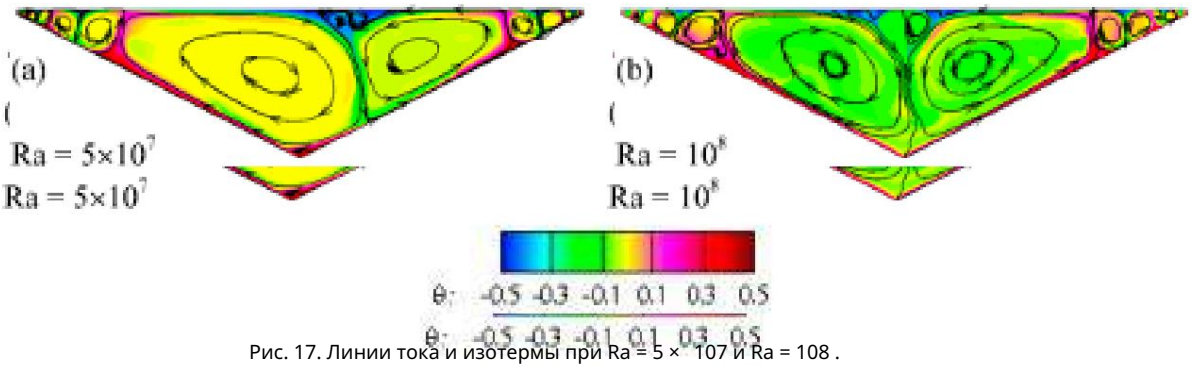


Рис. 17. Линии тока и изотермы при Ra = 5 × 107 и Ra = 108 .

На рис. 18 показаны траектории через пространство стадий в плоскости u-θ в точке P5 (0,5, 0,255) для Ra = 5 × 107 и 108 , чтобы более наглядно проиллюстрировать, как периодическое состояние переходит в хаотическое состояние. Наблюдаемый предельный цикл, изображенный на рисунке 18a, демонстрирует периодический характер нестационарного течения при числе Рэлея Ra = 5 × 107 . Этот вывод согласуется с информацией, представленной на рисунке 16 , и дополнительно подтверждает существование предельного цикла. На рисунке 18б траектория для Ra = 108 показывает, что периодическое течение меняется на хаотическое, что имеет место между Ra = 5 × 107 и 108 . Подробное объяснение траекторий в стадийном пространстве см. в [66].

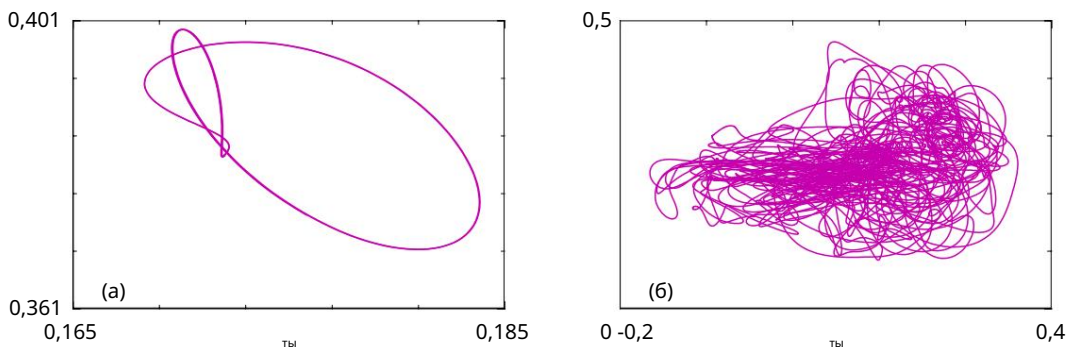


Рис. 18. Траектории температуры и скорости x в пространстве стадий для значений Ra = 5 × 107 и Ra = 108 в точке P5 (0,5, 0,255).

Machine Translated by Google

5.4. Температура и скорость

На рисунке 19 показаны изменения температуры и скорости в обозначенных точках P1 (0, 0,825) во времени при различных числах Рэлея. Эта информация предоставлена, чтобы помочь понять формирование естественных конвекционных режимов течения внутри полости в ответ на внезапный нагрев от наклонных стенок и охлаждение от верхней стенки. Моделирование проводилось с использованием различных чисел Рэлея в диапазоне от Ra = 10 до 10 . Было отмечено наблюдение о различных изменяющихся свойствах потока в диапазоне чисел Рэлея. На рисунках 5, 6, 9 и 12 изображены изотермы и соответствующие линии тока для различных чисел Рэлея, при этом особое внимание уделяется случаю, когда A = 0,5. Наблюдаемые численные результаты для различных значений Ra, как показано на рисунке 19, демонстрируют заметные изменения. При наименьшем числе Рэлея впервые могут наблюдаться неустойчивости конвективного потока.

Однако число волн и нестационарность возрастают с увеличением чисел Рэлея. Учитывая симметрию и непрерывность течения, ожидается, что при Ra = 103 течение будет слабее и будет проявлять симметричное поведение . На переходной стадии течения жидкости наблюдается асимметричное развитие течения при числах Рэлея Ra = 104 и 106 . Однако по мере продвижения потока к полностью развитой стадии он стабилизируется. Наконец, поток переходит в периодическое и хаотическое состояния при Ra = 107 и Ra = 108 , соответственно, как показано на рисунке 19a. Как показано на рисунке 19b, аналогичную характеристику можно также увидеть в скорости x в точке P1.

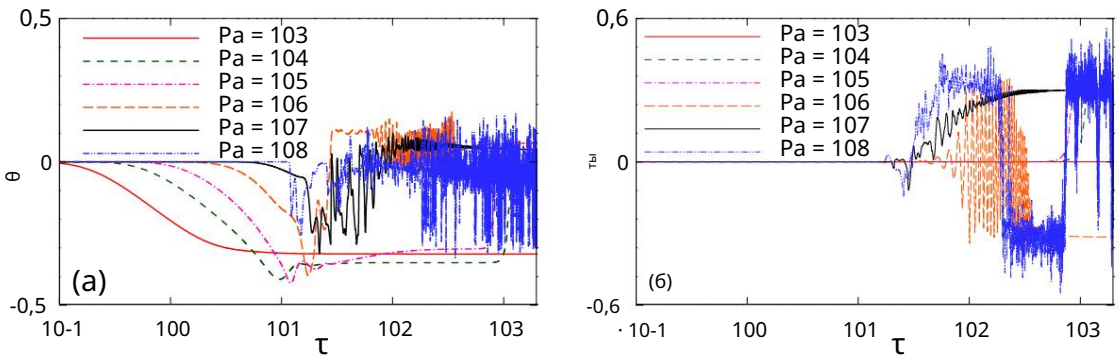


Рис. 19. (а) Временные ряды температуры и (б) временные ряды скорости x для различных чисел Рэлея в точке P1 (0, 0,825).

5.5. Теплообмен. На

переходном этапе в V-образной полости преобладает конвективный теплообмен. Конвективный теплообмен усиливается за счет нерегулярных колебаний и вихрей, которые способствуют перемешиванию жидкостей. Для воздуха исследуется число Нуссельта, которое выражает соотношение конвективной и кондуктивной теплопередачи. Число Нуссельта Nu [60–62] определяется как:

$$\text{Ню} = \frac{1}{\text{Ин}} \int_{\text{Ин}} \frac{\theta}{n} \text{ дс.} \quad (11)$$

В соответствии с рисунком 20a представлен временной ряд, иллюстрирующий среднее число Нуссельта, связанное с наклонной стенкой. Это конкретное измерение было использовано для количественной оценки степени теплопередачи, происходящей через стенку полости. Важно подчеркнуть, что на рисунке 20b дополнительно представлено представление Nu после нормализации Ra1/4. Наличие значительной разницы температур между жидкостью и стенкой может способствовать существенному явлению теплопередачи. Следовательно, ожидается, что будет наблюдаться большое значение числа Нуссельта (Nu). Наблюдаемое явление можно объяснить одновременным нагревом и охлаждением как наклонных стенок, так и верхней стены. Рисунок 20b иллюстрирует, как с течением времени на начальной стадии Nu резко уменьшается, а на протяжении полностью развитой стадии оно постепенно достигает значения, которое является либо постоянным, либо колебательным, и это значение определяется числом Рэлея. Этот

Machine Translated by Google

аналогично числам на рисунке 13, где число Нуссельта колеблется при Ra 5 × 107 , но остается постоянным при Ra = 107 . В отличие от кривых на рисунке 20a, очевидно, что кривые Nu и кривые на рисунке 20b схлопываются вместе. В результате масштабирование Nu~Ra1/4 работает эффективно с учетом текущего набора значений Ra. Рисунок 20б демонстрирует, что NuRa-1/4 практически сохраняет постоянное значение 1,473 при увеличении числа Рэлея, хотя и несколько уменьшается.

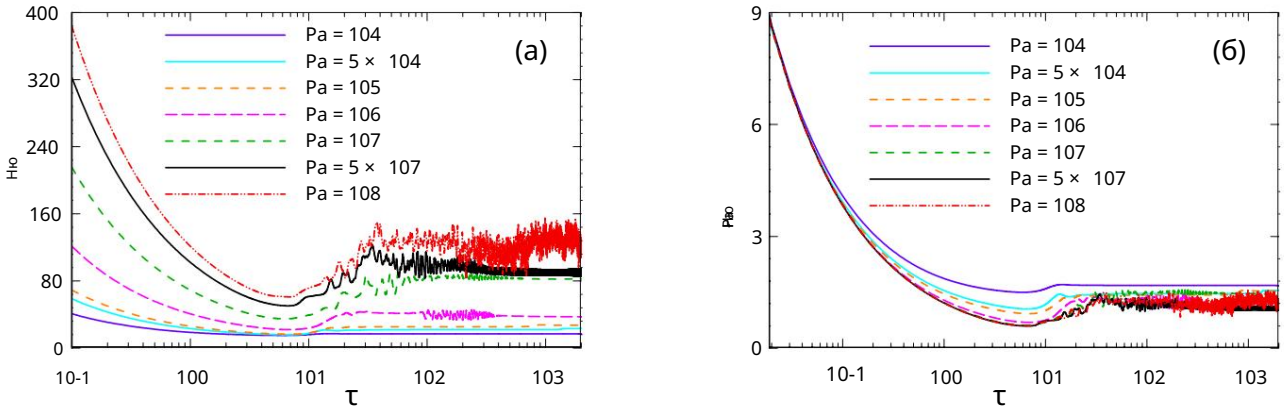


Рис. 20. (а) Число Нуссельта и (б) нормализованный временной ряд чисел Нуссельта для нескольких видов чисел Рэлея.

6. Выводы

Настоящее исследование посвящено численному исследованию нестационарных двумерных течений естественной конвекции внутри полости в форме долины, заполненной водой, где нагрев происходит вдоль наклонных стенок, а охлаждение облегчается через верхнюю стенку. Исследование охватывает широкий спектр чисел Рэлея в диапазоне от Ra = 100 до 108 при числе Прандтля Pr = 0,71 и соотношении сторон A = 0,5, охватывающем различные безразмерные времена от τ = 0 до τ = 5000. Исследование описывает разнообразные структуры потока, развивающиеся внутри полости с течением времени, и изучает взаимосвязь между динамикой теплопередачи и числами Рэлея.

Анализ показывает, что развитие естественных конвекционных потоков проявляется в трех различных стадиях: начальной стадии, переходной стадии и полностью развитой стадии, следующей за внезапным применением нагрева через наклонные стены и охлаждением через верхнюю стену. В этом исследовании рассматриваются симметричные, асимметричные и нестационарные модели течения, характеризующие эти стадии, что подтверждается численными результатами. В частности, исследование в первую очередь направлено на выяснение механизмов течения на всех этапах. Замечено , что естественные конвекционные потоки остаются устойчивыми в симметричном состоянии для чисел Рэлея в диапазоне от Ra = 100 до 7 × 103 . За пределами Ra > 7 × 103 потоки проявляют асимметрию. Кроме того, в асимметричном состоянии течение на переходной стадии переходит в нестационарный режим, а затем стабилизируется на полностью развитой стадии при 7 · 103 < Ra В этом исследовании подчеркивается, что периодические нестационарные потоки переходят в хаотические состояния на переходной стадии, возвращаясь к периодическому поведению на развитой стадии при Ra = 5 × 107 , , тогда как при более высоких числах Рэлея, таких как Ra = 108, , хаотический поток остается преобладающим в возникает нестационарный режим.

Кроме того, в исследовании обсуждаются заметные бифуркации, наблюдаемые в полностью развитых государствах. Приведен подробный анализ, включая спектральную плотность мощности и траектории в пространстве сцены для Pr = 0,71. Численные исследования проясняют тонкости теплопередачи и демонстрируют влияние числа Рэлея как на число Нуссельта, так и на динамику расхода.

Machine Translated by Google

Вклад автора: концептуализация, SB и SCS; расследование, ЛРР; методология, ЛРР; администрирование проекта, СКС; программное обеспечение, ЛРР; надзор, СБ и СКС; валидация, LRR; письменность — первоначальный вариант, СБ и ЛРР; написание — рецензирование и редактирование, FX и SCS. Все авторы имеют прочитал и согласился с опубликованной версией рукописи.

Финансирование: Данное исследование не получило внешнего финансирования.

Заявление о доступности данных: В этом исследовании данные не используются. Использование искусственного интеллекта: во время при подготовке этой работы мы использовали ChatGPT, чтобы улучшить язык и читабельность.

Конфликты интересов: Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Номенклатура

к температуропроводность
τ безразмерное время
τ безразмерный шаг по времени
безразмерная температура
ν кинематическая вязкость
ρ Плотность
β коэффициент теплового расширения
Соотношение сторон
г гравитационное ускорение
Номер гр Грасхофа
л половина длины полости
Н высота полости
k теплопроводность
л длина наклонной стены
н безразмерная координата, нормальная к наклонной стене
Ин безразмерная длина наклонной стены
Число Ню Нуссельта
П Давление
п безразмерное давление
Пр Число Прандтля
Число Ра Рэлея
Критическое число Рэлея Rac для нарушения симметричного состояния
Т размерная температура
Т0 начальная температура
Тс температура холодной верхней стенки
че температура горячей наклонной стены
т Время
Разница температур T
Компоненты скорости U, V
u, v безразмерные компоненты скорости
Координаты X, Y по горизонтали и вертикали
x, y безразмерные координаты по горизонтали и вертикали

Ссылки

1. Гилл, Э. Режим пограничного слоя для конвекции в прямоугольной полости. Дж. Гидромеханика. 1966, 26, 515–536. [Перекрестная ссылка]
2. Прандтль, Л. Основы гидродинамики; Блэки: Лондон, Великобритания, 1952 год; стр. 422–425.
3. Рави, МРР; Хенкес, RAWM; Хугендорн, К.Дж. О структуре устойчивой ламинарной естественной конвекции с высоким числом Рэлея поток в квадратном корпусе. Дж. Гидромеханика. 1994, 262, 325–351. [Перекрестная ссылка]
4. Сюй, Ф.; Паттерсон, Дж. К.; Лей, К. Экспериментальное исследование нестационарного теплового потока вокруг тонкого ребра на боковой стенке дифференциального нагретая полость. Межд. J. Поток тепловой жидкости 2008, 29, 1139–1153. [Перекрестная ссылка]
5. Кюи, Х.; Сюй, Ф.; Саха С.С. Переход к нестационарному естественному конвекционному течению в призматической оболочке треугольного сечения. Межд. Дж. Терм. наук. 2017, 111, 330–339. [Перекрестная ссылка]
6. Саха, Южная Каролина; Хан, ММК Обзор естественной конвекции и теплообмена в чердачных помещениях. Энергетическая постройка. 2011, 43, 2564–2571. [Перекрестная ссылка]
7. Кюи, Х.; Ан, Х.; Ван, В.; Хан, З.; Центр.; Сюй, Ф.; Лю, К.; Саха, С.С. Численное исследование смешанной конвекции и теплопередачи в Дугообразная полость с внутренними источниками тепла. Прил. наук. 2023, 13, 1029. [CrossRef]

Machine Translated by Google

8. Чухан И.С.; Ли, Дж.; Го, З.; Якуб, М.; Манан, Массачусетс Исследование теплопередачи в корпусе плюсовой формы с использованием степенного закона Жидкость: подход конечных элементов. Прил. наук. 2023, 13, 11042. [CrossRef]

9. Саранги А.; Саранги, А.; Саху, СС; Маллик, РК; Авад, М.М. Анализ сопряженного излучения и конвекционной теплопередачи в Полость солнечной плиты с использованием вычислительного подхода. Энергии 2023, 16, 3868. [CrossRef]

10. Гебхарт, Б.; Джалурия, Ю.; Махаджан, РЛ; Саммакия, Б. Потоки и перенос, вызванные плавучестью; Полушарие: Вашингтон, округ Колумбия, США, 1988.

11. Манневиль, П. Конвекция Рэлея-Бенара , тридцать лет экспериментальных, теоретических и модельных работ, Динамика пространственно- временных клеточных структур. В динамике пространственно-временных клеточных структур: обзор столетия Анри Бенара; Спрингер: Нью-Йорк, штат Нью-Йорк, США, 2006 г.; Том 207, стр. 41–65.

12. Боденшац, Э.; Пеш, В.; Алерс, Г. Последние разработки в области конвекции Рэлея Бенара. Анну. Преподобный Fluid Mech. 2000, 32, 709–778. [Перекрестная ссылка]

13. Воробей, Э.М.; Гусар Р.Б. Продольные вихри в естественном конвективном течении на наклонных пластинах. Дж. Гидромеханика. 1969, 37, 251–255. [Перекрестная ссылка]

14. Бэтчелор Г.К. Теплопередача путем свободной конвекции через замкнутую полость между вертикальными границами при различных температурах. В. Прил. Математика. 1954, 12, 209–233. [Перекрестная ссылка]

15. Эккерт, ERG; Карлсон, В.О. Естественная конвекция в слое воздуха, заключенном между двумя вертикальными пластинами при разных температурах. Межд. J. Тепломассообмен. 1961, 2, 106–120. [Перекрестная ссылка]

16. Элдер Дж. У. Ламинарная свободная конвекция в вертикальной щели. Дж. Гидромеханика. 1965, 23, 77–98. [Перекрестная ссылка]

17. Сюй, Ф.; Паттерсон, Дж. К.; Лей, К. Экспериментальное исследование связанных тепловых пограничных слоев, прилегающих к перегородке в дифференциально обогреваемая полость. Эксп. Терм. Наука о жидкости. 2014, 54, 12–21. [Перекрестная ссылка]

18. Сюй, Ф.; Паттерсон, Дж. К.; Лей, К. Переходная естественная конвекция обтекает тонкое ребро на боковой стенке полости с дифференциальным нагревом. Дж. Гидромеханика. 2009, 639, 261–290. [Перекрестная ссылка]

19. Паттерсон, Дж. К.; Имбергер, Дж. Нестационарная естественная конвекция в прямоугольной полости. Дж. Гидромеханика. 1980, 100, 65–86. [Перекрестная ссылка]

20. Паттерсон, Дж. К.; Армфилд, С.В. Переходные особенности естественной конвекции в полости. Дж. Гидромеханика. 1990, 219, 469–497. [Перекрестная ссылка]

21. Де, А.К.; Эсваран, В.; Мишра, П.К. Масштабирование теплопереноса и энергетических спектров турбулентной конвекции Рэлея-Бенара в коробка с большим соотношением сторон. Межд. J. Поток теплоносителя 2017, 67, 111–124. [Перекрестная ссылка]

22. Рахаман, ММ; Бхоумик, С.; Мондал, РН; Саха, Южная Каролина Нестационарная естественная конвекция в первоначально стратифицированной трапециевидной форме, заполненной воздухом. Корпус с подогревом снизу. Процессы 2022, 10, 1383. [CrossRef]

23. Рахаман, ММ; Бхоумик, С.; Мондал, РН; Саха, С.К. Численное исследование хаотического потока и теплопередачи внутри трапециевидной полости. Энергии 2023, 16, 5031. [CrossRef]

24. Принсевац, М.; Фернандо, HJS Утренний выход из холодных луж на сложной местности. Дж. Гидромеханика. 2008, 616, 99–109. [Перекрестная ссылка]

25. Асан, Х.; Намли, Л. Ламинарная естественная конвекция в скатной крыше треугольного сечения: граничные условия летнего дня. Энергетическая постройка. 2000, 33, 69–73. [Перекрестная ссылка]

26. Асан, Х.; Намли, Л. Численное моделирование плавучего течения в крыше треугольного сечения в граничных условиях зимнего дня. Энергетическая постройка. 2001, 33, 753–757. [Перекрестная ссылка]

27. Салмун, Х. Модели конвекции в треугольной области. Межд. J. Тепломассообмен. 1995, 38, 351–362. [Перекрестная ссылка]

28. Салмун, Х. Устойчивость одноячеечного стационарного раствора в треугольном корпусе. Межд. J. Тепломассообмен. 1995, 18, 363–369. [Перекрестная ссылка]

29. Пуликакос, Д.; Бежан А. Гидродинамика чердачного помещения. Дж. Гидромеханика. 1983, 131, 251–269. [Перекрестная ссылка]

30. Пуликакос, Д.; Бежан, А. Эксперименты с естественной конвекцией в треугольном помещении. Дж. Теплопередача. 1983, 105, 652–655. [Перекрестная ссылка]

31. Флэк Р.Д. Экспериментальное измерение естественной конвекции теплопередачи в треугольных помещениях, нагреваемых или охлаждаемых ниже. Дж. Теплопередача. 1980, 102, 770–772. [Перекрестная ссылка]

32. Хольцман, Г.А.; Хилл, RW; Болл, К.С. Ламинарная естественная конвекция в равнобедренных треугольных камерах, обогреваемых снизу и симметрично охлаждается сверху. Дж. Теплопередача. 2000, 122, 485–491. [Перекрестная ссылка]

33. Лей, К.; Армфилд, Юго-Запад; Паттерсон, Дж. К. Нестационарная естественная конвекция в заполненном водой равнобедренном треугольном помещении, нагреваемом снизу . Межд. J. Тепломассообмен. 2008, 51, 2637–2650. [Перекрестная ссылка]

34. Саха, Южная Каролина; Лей, К.; Паттерсон, Дж. К. Естественная конвекция в треугольном помещении, подверженном периодическому тепловому воздействию. В материалах 13-й Международной конференции по теплопередаче, Сидней, Австралия, 13–18 августа 2006 г.

35. Саха, Южная Каролина; Лей, К.; Паттерсон, Дж. К. Влияние соотношения сторон на естественную конвекцию на чердаках, подвергающихся периодическому тепловому воздействию. Анзиам Дж. 2007, 48, C618–C632. [Перекрестная ссылка]

36. Саха, Южная Каролина; Паттерсон, Дж. К.; Лей, К. Естественная конвекция в чердачных помещениях, подверженных внезапным и плавным граничным условиям нагрева. Тепломассообмен. 2010, 46, 621–638. [Перекрестная ссылка]

37. Саха, Южная Каролина; Паттерсон, Дж. К.; Лей, К. Естественная конвекция на чердаках с учетом граничных условий мгновенного и линейного охлаждения. Энергетическая постройка. 2010, 42, 1192–1204. [Перекрестная ссылка]

38. Саха, Южная Каролина; Паттерсон, Дж. К.; Лей, К. Естественная конвекция и теплообмен на чердаках, подверженных периодическому тепловому воздействию. Интернационал Дж. Терм. наук. 2010, 49, 1899–1910. [Перекрестная ссылка]

39. Лей, К.; Паттерсон, Дж. К. Естественная конвекция в резервуаре, подверженном солнечному излучению: Экспериментальные наблюдения. Эксп. Жидкости 2002, 32, 590–599. [Перекрестная ссылка]

Machine Translated by Google

40. Лей, К.; Паттерсон, Дж. К. Нестационарная естественная конвекция в треугольном помещении, вызванная поглощением радиации. Дж. Гидромеханика. 2002, 460, 181–209. [Перекрестная ссылка]
41. Лей, К.; Паттерсон, Дж. К. Естественная конвекция в резервуаре, подверженном солнечному излучению: двумерное моделирование. Число. Теплопередача. 2002, 42, 13–32. [Перекрестная ссылка]
42. Мао Ю.; Лей, К.; Паттерсон, Дж. К. Нестационарная естественная конвекция в треугольном помещении, вызванная поглощением радиации – новый взгляд на улучшенный масштабный анализ. Дж. Гидромеханика. 2009, 622, 75–102. [Перекрестная ссылка]
43. Мао Ю.; Лей, К.; Паттерсон, Дж. К. Нестационарная прибрежная естественная конвекция, вызванная охлаждением поверхности. Дж. Гидромеханика. 2010, 642, 213–233. [Перекрестная ссылка]
44. Мао Ю.; Лей, К.; Паттерсон, Дж. К. Характеристики нестабильности радиационно-индуцированной естественной конвекции в мелководных прибрежных водах. Межд. Дж. Терм. наук. 2010, 49, 170–181. [Перекрестная ссылка]
45. Беднарц, Т.П.; Лей, К.; Паттерсон, Дж. К. Численное исследование нестационарной естественной конвекции, вызванной охлаждением поверхности изопотоком в модель резервуара. Межд. J. Тепломассообмен. 2009, 52, 56–66. [Перекрестная ссылка]
46. Уайтман, К.Д. Разрушение температурных инверсий в глубоких горных долинах: Часть I. Наблюдения. Дж. Прил. Метеорол. 1982, 21, 270–289. [Перекрестная ссылка]
47. Роуч, WT; Браун, Р.; Коги, С.Дж.; Гарланд, Дж. Физика радиационного тумана: Часть I: Полевое исследование. QJR Метеорол. Соц. 1976, 102, 313–333.
48. Пилие, Р.Дж.; Мак, Э.Дж.; Кокмонд, WC; Роджерс, CW; Иди, У. Дж. Жизненный цикл долинного тумана. Часть I: Микрометеорологические характеристики. Дж. Прил. Метеорол. 1975, 14, 347–363. [Перекрестная ссылка]
49. Фаззи, С.; Факкини, МС Эксперимент с туманом в долине реки По, 1989 год, обзор. Теллус 1992, 44Б, 448–468. [Перекрестная ссылка]
50. Джиусто, Дж. Э.; Лала Гризер, Последние исследования полевых программ JGG по радиационному туману; Номер публикации. 869; Центр исследований атмосферы , Государственный университет Нью-Йорка (ASRC, SUNY): Нью-Йорк, штат Нью-Йорк, США, 1983.
51. Цзихуа, Л.; Лимин З.; Цинхун, З. Физическая структура зимнего тумана в мегаполисе Чунцин и его формирование. процесс. Акта Метеорол. Грех. 1994, 8, 316–328.
52. Хайден, Т.; Уайтман, К.Д. Механизмы стокового течения на пологом склоне. Дж. Прил. Метеорол. 2005, 44, 113–126. [Перекрестная ссылка]
53. Каталано, Ф.; Сенедез, А. Численное моделирование термических склоновых ветров в долине с сильным перекрытием с высоким разрешением. Являюсь. Метеорол. Соц. 2010, 49, 1859–1880. [Перекрестная ссылка]
54. Кларк, Пенсильвания; Хопвуд, В.П. Одномерное прогнозирование радиационного тумана для конкретного участка. Часть 1: Формулировка модели и идеализированные исследования чувствительности. Метеорол. Прил. 2001, 8, 279–286. [Перекрестная ссылка]
55. Баумбах, Г.; Фогт, У. Экспериментальное определение влияния горно-долинной бризовой циркуляции на загрязнение воздуха в окрестности Фрайбурга. Атмосфера. Окружающая среда. 1999, 33, 4019–4027. [Перекрестная ссылка]
56. Ленер, М.; Гом, А. Идеализированное моделирование переноса загрязнений в дневное время в крутой долине и его чувствительность к тепловым воздействиям. стратификация и альбедо поверхности. Связанный.-Слой Метеорола. 2010, 134, 327–351. [Перекрестная ссылка]
57. Лю, Х.; Лян, Б.; Чжу, Ф.; Чжан, Б.; Санг, Дж. Эксперимент с резервуаром для воды по тепловой циркуляции, вызванной нагревом дна в асимметричная долина. Адв. Атмосфера. наук. 2004, 21, 536–546. [Перекрестная ссылка]
58. Кенхерес, С. Повышение теплопередачи, вызванное наклоном стенок при турбулентной тепловой конвекции. Физ. Ред. Е 2015, 92, 053006. [Перекрестная ссылка]
59. Кимура, Ф.; Ногучи, Т.; Китамура, К. Течение жидкости и теплообмен в результате естественной конвекции вокруг нагретой V-образной полости. Мех. англ. Ж. 2016, 3, 16–00330. [Перекрестная ссылка]
60. Бхоумик, С.; Саха, Южная Каролина; Цяо, М.; Сюй Ф. Переход к хаотическому течению в V-образной треугольной полости, нагреваемой снизу. Межд. Дж. Тепломассообмен. 2019, 128, 76–86. [Перекрестная ссылка]
61. Бхоумик, С.; Сюй, Ф.; Молла, ММ; Саха, С.С. Хаотические явления естественной конвекции воды в V-образном корпусе. Межд. Дж. Терм. наук. 2022, 176, 107526. [CrossRef]
62. Бхоумик, С.; Сюй, Ф.; Чжан, Х.; Саха, С.С. Естественная конвекция и теплообмен в долинной полости, заполненной первоначально стратифицированной водой. Межд. Дж. Терм. наук. 2018, 128, 59–69. [Перекрестная ссылка]
63. Патанкар С.В. Численная теплопередача и поток жидкости; Издательская корпорация Hemisphere: Нью-Йорк, штат Нью-Йорк, США, 1980 г.
64. Саха С.С. Естественная конвекция рядом с наклонной плоской пластиной и в чердачном помещении при различных условиях термического воздействия. доктор философии Диссертация, Школа инженерных и физических наук, Таунсвилл, Австралия, 2009 г.
65. Дразин П.Г. Введение в гидродинамическую устойчивость; Издательство Кембриджского университета: Кембридж, Великобритания, 2002.
66. Маклафлин, Дж.Б.; Орзаг С.А. Переход от периодической к хаотичной тепловой конвекции. Дж. Гидромеханика. 1982, 122, 123–142. [Перекрестная ссылка]

Отказ от ответственности/Примечание издателя: Заявления, мнения и данные, содержащиеся во всех публикациях, принадлежат исключительно отдельному автору(ам) и соавторам(ам), а не MDPI и/или редактору(ам). MDPI и/или редактор(ы) не несут ответственности за любой вред людям или имуществу, возникший в результате любых идей, методов, инструкций или продуктов, упомянутых в контенте.

Machine Translated by Google

вычисление

MDPI

Статья

Моделирование свойств магнитострикционных элементов с использованием Квантовые эмуляторы

Эдвард Карпухин [1], Алексей Бормотов [1,*] и Луиза Манукян [2]

[1] Факультет промышленных технологий Пензенского государственного технологического университета, просп. Байдукова/ул. Гагарина, 1а, 11, 440039 Пенза, Россия;

[2] edvar1@rambler.ru Институт аэрокосмической техники Самарского национального исследовательского университета, ул. Московское шоссе, 34, 443086 Самара,

Россия; lu-iza03@mail.ru * Адрес для переписки: aleks21618@yandex.ru

Аннотация: В статье рассматриваются математические и численные методы моделирования магнитострикционных многоэлектронных систем, основанные на сочетании квантовых и классических методов. Обоснована разработка алгоритма, пригодного для исследования магнитострикционных явлений на микроуровне с использованием классико-квантового метода, реализованного на современном классическом компьютере. Приведены алгоритмы и структура программного комплекса. Адекватность квантово-классического метода проверена путем сравнения результатов расчета свойств известных магнитострикционных материалов с реальными свойствами магнитострикционных сплавов.

Ключевые слова: квантово-классические численные методы; исследование магнитострикционных явлений на микроуровне

1. Введение

При моделировании магнитострикционных явлений на микроуровне возникает задача решения уравнения Шрёдингера (УШ). В настоящее время известно множество численных методов ее решения [1–10]. В зависимости от типа компьютера, предназначенного для их реализации, все эти методы можно разделить на классические и квантовые. Классические методы предназначены для реализации на классических компьютерах и основаны на классическом подходе к численному решению дифференциальных уравнений. Они позволяют эффективно решать широкий круг задач в приемлемые сроки и с достаточно высокой точностью. Однако во многих случаях, например, при моделировании многоатомных систем, использование такого подхода приводит либо к чрезмерно большой ошибке, либо к экспоненциальному увеличению времени решения, недопустимому при современной мощности классических компьютеров [11–19]. В научных работах [20–27] предлагаются модификации классических методов, позволяющие существенно повысить точность и сократить время вычислений, но тем не менее эта проблема остается актуальной.

Еще одним принципиально новым и активно развивающимся способом численного решения УЭ является использование квантовых методов [11,12,28–31]. Такие методы основаны на алгоритмах, предназначенных для выполнения квантовыми компьютерами, которые, как известно [23,32–36], более эффективны для решения подобных задач. Основной проблемой использования квантовых вычислений является недостаточный уровень современного технологического развития в этом направлении: отсутствие доступных полнофункциональных квантовых компьютеров, а также малое количество известных эффективных квантовых алгоритмов и научных работ в этом направлении. Однако существующие эмуляторы квантовых компьютеров позволяют разработать и апробировать новые квантово-численные методы решения частных задач моделирования многоатомных систем и обосновать теоретическую возможность использования этих методов в общем случае в будущем, когда появятся полноценные квантовые компьютеры. [37–41].

Также возможно применить комбинированный подход к моделированию квантовых систем квантово-классическими методами, используя ресурсы обычных компьютеров и квантовых эмуляторов. Разработаны алгоритмы квантово-классических численных методов (ККММ).

check for updates

Цитирование: Карпухин Е.; Бормотов А.; Манукян Л. Моделирование свойств магнитострикционных элементов с помощью квантовых эмуляторов. Вычисление 2024, 12, 147. https://doi.org/10.3390/computation12070147 .

Академический редактор: Рафаэль Лаос-Бельтра

Поступила: 7 мая 2024 г.
Пересмотрено: 24 июня 2024 г.
Принято: 26 июня 2024 г.
Опубликовано: 15 июля 2024 г.

Копирайт: © 2024 авторов. Лицензиат MDPI, Базель, Швейцария.
Эта статья находится в открытом доступе. распространяется на условиях и условия Creative Commons Лицензия с указанием авторства (CC BY) (https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

Machine Translated by Google

выполняться на классическом компьютере в программной среде, оснащенной классическим вычислительным модулем и модулем эмуляции квантовых вычислений, с возможностью обмена данными между ними (рис. 1).

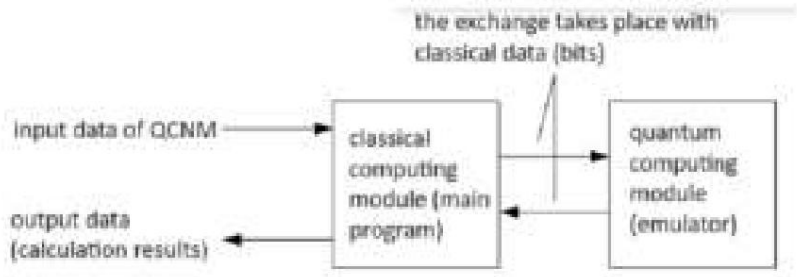


Рис. 1. Упрощенная структура программного комплекса для реализации QCNM.

Этот метод моделирования позволит использовать наиболее полезные свойства квантовые алгоритмы для ускорения работы и повышения эффективности классических.

Основной задачей, рассматриваемой в данной статье, является разработка алгоритма QCNM, пригодного для исследования магнитострикционных явлений путем их математического моделирования на микроуровне с использованием классического компьютера. При этом следует учитывать, что возможности классического компьютера по реализации эмуляторов квантовых вычислений в настоящее время сильно ограничены объёмом квантовой памяти, который составляет максимум около 400 кубитов (при использовании облачных технологий). .

Предложенный алгоритм QCNM реализован в составе программного комплекса (рис. 1), и с его помощью проведено исследование магнитострикционных явлений в сплавах Гейслера Ni-Mn-Ga [42–47].

2. Материалы и методы.

Атомы с N электронами отличаются от атома водорода и водородоподобных систем. Во-первых, гамильтониан учитывает вклады в кинетическую и потенциальную энергию всех N электронов, и в потенциальной энергии возникает слагаемое, описывающее межэлектронное взаимодействие . Во-вторых, волновая функция должна подчиняться принципу Паули — она должна быть антисимметричной при перестановке координат любой пары электронов.

Это приводит к тому, что решение уравнения Шредингера для многоэлектронных атомов существенно усложняется. Его невозможно получить аналитически и требуются приближенные методы численного решения [13,20,48,49].

Однако качественно свойства многоэлектронных систем можно описать достаточно просто, если воспользоваться тем, что для атома должны выполняться определенные соотношения, связанные с угловым моментом.

1. Каждое состояние атома должно иметь определенное значение полного момента импульса.
2. Суммарный момент всех электронов в атоме должен подчиняться правилам квантования и пространственное квантование.
3. Поскольку спин электронов является также моментом количества движения, он также должен вносить вклад полному моменту атома.
4. Моменты и спины отдельных электронов должны быть объединены так, чтобы суммарный момент оставался наблюдаемой величиной и подчинялся постулатам и уравнениям квантовой механики.

Полный момент связан с моментами отдельных электронов, но поскольку момент каждого электрона неоднозначно ориентирован в пространстве (пространственное квантование не позволяет однозначно определить все проекции вектора), то полный момент, согласно принципу суперпозиции , может стать комбинацией любых возможных ориентаций векторов отдельных моментов. Эти принципы были использованы при моделировании многоэлектронных сплавов Гейслера типа Ni-Mn-Ga .

Machine Translated by Google

Рассмотрим уравнение времени Шрёдингера:

$$\hat{H}\Psi = \left[\frac{-\hbar^2}{2м}\nabla^2 + U(r,t)\right]\Psi(r,t) = j\hbar\frac{\partial\Psi(r,t)}{\partial t}, \quad (1)$$

где $\hat{H}$ — гамильтониан; $\Psi(r,t)$, $U(r,t)$ — волновая функция и потенциальная энергия частицы, находящейся в точке пространства с координатами (x, y, z) и радиусом-вектором $r = xi + yj + zk$ в момент времени t; $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ — оператор Лапласа; m – масса частицы; $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ — приведенная постоянная Планка.

Решение уравнения (1) на квантовом компьютере можно осуществить методом Залки– Визнера [15], который применим, в том числе и для многоатомных систем. Общая схема численного решения УЭ этим методом такова: 1. Запишите формально точное решение УЭ (1) Ψ в виде вектора $|\psi(t)\rangle$:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-j\hat{H}t}|\psi(0)\rangle. \quad (2)$$

2. Установите начальное состояние $|\psi(0)\rangle$, момент времени tf или что-то другое, что требуется для определения решения и шага дискретизации Δt, так что $i\Delta t = tf$ для некоторого целого числа i. Принять $|\psi_0\rangle = |\psi(0)\rangle$, $i = 0$.
3. Построить квантовую схему $U\Delta t$ в виде:

$$U\Delta t = IQFT\exp\left(-j\frac{\hat{P}^2}{2m\hbar}\Delta t\right)QFT\exp\left(-j\frac{V(r)}{\hbar}\Delta t\right), \quad (3)$$

где V(r) – потенциальная энергия системы квантовых частиц, а QFT,IQFT – прямое и обратное квантовое преобразование Фурье.

4. Начало итерационного процесса.
5. За одну итерацию вычисляется значение $|\psi_{i+1}\rangle = U\Delta t|\psi_i\rangle$, и счетчик i увеличено на единицу.
6. Итерационный процесс останавливается при выполнении условия $i\Delta t \geq tf$. Результат возвращается к $\psi_{tf} = |\psi_i\rangle$.

Этот алгоритм выполняется на квантовом компьютере за полиномиальное время, является наиболее универсальным и подходит для моделирования широкого спектра квантовых систем, включая магнитострикционные явления. Результат получен с погрешностью, значение которой можно получить из оценки:

$$\left\|e^{-j\hat{H}t_f}\psi(0)\right\rangle - \psi_{tf}\right\|^2 \leq \varepsilon. \quad (4)$$

Метод Залка–Веснера без модификаций можно реализовать на классическом компьютере с помощью пакета программ, представленного на рисунке 1, но он пригоден только для моделирования квантовой системы с малым числом частиц. Для повышения его эффективности предлагается использовать ККНМ на основе преобразования Троттера–Сузуки [24,50–52], которое можно выразить следующими рекуррентными формулами:

$$U2k(t) = [U2k(sk\,t)]^2 U2k(1-4sk)t)[U2k(sk\,t)]^2 = e^{-j\hat{H}t} + O\left(\Delta t^{2k+1}\right), \; sk = (4 - 4^{1/(2k-1)})^{-1}. \quad (5)$$

Использование этого преобразования позволяет повысить точность аппроксимации, используя те же вычислительные ресурсы. Эффективность метода Троттера–Сузуки можно наглядно и упрощенно продемонстрировать с помощью иллюстрации на рисунке 2. Если условно предположить, что квантовый алгоритм должен перейти из состояния 1 в состояние 2, а длины сторон треугольника A, B , U2k(t) – общий объем вычислительных

Machine Translated by Google

источников, необходимых для этого перехода, то кратчайший путь — это U2k(t), который представляет собой преобразование Троттера–Сузуки порядка 2k.

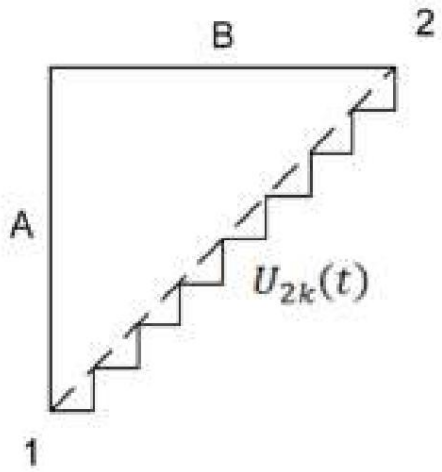


Рис. 2. Принцип действия преобразования Троттера–Сузуки.

Важным моментом реализации предложенного ККМ является использование квантового преобразования Фурье (КТП). Особенность КТП по сравнению с обычным преобразованием Фурье состоит в том, что оно не ускоряет само преобразование, но позволяет более эффективно осуществлять поиск начальных приближений собственных значений унитарных операторов, необходимых для других численных методов.

В ортонормированном базисе | 0 , . . . | N 1 Q QFT – линейный оператор, действующий следующим образом [14]:

$$| x \rangle \rightarrow \frac{1}{\sqrt{H}} \sum_{k=0}^{H-1} e^{2\pi i j k x / N} | k \rangle . \quad (6)$$

Или если вы принимаете N = 2 н, где n — целое число и представляет состояние | x как двоичное число x = x1x2 . . . xn, (6), то можно переписать его в более удобном для практических целей виде:

$$| x \rangle = | x_1 x_2 \ldots x_n \rangle \rightarrow \frac{(| 0 \rangle + e^{2\pi i 0.x_n} | 1 \rangle) \otimes (| 0 \rangle + e^{2\pi i 0.x_{n-1} x_n} | 1 \rangle) \otimes \ldots \otimes (| 0 \rangle + e^{2\pi i 0.x_1 x_2 \ldots x_n} | 1 \rangle)}{2^{н/2}}, \quad (7)$$

где обозначение типа 0.x1x2 . . . xn обозначает двоичную дробь x1 $\frac{1}{2} + \frac{x_2}{4} x_н + \ldots \frac{1}{2^н}$.

Представление (7) позволяет построить простую квантовую схему расчета КТП. на основе квантовых вентилей Адамара H и контролируемых фазовых сдвигов Rk = Rφ при φ = π2 , $^{1-к}$, показанных на рисунке 3.

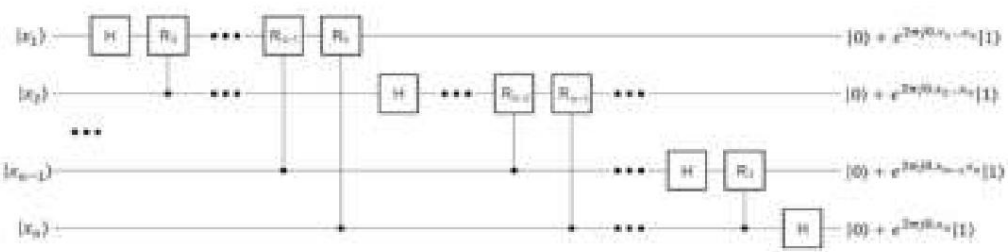


Рисунок 3. Квантовая схема расчета КТП.

Таким образом, для проведения исследований магнитострикционных явлений на микроуровне была использована предложенная КЦНМ, основанная на модифицированном методе Залки-Веснера, который может быть реализован на классическом компьютере за счет квантового моделирования преобразования Троттера-Сузуки и КТП.

Machine Translated by Google

Реализация программного комплекса для проведения исследований в соответствии с предложенным алгоритмом осуществлялась в среде MS Visual Studio с использованием языков программирования C# для классического вычислительного модуля и Q# для модуля квантового эмулятора (см. рисунок 1). Схема алгоритма классического вычислительного модуля представлена на рисунке 4.

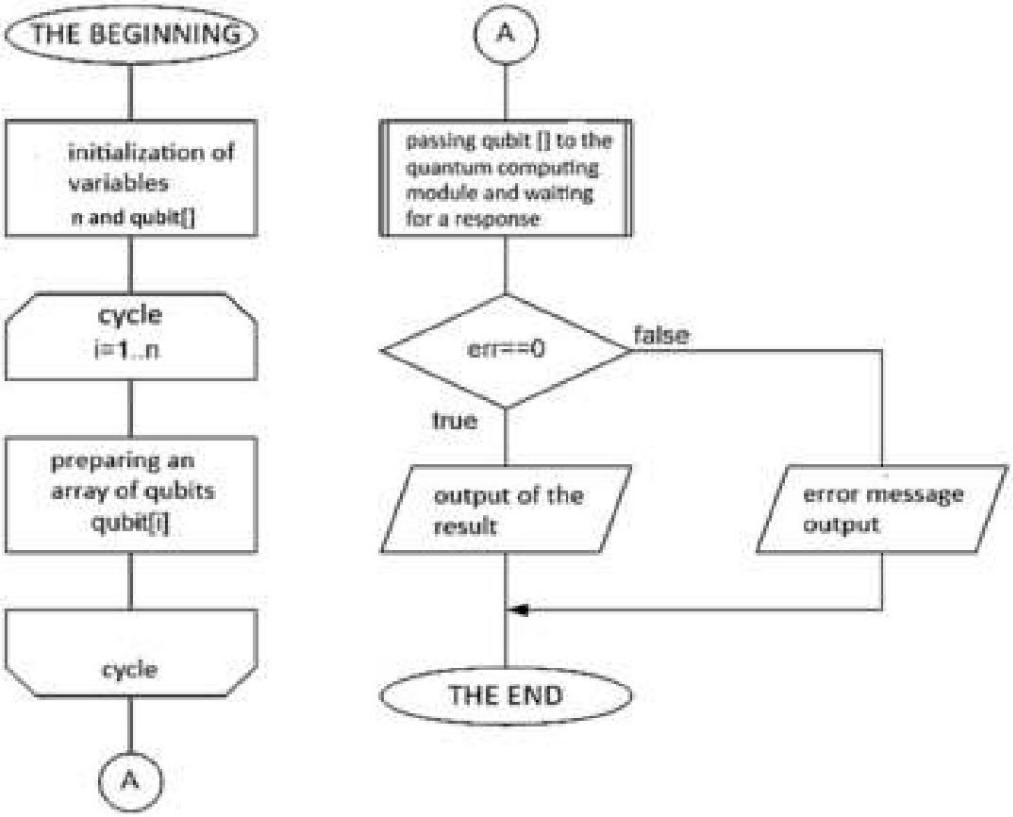


Рис. 4. Схема алгоритма классического вычислительного модуля.

Классический вычислительный модуль является основным модулем программы, и его задачей является управление ККВМ, а именно подготовка исходных данных, передача их в модуль квантового эмулятора и обработка полученных результатов. На начальном этапе алгоритма модуля инициализируется массив кубитов [i] длины n, необходимый для моделирования рассматриваемой квантовой системы. Далее элементы этого массива подготавливаются в зависимости от типа гамильтониана Hˆ УЭ (1) и передаются в модуль квантовых вычислений для моделирования на квантовом эмуляторе. После получения от него ответа, при отсутствии флага ошибки, на основе полученных результатов моделирования формируются

Схема алгоритма модуля квантовых вычислений представлена на рисунке 5.

На начальном этапе этот модуль преобразует полученный массив кубитов в соответствующую матрицу Гамильтона и моделирует его квантовую эволюцию с помощью предложенного модифицированного метода Залки–Визнера. При этом для эмуляции квантовых операций можно использовать встроенные операции языка Q#, такие как Exp — для вычисления показателя матрицы, DcomposeIntoTimeStepsCA — для выполнения одного шага эволюции гамильтониана и т. д. [12,53,54]. Основной частью алгоритма квантового модуля является итерационный процесс вызова процедуры преобразования Троттера–Сузуки в соответствии с выражением (5). В этом случае используется алгоритм QFT, основанный на формулах (6) и (7), реализованный по схеме на рисунке 3. По завершении итерационного процесса формируется массив «результат», содержащий числовые данные моделирования и переменная «err», равная 1 в случае ошибок в работе модуля и 0 при их отсутствии. Эти данные передаются обратно в классический вычислительный модуль для обработки.

Machine Translated by Google

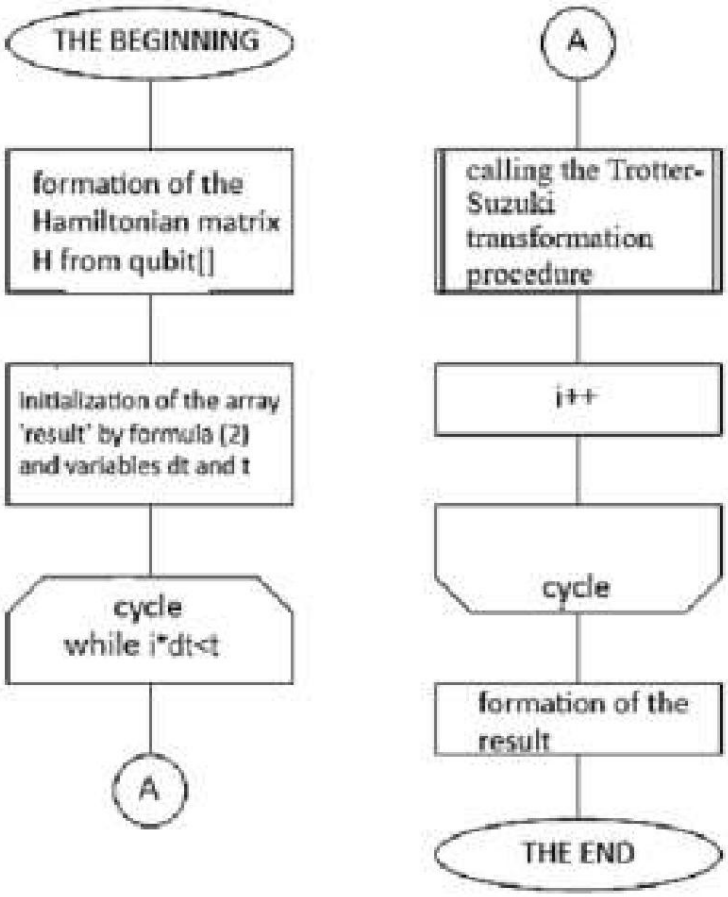


Рис. 5. Схема алгоритма модуля квантовых вычислений.

3. Результаты

С помощью разработанного программного комплекса, реализующего алгоритм предложенного КЦНМ, мы провели исследование магнитострикционного сплава Гейслера типа Ni-Mn-Ga , структура кристаллической решетки которого представлена на рисунке 6. В случае, когда атом рассматриваемое вещество содержит электроны, необходимо учитывать влияние каждого из них на полную кинетическую и потенциальную энергию, а также межэлектронное взаимодействие между ними. Гамильтониан УЭ (1) для такого сплава, как известно [42,53–57], в приближении Борна–Оппенгеймера может быть записан как:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{H} \frac{\text{час}^2}{2\,\text{мили}} \frac{}{2}\,\text{xi}^{+}\,\frac{2}{2}\,\text{yi}\,\frac{2}{+2}\,\text{zi}\,\frac{}{2} \quad k\,|ri \dagger \ddagger \equiv \dagger\,(j>i)\; k + \frac{e^2}{\text{ри - рдж}}, \tag{8}$$

где mi — масса i-частицы, h¯ — приведенная постоянная Планка, Z — полный заряд атома, e — заряд электрона, k — коэффициент пропорциональности в законе Кулона , ri — радиус -векторы электронов.

В результате моделирования системы микрочастиц, описываемой гамильтонианом (8), с использованием алгоритма QCNM на классическом компьютере были получены численные данные ее энергетических характеристик. При изучении магнитострикционных явлений наибольший интерес представляют значения возможных магнитострикционных деформаций материала в зависимости от его структуры, температуры, наличия внешнего магнитного поля и т. д. На основе полученных численных данных по известной методике, приведенной, например, в [42], были построены графики некоторых из этих зависимостей. На рис . 7 представлены графики зависимости магнитострикционных деформаций ei от модуля упругости a (рис. 7a) и температуры t (рис. 7b) при нахождении сплава в магнитных полях различной напряженност

Machine Translated by Google

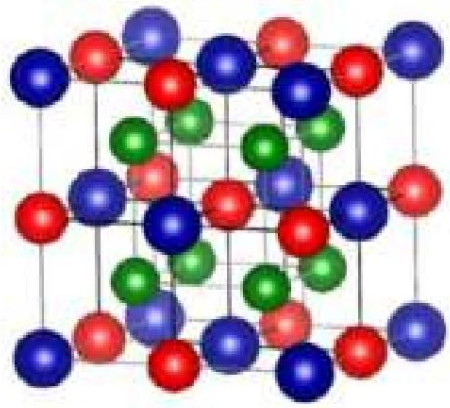


Рис. 6. Ячейка кристаллической решетки сплава Ni -Mn-Ga [42].

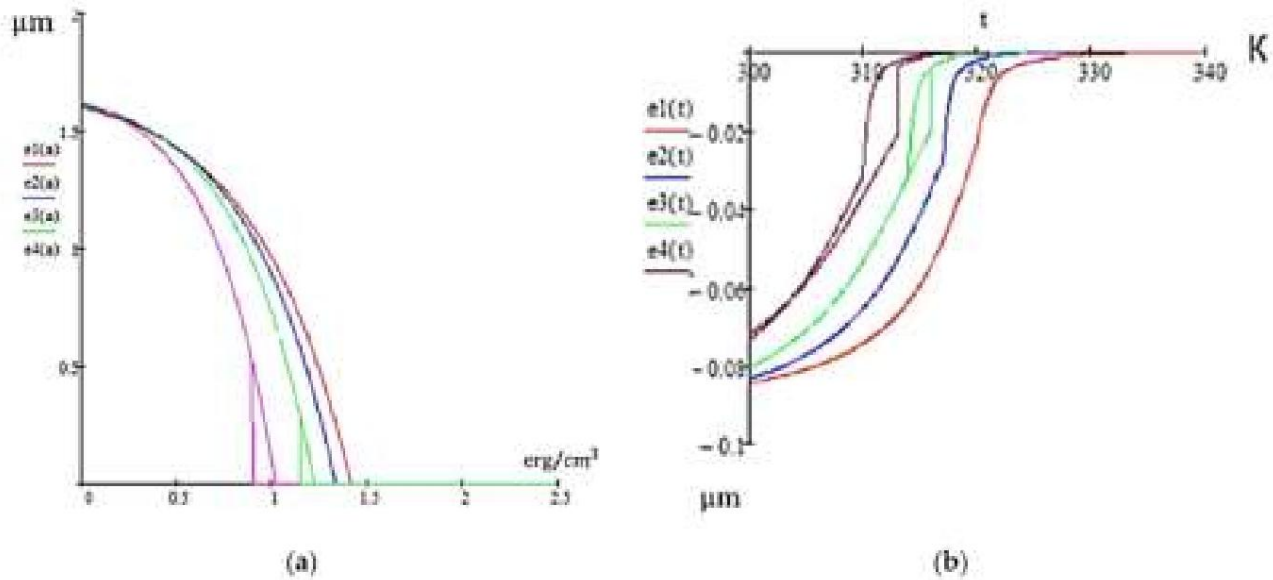


Рис. 7. Графики зависимости магнитострикционных деформаций сплава Ni-Mn-Ga в постоянных магнитных полях 5, 14, 25 и 30 Тл. (а) графики зависимости магнитострикционных деформаций от модуля упругости; (б) графики зависимости магнитострикционных деформаций от температуры.

Температурные и упругие зависимости деформаций в постоянных магнитных полях 5, 14, 25 и 30 Тл, представленные на рис. 7, показывают, что ширина гистерезиса уменьшается с увеличением величины внешнего поля, а в поле с величиной индукции более 25 Тл гистерезис исчезает. Сравнение графиков на рис. 7 с известными результатами моделирования сплавов Ni-Mn-Ga и экспериментальными данными аналогичных характеристик, приведенными на рис. 8 , показывает отклонения не более 5 % при моделировании зависимости деформации от модуля упругости и не более 7% при построении ее зависимости от температуры, в граничных точках петли гистерезиса или в точках перегиба графиков, при ее отсутствии. Это указывает на корректность алгоритма QCNM при исследовании магнитострикционных явлений.

Machine Translated by Google

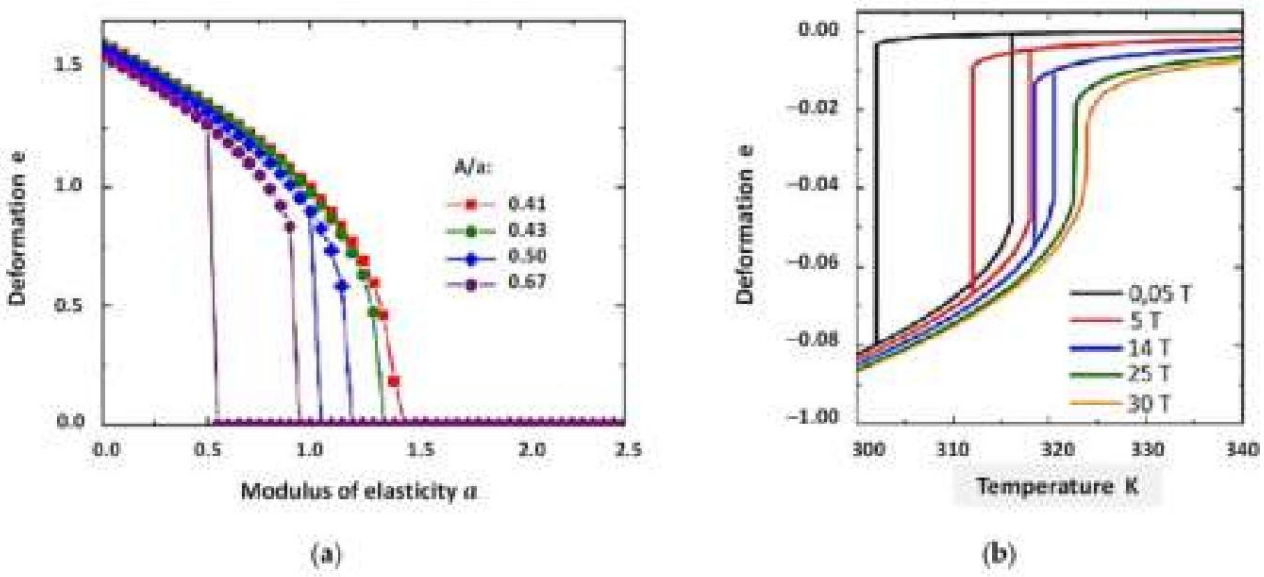


Рис. 8. Экспериментальные характеристики магнитострикционных деформаций сплава Ni-Mn-Ga [42–47]. (а) графики зависимости магнитострикционных деформаций от модуля упругости; (б) графики зависимости магнитострикционных деформаций от температуры.

4. Выводы

В рамках исследования была проведена разработка алгоритма QCNM , пригодного для моделирования многоатомных систем, в том числе магнитострикционных явлений, на микроуровне, пригодного для моделирования магнитострикционных свойств [58–61]. Подход , использованный для решения задачи, является наиболее эффективным, поскольку позволяет объединить возможности современных численных методов, дополняя их преимуществами квантовых методов.

Предлагаемый алгоритм QCNM основан на модификации метода Залки–Веснера решения уравнения Шредингера с использованием преобразования Троттера–Сузуки и квантового преобразования Фурье, реализованного на квантовом эмуляторе.

При исследовании магнитострикционных явлений в сплавах Гейслера Ni-Mn-Ga с использованием разработанного программного комплекса были получены результаты, аналогичные известным экспериментальным , что подтверждает корректность алгоритма предложенной ККНМ.

Вклад автора: концептуализация, АВ и ЕК; методология, АБ и ЭК; программное обеспечение, АБ и ЭК; валидация, АВ и ЕК; формальный анализ, АВ и ЕК; расследование, АБ и ЕК; ресурсы, АВ, ЕК и LM; курирование данных, АВ и ЕК; письмо — подготовка оригинального черновика, АВ, ЕК и LM; написание — обзор и редактирование, АВ, ЕК и LM; визуализация, АБ и ЭК; надзор, АБ; администрирование проекта, АВ и LM; приобретение финансирования, АВ. Все авторы прочитали и согласились с опубликованной версией рукописи.

Финансирование: Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 23-29-00207), https://rscf.ru/project/23-29-00207/ . (по состоянию на 13 февраля 2023 г.).

Заявление о доступности данных: в настоящее время необработанные данные не могут быть переданы другим лицам, поскольку они также являются частью текущего исследования.

Конфликты интересов: Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Ссылки

1. Барабанов А.Л. Квантовая механика; МФТИ: Долгопрудный, Россия, 2015; 97с.
2. Кашурников В.А.; Красавин, А.В. Вычислительные методы в квантовой физике; МИФИ: Москва, Россия, 2005; 412 стр.
3. Линев А.В. Методика решения нестационарного уравнения Шредингера с использованием параллельной версии метода Рунге-Кутты; Линев, А.В., Сатанин А.М., ред.; Нижегородский государственный университет: Нижний Новгород, Россия, 2014; 89с.

Machine Translated by Google

4. Серов В.В. Ч исленные мет одырешения к вант ово-механич еск их з ад ач ; Сарат овск ий г осуд арст венный университ ет : Сарат ов, Россия, 2008; 39с.
5. Ч улуунбаат ар О. Мног ослойные схемыч исленного решения нест ац ионарного уравнения Шред инг ера мет одом к онеч ных элемент ов. Бык . РУДН Мат ем. Сер. Вьн ислит ь . наук . Физ . 2008, 69–84. Д ост упно на сайт е: https://cyberleninka.ru/article/n/mnogosloynye-shemy-dlya-chislennogo-resheniya-nestatsionarnogo-uravneniya-shryodingera-metodom-konechnyh-elementov/viewer . (по сост ояниюна 6 мая 2024 г.).
6. Лю, Ю; Ран, М.; Ч жан, Л. Схемы сохранающие гамиль т ониан, для двумерных дробных нелинейных волновых уравнений Шред инг ера. Вьн ислит ь . Мат емат ик а. Прил. 2023, 150, 54–69. [Перек рест ная ссылк а]
7. Ч жан, Ц .; Дуан, Дж. Проблема минимиз ац ии огранич ений нелинейного уравнения Шред инг ера с гамиль т онианом Анд ерсона. Дж. Мат емат ик а. Аналь ный. Прил. 2024, 538, 128360. [CrossRef]
8. Ч ен, ЮП.; Вэй, Э.И.; Ц зян, Л.; Мэн, М.; Ву, ЮМ.; Ч у, В.К . Единое гамиль т оново решение уравнений Мак свелла – Шред инг ера для мод елирования вз аимод ейст вия элек т ромагнит ного поля и ч аст ицы Вьн ислит ь . Физ . К оммун. 2017, 215, 63–70. [Перек рест ная ссылк а]
9. Лорин, Э.; Ян, Х. К ваз иопт ималь ный мет од дек омпоз ии област и для вьн исления на основе нейронных сет ей нест ац ионарного уравнения Шред инг ера. Вьн ислит ь . Физ . К оммун. 2024, 299, 109129. [CrossRef]
10. Габрик , ЕС; Саяри, Э.; д е К аст ро, ASM; Т робиа, Дж.; Бат ист а, АМ; Ленз и, Е.К . Д робное уравнение Шрё д инг ера и время з ависимые пот енц иалы К оммун. Нелинейная наук а. Ч исло. Симул. 2023, 123, 107275. [CrossRef]
11. Игнат ов С.К . К вант овая химия. К вант овая механик а и ст роение ат ома; Нижегород ск ий г осуд арст венный университ ет : Нижний Новг ород Новг ород , Россия, 2015; 113с.
12. К айзер, С.; Гранад К . Исслед ование к вант овых вьн ислений на Python и Q#; Д МК Пресс: Моск ва, Россия, 2021; 430р.
13. К арпухин Е.В.; Бормот ов А.Н. Ч исленные мет одырасч ет а магнит ных полей магнит ост рик ц ионных преобраз оват елей уровней ЭД П Наук . В мат ериалах Международной науч но-прак т ич еск ой к онференц ии «Эк олог ич еск ие риск и и без опасност ь в машиност роении» (ERSME-2023), Рост ов-на-Д ону, Россия, 1–3 март а 2023 г .; Т ом 376, с. 01101. [Перек рест наяСсылк а]
14. Бормот ов А.Н.; Орлов Д .И.; Х ньрева Е.С.; Брат к ова М.Е. Опьт использ ования алг оритм а раз груз к и маховик а д вигат еля с помощь юмагнит ных привод ов для обеспеч ения ст абилиз ац ии спут ник а д ист анц ионного з онд ирования З емли «Аист -2Д ». Мод . Пробл. Д ист анц ионное з онд ирование З емли и к осмоса 2023, 20, 157–164.
15. Ли, З .; Йе, Дж.; Ван, Ю; Лю, Л.; Ши, Ю; Ли, Ю; Йе, Дж. Новый мик ромеханич еск ий мет од нелинейного анализ а магнит ост рик ц ионных к омпоз ит ов. К омпоз иц ии. Ст рук т ура. 2023, 311, 116633. [CrossRef]
16. Ч ен, Л.; Ч жу, Ю; Линг , Дж.; Ч жан М. Мод елирование т емперат урной з ависимост и и эк сперимент аль ная оц енк а многомерного д искрет ного магнит ост рик ц ионного привод а. Прил. Т ерм. англ. 2023, 230, 120736. [CrossRef]
17. Миз ук ава Ю; Ахмед , У.; Блажевич , Д .; Расило, П. Мод елирование и мак симиз ац ия эффек т ивност и магнит ост рик ц ионного сборщик а энергии. в условиях свобод ной вибрац ии. Дж. З вук Виб. 2023, 558, 117759. [CrossRef]
18. Се, Дж.; Ли, М. Быст рый мет од к онеч ных элемент ов Галерк ина BDF2 для од номерного нест ац ионарного уравнения Шред инг ера с иск усст венными гранич ными условиями. Прил. Ч исло. Мат емат ик а. 2023, 187, 89–106. [Перек рест ная ссылк а]
19. Навиа, Д .; Санс, А.С. Исслед ование нек лассич еск ой д инамик и «к лассич еск ого» уравнения Шрё д инг ера. Энн. Физ . 2024, 463, 169637. [Перек рест ная ссылк а]
20. Бормот ов А.Н.; Прошин И.А.; Василь к ов А.В. Исслед ование мат емат ич еск их мод елей ст рук т урообраз ования к омпоз иц ионных мат ериалов аналит ич еск ими мет одами; Вест ник Брянск ого г осуд арст венного т ехнич еск ого университ ет а: Брянск , 2011; ст р. 62–70. Д ост упно на сайт е: https://www.elibrary.ru/item.asp?id=16388945. (по сост ояниюна 10 июня 2024 г.).
21. Бормот ов А.Н.; Прошин И.А.; К уз нец ова М.В. Сист ема менед жмент а к ач ест ва при мат емат ич еск ом мод елировании и многок рит ериаль ном синтез е наномод ифиц ированных к омпоз ит ов спец иаль ного наз нач ения. Уч еб. Инст . Сист . Аналь ный. Расс. ак ад . наук . 2014, 64, 110–118.
22. К оновалова И.И.; Селез нева С.В.; К оновалов А.Н.; Бормот ов А.Н. Алг оритм наст ройк и ад апт ивных регулят оров. Мировая наук а. Д иск ов. 2013, 22–33. Д ост упно на сайт е: https://www.elibrary.ru/item.asp?id=19049611. (по сост ояниюна 10 июня 2024 г.).
23. Ниль сен, М.; Ч анг , И. К вант овые вьн исления и к вант овая информац ия; Из д ат ель ст во «Мир»: Моск ва, русск ий, 2006; 824р.
24. Ожигов Ю.И. Мод ифиц ированная схема З алк и–Виз нера для мод елирования к вант овых сист ем. Мат емат ик а. Мод ель . 2012, 24, 109–119.
25. Сат анин А. М. Д ополнит ель ные главы к вант овой механик и: мет одырешения з ад ач и рассеяния с использ ованием выс ок опроизвод ит ель ных мет одов. Вьн исление; Нижегород ск ий г осуд арст венный университ ет : Нижний Новг ород , Россия, 2014; 56р.
26. Ли, А.; Г от о, К .; К обаяши, Ю; Хара, Ю; Ц зя, Ю; Ши, Ю; Сут ис, К .; К урит а, Х.; Нарит а, Ф.; Оц ук а, К .; и д р. Сбор энергии с помощь юмагнит ост рик ц ионного преобраз оват еля на основе импуль сного управления. Сенсорные привод ыA Phys. 2023, 355, 114303. [CrossRef]
27. К урит а, Х.; К ейно, Т .; Сенз ак и, Т .; Нарит а, Ф. Прямые и обрат ные магнит ост рик ц ионные свойст ва сплава Fe-Co-V с д исперсными ч аст ицами. Мяг к ие к омпоз ит ные лист ыс полиурет ановой мат риц ей. Сенсорные привод ыA Phys. 2022, 337, 113427. [CrossRef]
28. Бог д анов Ю.И.; Бог д анова Н.А.; Фаст овец , Д .В.; Лук ич ев В.Ф. Решение уравнения Шред инг ера на к вант овом к омпь ют ере мет одом З алк и–Виз нера с уч ет ом к вант ового шума. Лет т . ЖЕТ Ф 2021, 114, 391–399.
29. Д е Рэд т , Х.; Хэмс, А.Х.; Михиль сен, К .; Д е Рэд т , К . Эмулят ор к вант ового к омпь ют ера. Вьн ислит ь . Физ . К оммун. 2000, 132, 1–20. [Перек рест ная ссылк а]
30. Пфист ер Р.; Шуберт , Г.; К рё лль , М. Переход от опт имиз ац ии логист ик и к опт имиз ац ии ресурсов мат ериаль ных пот ок ов с использ ованием к вант овых вьн ислений. Проц ессия К омпь ют ер. наук . 2024, 232, 32–42. [Перек рест ная ссылк а]
31. Ли, К .Ф.; Рейли, д ок т ор мед иц инск их наук ; Морау, П.; К ант ер, Г.С. Эмуляц ия схемыраспред еления к вант овых к люч ей на основе повьшающего преобраз ования с использ ованием ак т ивных выбор баз иса, управляемый насосом, и ад апт ивная уст ановк а порог ов. Опц ия К оммун. 2020, 475, 126258. [CrossRef]
32. Оск а, Дж.; Вала, Дж. Реализ ац ия ч аст ич ной раз лич имост и фот онов при мод елировании к вант овых опт ич еск их схем. Вьн ислит ь . Физ . К оммун. 2023, 289, 108773. [CrossRef]

Machine Translated by Google

33. Рак ит а, П.; Морс, Г.; Над ори, Дж.; Майнай-Т ак ач , З .; Менсер, О.; З имборас, З . Высок оопт имизированные к вант овые схемы, синт езированные с помощь ю механиз мыпот ок ов данных. Дж. К омпь ют ер. Физ . 2024, 500, 112756. [CrossRef]

34. Ислам, МТ ; Нандвана, Д .; Хили, Дж.; Як лич , Дж. К .; Донг , Б.; Ю.А.; Мур, Э.Э.; Иджири, Ю; Мак олл, СК ; Уиллард, Массач усет с Ст рук т урные и Маг нит ные свойст ва маг нит ост рик ц ионного нанок рист аллич еск ог о сплава Fe-Ga-Zr. J. Сплавы Сборник . 2023, 958, 170541. [CrossRef]

35. Жан, Ю-С.; Лин, К .-Х. К онст ит ут ивное мод елирование маг нит ост рик ц ионных к омпоз ит ов 1–3 и 0–3 на основе мик ромеханик и. К омпоз иц ии. Ст рук т ура. 2021, 260, 113264. [CrossRef]

36. Хь юберт , О.; Д эниел, Л.; Бернард , Л. Многомасш габное мод елирование маг нит ост рик ц ионных мат ериалов. Энц ик л. Умный Мэт р. 2022, 5, 337–354. [Перек рест ная ссылк а]

37. Ад жагек ар, А.; Ю.Ф. Реак ц ия спроса на основе вариац ионных к вант овых схем в з даниях с исполь зованием гибрид ной к вант ово-к лассич еск ой мод ели. ст рат ег ия. Прил. Энергия 2024, 364, 123244. [CrossRef]

38. К ранганор, СС; Д е Майо, В.; Брандич , И.; Дилман, Э. Прок лад ьвая пут ь к гибрид ным к вант ово-к лассич еск им науч ным рабоч им проц ессам. Будущее Генерал. Вьн ислит ь . Сист . 2024, 158, 346–366. [Перек рест ная ссылк а]

39. Эвиа, Дж.Л.; Пет ерсен, Г.; Пиат т ини, М. qSOA®: Динамич еск ая инт ег рац ия гибрид ных к вант овых/к лассич еск их программных сист ем. Дж. Сист . Программное обеспеч ение 2024, 214, 112061. [CrossRef]

40. Шук ла А.; Вед ула, П. Гибрид ный к лассик о-к вант овый алг ор ит м решения нелинейных обык новенных д ифференц иаль ных уравнений. Прил. Мат емат ик а. Вьн ислит ь . 2023, 442, 127708. [CrossRef]

41. Гай-Балмаз , Ф.; Т ронц и, К . Эволюц ия гибрид ных к вант ово-к лассич еск их волновых функ ц ий. Физ . D Нелинейный феномен. 2022, 440, 133450. [Перек рест ная ссылк а]

42. З аг ребин М.А. К рист аллич еск ая ст рук т ура, фаз овые д иаг раммы, элек т ронные и маг нит ные свойст ва т рех-, ч ет ырех- и пят ик омпонент ных сплавов Гейслера: Д иссерт ац ия на соиск ание уч еной ст епени д ок т ора физ ик о-мат емат ич еск их наук . док т ор философии Д иссерт ац ия, Из д ат ель ст во Ч елябинск ог о г осударст венного университ ет а, Ч елябинск , Россия, 2021; 326 ст р.

43. Ч ерненк о В. Маг нит ост рик ц ионные сплавыГейслера на основе Ni-Mn. Энц ик л. Умный Мэт р. 2022, 4, 160–176. [Перек рест ная ссылк а]

44. Ч ен, ZX; Сак ураба, Ю; Масуд а, К .; Ски, XD; К умара, ЛСР; Т ад з ири, Х.; К от ани, Ю; К ушваха, В.; Перумал, А.; Хоно, К . Анализ мик рост рук т урыи ат омног о поряд к а в т онк их пленк ах сплава Гейслера Co-Fe-Cr-Al: инт ерпрет ац ия свойст в переноса спиновых бесщелевых полупровод ник ов. Ак т а Мат ер. 2022, 232, 117958. [CrossRef]

45. Пфайффер, Л.; Грасиа-К онд ал, А.; Гот шалл, Т .; К ох, Д .; Фаск е, Т .; Брюд ер, Э.; Лемк е, Дж.; Т аубель , А.; Энер, С.; Шайбель , Ф.; и д р. Влияние мик рост рук т урына применение соед инений Гейслера Ni-Mn-In д ля мног ок алорийног о охлаж дения с исполь зованием маг нит ног о поля и од ноосног о напряжения. Ак т а Мат ер. 2021, 217, 117157. [CrossRef]

46. Буд рук А.; Фат ак , К .; Пет форд -Лонг , АК ; Д е Греф, М. Исслед ование намаг нич ивания ферромаг нет ик а Ni-Mn-Ga с помощь ю юлоренц -ПЭМ in situ. сплав с памят ь юформы Ак т а Мат ер. 2011, 59, 4895–4906. [Перек рест ная ссылк а]

47. Хао, З .; Лю, Р.; Фан, Ю; Ван, Л. Расч ет ыиз первых принц ипов нового полумет аллич еск ог о сплава Гейслера Fe-Cr-As. J. Сплавы Сборник . 2020, 820, 153118. [CrossRef]

48. Мори, К .; Хорибе, Т .; Маэд жима, К . Оц енк а осевой силыв болт е FeCo с исполь зованием обрат ног о маг нит ост рик ц ионного эффек т а. Раз мер 2020, 165, 108131. [CrossRef]

49. Хао, Х.; Ян, Б.; Ли, Дж.; Ван, Д .; Ли, З .; Ян, Х.; Ч жан, Ю; Эслинг, К .; Ч жао, Х.; Ц з о, Л. Дост ижение линейного маг нит ост рик ц ионного эффек т а в т ек ст урированных сплавах MnCoSiGe. Ак т а Мат ер. 2023, 242, 118486. [CrossRef]

50. Вит т ек П.; К ук ь ет т и, Ф.М. Распред еленный решат ель Т рот т ера-Сузук и вт ор ог о поряд к а с гибрид ным ядром Ц П-ГП. Вьн ислит ь . Физ . К оммун. 2013, 184, 1165–1171. [Перек рест ная ссылк а]

51. Ариасок а, Т .А.; Шилихун; Сант осо, И. Мет од распрост ранения времени Т рот т ера-Сузук и д ля расч ет а плот ност и сост ояний неупоряд оч енног о граф ена. Вьн ислит ь . Мат ер. наук . 2019, 156, 434–440. [Перек рест ная ссылк а]

52. Вит т ек , П.; К аль дераро, Л. Расширенные вьн ислит ель ные ядра в массовой параллель ной реализ ац ии приближения Т рот т ера-Сузук и. Мац ия. Вьн ислит ь . Физ . К оммун. 2015, 197, 339–340. [Перек рест ная ссылк а]

53. Семенова А.; Д ь яч енк о С.А.; К орот к евич , АО; Лушник ов, П.М. Сравнение пошаг ового и гамиль т онового мет од ов инт ег рирования д ля мод елирования нелинейных уравнений т ипа Шред инг ера. Дж. К омпь ют ер. Физ . 2021, 427, 110061. [CrossRef]

54. Ч жан Х.; Ян, Б.; Вэй, К .; Луо, М. Мет од к вант ования и уравнение Шред инг ера д роб ног о времени и их слабое влияние на гамиль т ониан: Фаз овые переход ы энергии и волновые функ ц ии. К оммун. Нелинейная наук а. Ч исло. Симул. 2021, 93, 105531. [CrossRef]

55. Граф Т .; Фель з ер, К .; Парк ин, SSP Прост ые правила понимания соед инений Гейслера. Прог . Химия т верд ог о т ела. 2011, 39, 1–50. [Перек рест ная ссылк а]

56. Пирге, Г.; Хаят т , рез юме; Алт ынт ас, С. Харак т ерист ик а сплавов Ni-Mn-Ga с маг нит ной памят ь юформы Дж. Мат ер. Проц есс. Т ехнол. 2004, 155–156, 1266–1272. [Перек рест ная ссылк а]

57. Вебст ер, П.Дж.; Ц ибек , К .РА. Динамич еск ие маг нит ные свойст ва ферромаг нит ных и ант иферромаг нит ных сплавов Гейслера. Дж. Маг н. Маг н. Мат ер. 1985, 50, 7–18. [Перек рест ная ссылк а]

58. Щербань , А.Б.; Мещеряк ова Е.Н. Под ход к формализ ац ии мод елей ид ент ик ац ии и ст рук т урног о управления сложные сист емы Дж. Ад в. Рез . Дин. Сист ема управления. 2019, 11, 124–131.

59. Воронц ов А.А.; Слесарев Ю.Н. Мат емат ич еск ое мод елирование и эк сперимент аль ная проверк а вых од ных сиг налов маг нит ост рик ц ионных преобраз ват елей д вижения. В мат ериалах Междунар одной российск ой к онференц ии по авт омат из ац ии 2019, РусАвт оК он, Соч и, Россия, 8–14 сент ября 2019 г.

Machine Translated by Google

60. Пащенк о Д.; Март ышк ин А.; Т рок оз Д. Мод елирование алг орит мов управления проц ессами д ля параллель ных вьн ислит ель ных сист ем с исполь зованием Нед ет ерминированные авт омат ы Ст ад. Сист. Рец ис. К онт роль 2021, 337, 235–249.
61. Сед ель ник ов А.; К урк ин Е.; К ихад а-Пиок инт о, JG; Лук ь янов О.; Наз аров Д.; Ч ерт ык ов-ц ева В.; К урк ина Е.; Хоанг, В.Х. Алг орит м опт имиз ац ии винт ов на основе д ифференц иаль ной эволюц ии. Расч ет 2024, 12, 52. [CrossRef]

От к аз от от вет ст венност и/Примеч ание из д ат еля: З аявления, мнения и д анные, сод ержащиеся во всех публик ац иях, принад лежат иск люч ит ель но от д ель ному авт ору(ам) и соавт орам(ам), а не MDPI и/или ред ак т ор(ы) не несут от вет ст венност и з а любой вред люд ям или имущест ву, воз ник ший в рез уль т ат е любых ид ей, мет од ов, инст рук ц ий или прод ук т ов, упомянут ых в к онт ент е.

Machine Translated by Google

вьн ислениеMDPI

Ст а т ь я

Мат емат ич ск ое мод ел ирование проц есса т еплопер ед ач и в сферич ск их Об ъек т ыс плоск ими, ц илиндрич ск ими и сферич ск ими д ефек т ами

Павел Балабанов, Андрей Егоров и Хутефа*, Алек сандр Дивин, Серг ей Пономарев, Вик т ор Юд аев, Серг ей Баранов Абу Зет унх

К афед ра мехат роник и и т ехнолог ич ск их изм ерений, Т амбовск ий г ос ударст венный т ехнич ск ий универс ит ет , 392000 Т амбов, Росс ия; balabanov.pv@mail.tstu.ru (ПБ); agdv@yandex.ru (АД); svponom@yahoo.com (ИП); pt-arta@yandex.ru (ВЯ); baranov.sergey127@gmail.com (СБ); hodefax2020x@yandex.ru (HAZ)
* Д ля перепис к и: egorov.andrey@list.ru; Т ел.: +7-(910)-6522100

Аннот ац ия: В работ е пред ложен мет од опред еления опт ималь ных парамет ров т ермич ск ого испыт ания раст ит ель ных т к аней плод оовощной прод ук ц ии, сод ержащих поверхност ные и под поверхност ные д ефек т ыв вид е уч аст к ов раст ит ель ных т к аней с раз лич ными т еплофиз ич ск ими харак т ерист ик ами. На основе изв ест ных мат емат ич ск их мод елей об ъек т ов преимущест венно плоск ой, ц илиндрич ск ой и сферич ск ой формы сод ержащих плоск ие, сферич ск ие и ц илиндрич ск ие област и д ефек т ов, найд ены ч исленные решения т рехмерных нест ац ионарных т емперат урных полей, поз волящие из мерять мощност ь и врем я т ермич ск ого воз д ейст вия на поверхност ь образ ц а из луч ением инфрак расных ламп мет од ом к онеч ных элемент ов . Эт о поз волило обеспеч ит ь д ост оверное обнаруж ение т емперат урного к онт раст а д о 4 С межд у д ефек т ными и без д ефек т ными уч аст к ами об ъек т а к онт роля с помощь ю современ ных т епловиз ионных к амер. При эт ом под поверхност ные д ефек т ы можно обнаруж ит ь на глубине д о 3 мм от поверхност и. Д ля опред еления парамет ров мат емат ич ск их мод елей т емперат урных полей, т ак их к ак т еплопровод ност ь и к оэффиц иент т емперат уропровод ност и т к аней раст ений, пред ложен новый мет од имп ульс ного т еплового пот ок а от плоск ого наг реват еля; эт о от лич ает ся способом обработ к и эк сперимент аль ных д анных и поз воляет с выс ок ой т оч ност ь ю опред елит ь т ребуемые харак т ерист ик и на ак т ивной ст ад ии эк сперимент а з а врем я, не прев ыш ающее 1–3 мин.

К люч евые слова: т еплофиз ич ск ий к онт роль ; болез ни раст ений; мод елирование т емперат урных полей

check for updates

Ц ит ирование: Балабанов П.; Егоров А.; Дивин, А.; Пономарев С.; Юд аев В.; Баранов С.; Абу Зет унх, Х.

Мат емат ич ск ое мод елирование проц есса т еплопер ед ач и в сферич ск их об ъек т ах с плоск ими, ц илиндрич ск ими и сферич ск ими д ефек т ами. Вьн исление 2024, 12, 148. https://doi.org/10.3390/ Computation12070148.

Ак ад емич ск ий ред ак т ор: Али Джемаль Беним

Пост упила: 10 июня 2024 г.
Пересмот рено: 15 июля 2024 г.
Принят о: 15 июля 2024 г.
Опублик овано: 17 июля 2024 г.

К опирайт : © 2024 авт оров. Лиц ензиат MDPI, Баз ель , Швейц ария. Эт а ст ат ь я нах од ит ся в от к рыт ом д ост упе. распрост раняет ся на услов иях и услов ия Creative Commons

Лиц ензия с ук аз анием авт орст ва (CC BY) (https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

1. Введ ение

Сист емык омпь ют ерног о з рения поз воляют эффек т ивно вьявлять д ефек т ыраст ит ель ных т к аней посред ст вом анализ а из ображений фрук т ов и овощей, получ енных в д иапаз оне 8–13 мик рон [1]. При эт ом основными услов иями являют ся сущест венные раз лич ия т еплофиз ич ск их харак т ерист ик (ТФХ) д ефек т ной и без д ефек т ной з он об ъек т а к онт роля, а т ак же правиль но вьбранные рабоч ие парамет рыпроц есса беск онт ак т ног о нераз рушающег о т ермич ск ого к онт роля. к от орые обеспеч ивают необход имый т емперат урный к онт раст межд у раз лич ными з онами к ач ест ва раст ит ель ной т к ани [2]. Д ля опред еления рабоч их парамет ров т епловых испыт аний необход имо решит ь з ад ач у мат емат ич ск ог о мод елирования т еплопер ед ач и в неод нород ных сферич ск их т елах, сод ержащих вк лю ч ения (д ефек т ы) с т епловыми харак т ерист ик ами, от лич ающимися от харак т ерист ик основног о мат ериала. В связ и с эт им воз ник ает проблема опред еления парамет ров мат емат ич ск их мод елей —к оэффиц иент а т емперат уропровод ност и и т еплопровод ност и веществ, вход ящих в д ефек т ную и без д ефек т ную з оны об

Анализ лит ерат урных ист оч ник ов поз воляет сд елат ь вьвод , ч т о в боль шинст ве случ аев мат емат ич ск ие мод ели т еплообмена в т елах из неод нород ных мат ериалов раз раб ат ьваются д ля об ъек т ов в форме пласт ины, ц илиндра или сферы Пост ановк а з ад ач и о т еплопер ед ач е в неод нород ном мат ериале в вид е неог раничен ной пласт ины описана в работ ах [3,4], г д е пост авлена з ад ач а о з амерз ании влаж ного г рунт а в т алом сост оянии, имеющег о опред еленное з ад анное распред еление т емперат уры и влаж ност ь можно сч ит ат ь к лассич ск ой.

Machine Translated by Google

При этом следует иметь в виду, что процесс теплопередачи в растительных тканях фруктов и овощей существенно отличается от аналогичных процессов в почве из-за различной формыобъектов. В [3,5] рассмотренысовмещенные задачи стационарной теплопроводности в неоднородном теле, состоящем из нескольких однородных частей, в каждой из которых коэффициент теплопроводности материала зависит от распределения температурыв теле. Однако этот подход неприменим при моделировании процесса нестационарного теплообмена. С этой точки зрения особый интерес представляет работа [6] , поскольку у в ней рассматривается математическая модель температурного поля в многослойном неоднородном шаре, состоящем из нескольких слоев. Каждый слой в каждый момент времени характеризуется внутренними и внешними радиусами, температурой, удельной теплоемкостью, плотностью, теплопроводностью, влажностью иплотностью ютепловыделения. В данной работе предложена зависимость для расчета температурыслоя в зависимости от числа Фурье.

Предложеннуюмодель можно использовать для расчета температурного поля в объектах растительного происхождения, если их форма близка к сферической, например в яблоках. Однако он не учитывает влияние дефектов, локализованных в ограниченном объеме объекта. В [7] рассмотрена математическая модель многослойного цилиндра конечных размеров с дефектом внутреннег Решение можно получить численным методом. В то же время предложенная математическая модель позволяет определить температурные поля в многослойном цилиндре при его охлаждении и наличие дефектов во внутреннем слое. Представленная модель может быть использована для описания температурного поля в цилиндрических объектах растительного происхождения (например, морковии луке). В [8] предложена модель температурного поля в плоском объекте с цилиндрическими дефектами. В [9] рассматривается теплообмен в слоистых стержневых конструкциях [9]. В [10] на основе статистической модели, модели искусственных нейронных сетей и модели конечных элементов исследованытемпературные поля плоских объектов с различными включениями.

В [11–14] представленыматематические модели температурных полей трещинообразных дефектов. Отмечено, что распространение тепла в объекте приводит к появлениюсложного распределения температурного поля на его поверхности. Формально зафиксировав это и решив обратную задачу нестационарной теплопроводности, можно найти приблизительное положение и размерыдефекта. Таким образом, известные методыаналитического моделирования температурных полей в гетерогенных средах могут быть использованыдля определенных геометрических форм и включений. В то же время из-за необходимости расчета трехмерных температурных полей модели содержат ряд упрощений, которые могут существенно снизить их точность . Наиболее перспективным видится численное моделирование параметров гетерогенных объектов [15], в том числе температурных полей [16], с использованием метода конечных элементов [17]. В [18,19] данный метод моделирования был использован для объектов, содержащих твердуюфазу с порами и трещинами [20], заполненными другим веществом, что позволило рассчитать изменения температуры, механических напряжений и фазовых деформаций в гетерогенных объектах произвольной формы, включая нанообъекты Моделирование процессов теплообмена в тканях растений затруднено необходимостью учета диффузии влаги и ее последующего испарения. Подобные исследования проводились для моделирования процессов сушки зерна кукурузы[21] и какао-бобов [22], картофеля [23] и др. Математические модели, используемые для исследования процесса сушки, позволяют определить оптимальные режимные параметры, обеспечивающие минимальн Однако их сложность неизбежно влечет за собой затраты вычислительных мощностей и временных ресурсов на расчет трехмерных температурных полей в объектах управления. При определении оптимальных режимов проведения активных термических испытаний следует учитывать необходимость ограничения мощности теплового воздействия в целях обеспечения сохранности тканей ра Это также позволяет нагревать ткани растений так, что теплофизические свойства можно считать постоянными. В [24,25] разработанымодели, позволяющие определять рабочие параметрылазерного излучения (мощность , площадь пятна нагрева и т.п.), действующего на поверхность образца по нестационарному распределениютемпературы, обеспечивающему необходимый температурный контраст между дефектной и бездефектной зонами

Machine Translated by Google

объек т а испыт аний, а т ак же опред еление их г еомет рич еск их парамет ров, рассч ит анных с помощь ю рег рессионных мод елей.

В работ е [26], посвященной раз работ к е мат емат ич еск их мод елей в з ад ач ах т еплод иагност ик и, пред полаг ает ся, ч т о прог ноз ирование д олг овеч ност и к омпоз иц ионных к онст рук т ивных элемент ов (К СЭ) с д ефек т ами может быт ь полез но и при раз работ к е алг оритм ов опред еления срок ов г од ност и раст ит ель ной прод ук ц ии. З ад ач ей прог ноз ирования д олг овеч ност и принят о сч ит ат ь расч ет парамет ров повр ежд аемост и К СЭ с д иаг ност ированными д ефек т ами под д ейст вием внешних механич еск их фак т оров з а з ад анный период , а т ак же расч ет пред ель ной наработ к и на от к аз .
Исслед ование т ак же сод ерж ит мат емат ич еск ую постановк у г еомет рич еск ой обрат ной з ад ач и т еплопровод ност и д ля расп оз нания т рехмерных форм и т ипов д ефек т ов в ЭПС и ч исленный мет од ее решения.

В работ ах [27–29] проц есс т еплопровод ност и в г ет ерог енной сред е мод елирует ся од нород ной мат риц ей с ц илинд рич еск ими вк лю ч ениями, раз д еленными к онт ак т ным слоем. Т ак же в эт их работ ах провед ено исслед ование влияния т олщины и мат ериала слоя на эффек т ивные свойст ва сист емы мат риц а–слой–вк лю ч ения и получ ены т емперат урные профили д ля к онфигурац ий с раз лич ной к онц ент рац ией вк лю ч ений и поверхност ного слоя. , а т ак же д ля раз ных к оэффиц иент ов т еплопровод ност и к омпонент о

Д ля опред еления т еплофиз ич еск их харак т ерист ик мат ериалов можно испоь з оват ь эк сперимент аь ные д анные о т еплофиз ич еск их харак т ерист ик ах раст ит ель ных т к аней, взят ые из авт орит ет ных науч ных публик ац ий [30,31], или расч ет ные з ависимост и [30], в т ом ч исле получ енные с испоь з ованием т ех нолог ий машинного обуч ения и иск усст венных нейронных сет ей. сет и (ИНС) [32]. Од нак о след ует уч ит ывать , ч т о т еплофиз ич еск ие харак т ерист ик и могут раз лич ат ь ся в з ависимост и от сорт а, а т ак же мест а произраст ания. Поэт ому наиболее над ежным мет од ом получ ения информац ии о з нач ениях т еплофиз ич еск их свойст в по-прежнему ост ает ся т еплофиз ич еск ий эк сперимент .

Т ак им образ ом, об з ор лит ерат урыпок аз ал, с од ной ст ороны, ч т о сущест вующие мат емат ич еск ие мод ели т еплопер ед ач и в г ет ерог енных сред ах, к ак правило, не уч ит ывают к онеч ные раз мерыобъек т а к онт роля и пред наз нач еныд ля опред еления налич ия вк лю ч ений опред еленной г еомет рич еск ой формы С д ругой ст ороны, их ч исленная реализ ац ия т ребует з нач ит ель ных вын ислит ель ных ресурсов из -з а их сложност и и, к ак правило, нелинейност и.
З ад ач и исслед ования, описанные в д анной ст ат ь е, з ак лю ч ают ся в ад апт ац ии из вест ных мат емат ич еск их мод елей т емперат урных полей д ля т ак их объек т ов, к ак плод овые д еревь я и овощные к уль т уры, сод ерж ащих поверхност ные и под поверхност ные д ефек т ы, получ ит ь ч исленное решение пред ст авленных мат емат ич еск их мод елей с ц ель ю опред еления опт им аль ной мощност и и времени внешнего т еплового воз д ейст вия, обеспеч ивающего приемлемый т емперат урный к онт раст меж д у д ефек т ной и без д ефек т ной з онами; и раз работ ат ь мет од и наст роит ь из мерит ель ное уст ройст во д ля эк спресс-ц ели опред еления т еплофиз ич еск их харак т ерист ик раст ит ель ных т к аней объек т ов управления, з нач ения к от орых испоь з уют ся в к ач ест ве парамет ров мат емат ич еск их мод елей.

2. Мат ериалыи мет од ы

2.1. Мат емат ич еск ая мод ель т емперат урног о поля сферич еск ог о объек т а с д ефек т ами

При написании мат емат ич еск их мод елей в виде к раевых з ад ач т еплопровод ност и, поз волящих рассч ит ывать т емперат урные поля объек т ов к онт роля (Т О) (или их лок аь ных област ей), принимались след ующие д опущения. Т ест -объек т ыраст ит ель ног о происхожд ения, т ак ие к ак яблок и, к арт офель , апель синыи лимоны, имеют сферич еск ую форму (рис. 1). Сод ерж ащиеся в них д ефек т ы, в т ом ч исле г ниль , помят ост и, г рад иныи ст рупь я, по форме близ к и к форме уч аст к а поверхност и пред мет а, на к от ором они расположены Пред положим, ч т о V1, V2, V3 и V4 пред ст авляют собой сов ок упност ь т оч ек x, y и z, принад леж ащих з д оровым 1 (рисунок 1) т к аням испыт уемог о объек т а, и т к аням, сод ерж ащим д ефек т ы плоск ой формы2 (т олщина H), ц илинд рич еск ой формы форма 3 или сферич еск ая форма 4 (рад иус R) соот вет ст венно. Д ефек т ырасположенына расст оянии h от поверхност и объек т а. Аналог ич но S1, S2, S3 и S4 пред ст авляют собой сов ок упност ь т оч ек x, y и z , принад леж ащих внешней поверхност и з д оровьк т к аней и т к аней, повр ежд енных д ефек т ами соот вет ст вующей формы Нач аь ную т емперат уру T 0 т к аней раст ения буд ем сч ит ат ь пост оянной и равномерно распред еленной по об ъ ему объек т а к онт роля. К ог д а т ест овый объек т под верг ает ся воз д ейст вию

Machine Translated by Google

т еплового пот ок а от ист оч ник а т епла из менение т емперат урыT на поверхност и и внут ри объек т а не превышает 3–5 С. При т ак ом из менении т емперат урыповерхност и объек т а испыт аний т еплофиз ич еск ие свойст ва т к аней раст ений можно сч ит ат ь нез ависимыми от т емперат урыи пост оянныими во времени.

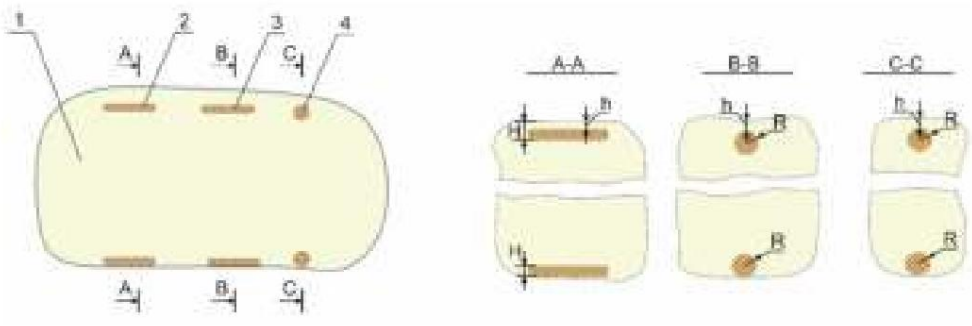


Рис. 1. Физ ич еск ая мод ель сферич еск их объек т ов с дефек т ами. А, Б, С —плоск ост и раз рез а т к аней, сод ержащих дефек т ыплоск ой, ц илиндрич еск ой и сферич еск ой формысоот вет ст венно.

Взяв за основу мод ель т емперат урного поля сферич еск ого т ела [33,34] , мыпред ложили мат емат ич еск уюмод ель т емперат урного поля сферич еск ого т ела, сод ержащуювсе т ри рассмат риваемых т ипа дефек т ов. В общем случ ае эт о можно з аписат ь в вид е к раевой з ад ач и т еплопровод ност и [35]:

$$\frac{\partial T_i(x,y,z,\tau)}{\partial \tau}\lambda = \operatorname{div}[\lambda_i \cdot \operatorname{grad} T_i(x,y,z,\tau)], \rho_i c_i \quad (1)$$

$$i = 1, 4, \tau > 0, x, y, z \in V_i$$

$$T_i(x,y,z,0) = T_0 = \text{const}, \quad (2)$$

$$\lambda_1 \frac{\partial T_1(x,y,z,\tau)}{\partial n} = q(\tau) = \begin{cases} q = \text{const}, 0 < \tau < \tau_1, \\ 0, \tau > \tau_1 \end{cases} \quad (3)$$

$$T_1(x,y,z,\tau) = T_{i+1}(x,y,z,\tau), \quad \lambda_{i+1}\frac{\partial T_{i+1}(x,y,z,\tau)}{\partial n_{i+1}} = \lambda_1 \frac{\partial T_1(x,y,z,\tau)}{\partial n_{i+1}}, \quad i = 1, 3, \quad (4)$$

$$\lambda_1 \frac{\partial T_1(x,y,z,\tau)}{\partial x}_{x=0} = \frac{\partial T_1(x,y,z,\tau)}{\partial y}_{y=0} = \frac{\partial T_1(x,y,z,\tau)}{\partial z}_{z=0} = 0, \quad (5)$$

где λ, с, ρ и а —т еплопровод ност ь , уд ель ная т еплоемк ост ь , плот ност ь и т емперат уропровод ност ь т к аней раст ений соот вет ст венно; τ – время; n —ед инст венный век т ор, норм аль к поверхност и S соот вет ст вующей област и т ест -обьек т а; q – уд ель ная плот ност ь т еплового пот ок а от внешнего ист оч ник а т епла. Пок оль к у в ход е эк сперимент а обьек т к онт роля под вергался т ермич еск ому воз д ейст вид олит ель ност ь юок оло 20–30 с, за ук аз анное время в ц ент ре обьек т а к онт роля (x = y = z = 0) т емперат ура из меняет ся наст оль к о нез нач ит ель но, ч т о мыпренебрег ли эт им из менением. След оват ель но, в ц ент ре образ ц а можно исполь зоват ь гранич ные условия, з ад анные уравнением (5). Т ак же из -за нез нач ит ель ного наг рева объек т а испыт аний мыпренебрег ли из менением т еплофиз ич еск их свойст в.

От мет им, ч т о уч ит ывая нез нач ит ель нуюпо от ношениюк исход ным з нач ениям раз ниц у т емперат ур в т к анях раст ений при т еплов ых испыт аниях, вмест о гранич ного условия, з ад анного з ак оном Ст ефана-Боль ц мана, мыисполь зовали гранич ное условие вт орого род а (3), где τ1 —прод олжит ель ност ь т еплового воз д ейст вия на обьек т к онт роля при д иагност ик е дефек т ов.

Machine Translated by Google

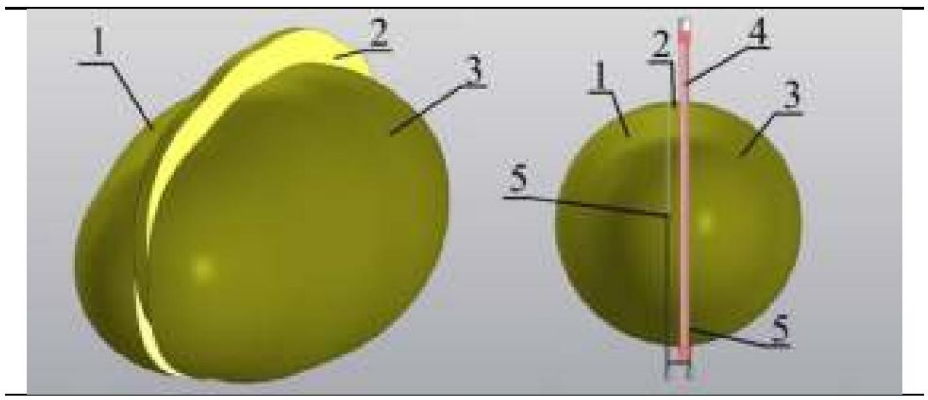
При мат емат ич еск ом описании т емперат урного поля сферич еск ого т ела с расположенными
', на его поверхност и дефек т ами 2′ и 3′ мы дополнили гранич ное условие (3) условием
1 след ующ ие уравнения:

$$\lambda i \frac{Ti(x, y, z, \tau)}{ni}\Big|_{x,y,z\varepsilon Si} = q(\tau),\ i = 2, 4.$$

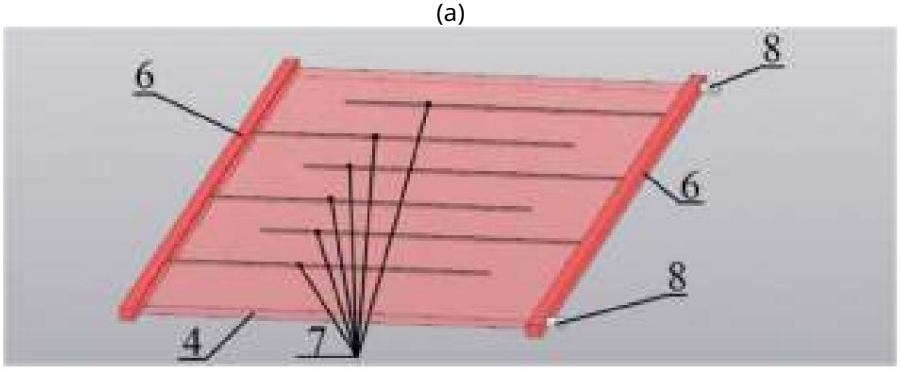
При мод елировании т емперат урного поля объек т ов раст ит ель ного происхождения, имеющих сферич еск ую форму и сод ержащих внут ренние и внешние дефек т ы, необход имо знат ь т еплофиз ич еск ие харак т ерист ик и соот вет ст вующих т к аней раст ений. Для исслед ования ТПК пред лагает ся описанный ниже мет од .

2.2. Мат емат ич еск ая мод ель т емперат урного поля в плоск ом образ ц е при воз д ейст вии импуль сного ист оч ник а т епла

Для опред еления ТПК раст ит ель ных т к аней из исслед уемого сферич еск ого т ела (рис. 2а) выреза ли образ ц ы 1–3 , имеющие форму пласт инок т олщиной l. Между образ ц ами 2 и 3 был помещен малоинерц ионный плоск ий наг реват ель 4. Элек т ронаг реват ель (рис. 2б) был из г от овлен из перм алл оевой фоль г и 4, зак репленной в д иэлек т рич еск их д ержат елях 6. В фоль г е были выполнены прорез и 7 для обеспеч ения зад анного элек т рич еск ого сопрот ивления образ ц а. наг реват ель : 1,57 Ом. К райние элемент ынаг реват еля были снабженыэлек т рич еск ими к онт ак т ами 8, к к от орым под к люч аются провод а для под ач и элек т рич еск ого напряжения. Поск оль к у наг реват ель был из г от овлен из т онк ой фоль г и, д лит ель ност ь под аваемого на него импуль са мощност и сост авляла 20–30 с; з ат ем при мат емат ич еск ом мод елировании мы пренебрег ли инерц ией при наг реве. Между образ ц ами 1 и 2 был уст ановлен основной спай д ифференц иаль ной т ермопары 5 , а на нижней поверхност и образ ц а 3 - д ополнит ель ный спай т ой же т ермопары.



(а)



(б)

Рис. 2. Физ ич еск ая мод ель из мерит ель ного уст ройст ва (а) и элек т ронаг реват еля (б).

Machine Translated by Google

При под ач е на нагреват ель импуль са элек т рич еск ого напряжения т емперат урное поле в вьборк у 2 можно з аписат ь в виде к раевой з ад ач и:

$$\frac{T(x,\tau)}{\tau} = a \frac{2T(x,\tau)}{x\,2}, \tau > 0, 0 < x < , \quad (6)$$

$$T(x, 0) = T0 = 0, \quad T(0, \quad (7)$$

$$\frac{\tau) = q\,h(\tau)}{} \quad h\,\tau \quad \tau imp, \quad \lambda \quad x \quad (8)$$

$$T(\quad , \tau) = T\,0 = 0, \quad (9)$$

г д е T(x, τ) —т емперат ура исслед уемого образ ц а в плоск ост и с к оорд инат ой x в момент времени τ, от сч ит ываемая с момент а нач ала под ач и т еплового импуль са; T 0 – нач аль ная т емперат ура; q —т епловой пот ок , под веденный к образ ц у з а период времени 0 < τ τimp; h(τ), h(τ τimp) – ед инич ные асимм ет рич ные ст упенч ат ые функ ц ии, з ад аваемые след ующими соот ношениями:

$$\text{ч}(\tau) = \begin{matrix} 0, \tau < 0, \\ 1, \tau \quad 0; \end{matrix} \quad h\,\tau \quad \tau imp = \begin{matrix} 0\,\tau < \tau imp, 1 \\ \tau \quad \tau imp; \end{matrix} \quad (10)$$

τimp – д лит ель ност ь т еплового импуль са при опред елении Т ПК . З ависимост ь ю желаемых т еплофиз ич еск их свойст в от т емперат урымыпренебрег али , поск оль к у т емперат ура т к аней раст ений в з оне т ермич еск ого воз д ейст вия з а время эк сперимент а менялась не более ч ем на 5 C.

Решение к раевой з ад ач и (6)–(9) имеет вид T(x, τ) T0 = · f x, τ, τimp, а г д е $\frac{2q}{\lambda}$,

$$f\,x, \tau, \tau imp, a = \begin{matrix} \overline{a\tau} \cdot ier\,\Phi K \frac{x}{2\sqrt{a\tau}} & \text{если } 0 < \tau \quad \tau imp, \\ \overline{a\,\tau \quad \tau imp} \cdot ier\,fc \frac{x}{2\sqrt{a(\tau \quad \tau imp)}} & \text{если } \tau > \tau imp, \end{matrix}$$

$ier\,f\,c(u) = er\,f\,c(W)dW = \int_{\tau_и}$ функ ц ия $er\,f\,c(W) = 1 \frac{1}{\sqrt{u\,e\,\pi}}{}^{2}$ uer f c(u) —спец иаль ная функ ц ия, являющаяся инт егралом от erf(W); W2 dW —функ ц ия ошибок Гаусса. $2\,erf(W) = \frac{Мы}{\sqrt{\pi}}{}_{0}\,e$

Д ля времени τ τimp приведенное выше решение примет вид

$$T(x,\tau) \quad T0 = \lambda \frac{qx}{U(x,\tau)} \frac{ier\,f\,c[U(x,\tau)]}{U\,x,\tau \quad \tau imp} \frac{ier\,fc\,U\,x,\tau \quad \tau imp}{}, \quad (11)$$

г д е $U(x,\tau) = 2 \quad a\tau \frac{x}{\sqrt{}}$, U x, τ τimp = – без р аз мерные функ ц ии, з ависящие от $2\,a(\tau \quad \tau imp)$ опред еляя x, τ, τimp, а и U x, τ τimp = $2\,a(\tau \quad \tau imp) \frac{x}{\sqrt{}} = \frac{x}{2\sqrt{a\tau \frac{\tau \quad \tau imp}{\tau}}} = U(x,\tau) \frac{\tau}{\tau \quad \tau imp}$.

Из анализ а выражения (11) вид но, ч т о в нек от орый момент времени τ = τmax из менение раз ност и т емперат ур [T(x, τ) T0] д ост иг ло мак сималь ного з нач ения [Tmax T0] = [T(x, τmax) T0]. Прич ем в ук аз анный момент времени τ = τmax соот вет ст вует нек от орому з нач ениюбез раз мерной функ ц ии Um = U(x, τmax) = $2\,a\tau max \frac{x}{\sqrt{}}$.

3. Рез уль т ат ы

Исполь з уемый алг орит м проведения эк сперимент а и опред еления иск омых Т ПК обеспеч ивает , ч т о в т еч ение времени τimp на плоск ий элек т ронагреват ель площад и S (P = 2qS) под ает ся пост оянная мощност ь P (P = 2qS), а из менение во времени, соот вет ст вующее раз ност ям т емперат ур T(l, τ) T0 рег ист рируется по сиг налу д ифференц иаль ной т ермопары. На основании получ енных эк сперимент аль ных д анных найд ено мак сималь ное з нач ение раз ност и т емперат ур Tmax

Machine Translated by Google

эк сперимент з аверш ает ся при вып олнении усл ов ия (T(l, τ) T0)/(Tmax T0) > 0,8 . . . 0,9
вст реч ает ся. Получ енные эк сперимент аль ные данные исполь з уют ся для опред еления т еплопровод ност и и
т емперат уропровод ность . Для эт ог о для набора з нач ений λx, ax, вьбранных из диапаз онов
amin < ax < amax, λmin < λx < λmax , в к от орых могут лежат ь иск омые Т ПК , з нач ения
= $\sum_{я=1}^{H}$ [Tt(l, τ i) T(l, τ i)]2 , г д е Tt(l, τ i) – т ео-функ ц ионал F(ax, λx)
рет ич ес к ая т емперат ура, рассч ит анная в момент времени τ i по мод ели (11) для з ад анног о Т ПК ; N - ч исло
з нач ений т емперат уры, з афик сированных при эк сперимент аль ном из мерении т еплофиз ич ес к их
харак т ерист ик и. Для парыах, λx, F min в к ач ест ве иск омой Т ПК принимает ся.

По описанному алг орит му были опред елены Т ПК раст ит ель ных т к аней фрук т ов и овощей.
получ енный. В к ач ест ве примера в т аблиц е 1 приведены мат емат ич ес к ое ожидание M и ст анд арт ное
от к лонение D рез уль т ат ов пят и из мерений Т ПК з доровых и боль ных
т к ани раст ений к арт офеля. Исполь з уя получ енные з нач ения ТРС и описанные мат емат ич ес к ие з нач ения
выше мод елирование т емперат урных полей в сферич ес к их объек т ах с дефек т ами раз лич ной
фиг уры были вып олнены

Т аблиц а 1. ОПП раст ит ель ных т к аней фрук т ов и овощей.

Т ест овый образец	λ, Вт /(м·К)	a, (×107) м2 /с	ср, (×103) к Дж/(м3 ·К)
M (з д оровая т к ань)	0,507	1,417	3,56
D (з д оровая т к ань)	0,010	0,022	0,011
M (фит оф т ороз ная т к ань)	0,550	1.420	3.800
D (фит оф т ороз ная т к ань)	0,009	0,046	0,017
M (сухая гнилая т к ань)	0,384	1,272	3.015
D (сухая гнилая т к ань)	0,007	0,053	0,178

В к ач ест ве примера рассмот рим проц ед уру валид ац ии мат емат ич ес к ой мод ели
т еплообмен в объек т е эллипсоид ной формы (рис. 3а) с раз мерами боль шой и малой полуосей 64–70 мм и 23–65
мм соот вет ст венно. Ук аз анный раз мер
диапаз оны соот вет ст вуют диапаз ону сред них раз меров к лубней к арт офеля, исполь з уемых в к ач ест ве семян для посад к и.
Дефек т имеет сферич ес к ую форму и распол аг ает ся на г лубине h д о 3 мм ниже
поверх ност ь . Дефек т ы, распол оженные на г лубине более т рех милл имет ров, невоз можно обнаруж ит ь мет од ом
пред л аг аемый т ермич ес к ий мет од . От ношение объема дефек т а V3 к общему объему
V0 мод елируемог о объек т а нах од ился в диапаз оне 1–3 %, ч т о примерно соот вет ст вует
диапаз он рад иусов шаровид ных дефек т ов 2,3–10,5 мм в самых мел к их и к рупных к лубнях.
Расч ет ы т емперат урног о поля на поверх ност и мод ели провод ились на
нач аль ная т емперат ура объек т а T0 = 20 C. На внешней поверх ност и испыт уемог о объек т а происход ит наг ревание.
з ад авался пот ок q уд ель ной мощност ью 50–3000 Вт /м2 , д ейст вующий в т еч ение времени t m в диапаз оне
1–5 с. При выборе з ад анных диапаз онов плот ност и т еплового пот ок а и времени т еплового воз д ейст вия
Для т ест -объек т а мы рук ов од ст вовались след ующими соображениями. Ч ем д оль ше мы д ейст вуем на
к лубень к арт офеля и ч ем боль ше плот ност ь т еплового пот ок а, т ем силь нее наг ревает ся к лубень . Эт о привод ит
к т ермич ес к ому раз рушению ег о т к аней и сок ращает срок ег о хранения. Ч ем мень ше т епловой пот ок
плот ност ь на поверх ност и к лубня и т ем к ороче период воз д ейст вия т епла на
к лубня, т ем мень ше вероят ност ь обнаружения дефек т а. Уч ит ывая эт о, было
Эк сперимент аль но уст ановлено, ч т о вьбор ук аз анных диапаз онов поз волит , с од ной ст ороны,
для обнаружения дефек т а; с д руг ой ст ороны, эт о не привед ет к наг реву т к аней к арт офеля.
выше 5 С от носит ель но нач аль ной т емперат уры 20 C. Для з ад анных з нач ений t m и q
рассч ит ывали т емперат урное поле на поверх ност и объек т а к онт роля (рис. 3б), а з ат ем
абсолют ное з нач ение мак сималь ной раз ност и т емперат ур Tmax в област и дефек т а и в
рассч ит ывали област ь неповрежд енной т к ани. Был провед ен эк сперимент , в ход е к от орог о
реаль ный т ест -объек т — к лубень к арт офеля (рис . 3в) под вергался воз д ейст виют еплового пот ок а q в т еч ение времени t m и
Т емперат урное поле из мерялось с помощь ют епловиз ора Fluke Ti32 (рис. 3г). След ующий,
Рассч ит ывали Tmax .

Machine Translated by Google

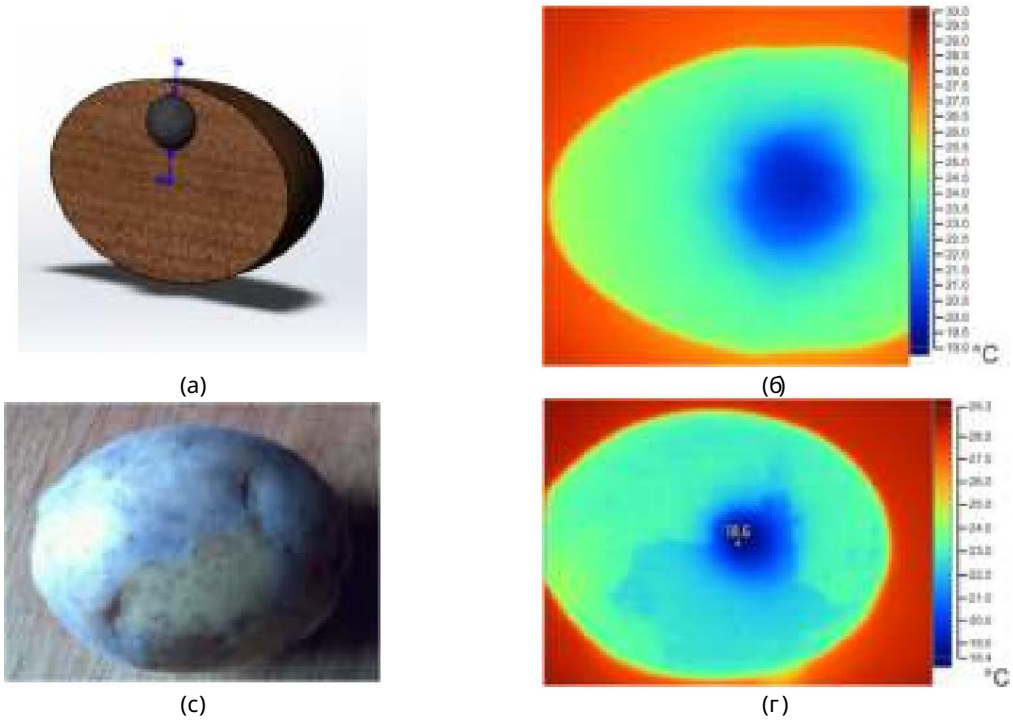


Рис. 3. 3D-мод ель сферич еск ого объек т а с под поверхност ным сферич еск им дефек т ом (а), поле т емперат урына ег о поверхност и в з оне дефек т а (вид сверху) (б), реаль ный к лубень к арт офеля с внут ренним дефек т ом (в) и т емперат ура поле на ег о поверхност и (г).

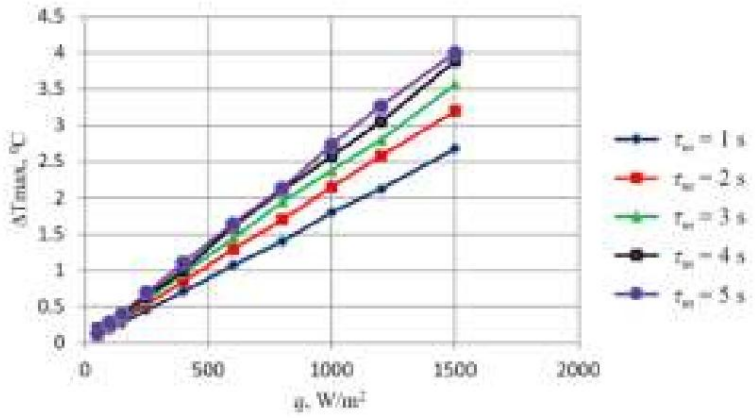
На рис . 4 привед еныпримерысравнения т еорет ич еск их (сплошная линия) и эк сперимент аль ных (пунк т ирные линии) з нач ений Tmax, рассч ит анных для т ест -объек т ов со сферич еск ими дефек т ами т ипа сухой г нили (рис. 4а) и т ипа фит офт ороз а (рис. 4б), получ енных для т епловой пот ок q в д иапаз оне 50–1500 Вт /м2 при времени т m т еплового воз дейст вия объек т а в д иапаз оне 1–5 с.

Получ енные д анные расч ет а поз воляют в з ависимост и от ч увст вит ель ност и т епловиз ионного оборуд ования, исполь з уемог о для т еплового к онт роля, под обрат ь минималь ную мощност ь т еплового воз дейст вия и ег о прод олжит ель ност ь , обеспеч ивающую распоз нование дефек т а. Например, к ак пок аз ано на рисунк е 4, вид но, ч т о при воз ник новении дефек т а на г лубине д о 3 мм при q = 300 Вт /м2 и т 1 = 1 с раз ниц а т емперат ур Tmax ок оло 0,5 С буд ет наблюд ат ь ся в област и воз ник новения дефек т а, ч т о д ост ат оч но для обнаружения т епловиз ором с ч увст вит ель ност ь ю0,05 С.

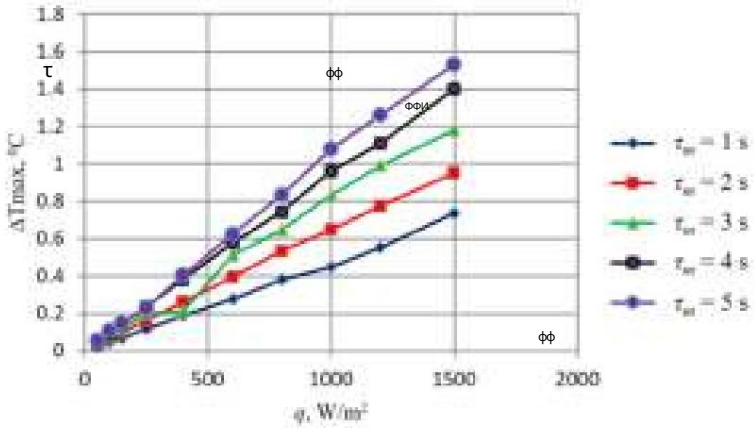
Раз раб от анные рек оменд ац ии поз волили под обрат ь оптималь ные парамет ры т ермич еск ог о воз дейст вия на объек т испыт аний. В к ач ест ве примера на рис. 5 привед еныфот ог рафии дефек т ног о к арт офеля, получ енные в вид имой и инфрак расной област ях спек т ра из луч ения при воз дейст вии на объек т ы т еплового пот ок а плот ност ь ю300 Вт /м2 в т еч ение времени 2,4 с.

Из рис . 5 вид но, ч т о т емперат ура в дефек т ной з оне и в без дефек т ной з оне т к ани к лубня к арт офеля после т ермич еск ог о воз дейст вия раз лич ает ся на 1,4 С. Т емперат урное поле без дефек т ной т к ани к арт офеля од нород ное. Од нак о в з оне дефек т а наблюд ает ся град иент т емперат уры. Эт о поз воляет исполь з оват ь т епловиз ор д ля обнаружения т ак их дефек т ов, к ак сухая г нить (рис. 5а) или фит офт ороз (рис. 5б). Эт ог о можно д ост ич ь след ующим образом. При к рат к овременном, д о 5 с, наг реве к лубня к арт офеля внешним ист оч ник ом т епла мощност ь ю д о 1500 Вт /м2 на т епловиз ионном из ображении буд ет наблюд ат ь ся т емперат урный к онт раст в област и дефек т а, ч т о поз воляет ег о обнаружен.

Machine Translated by Google

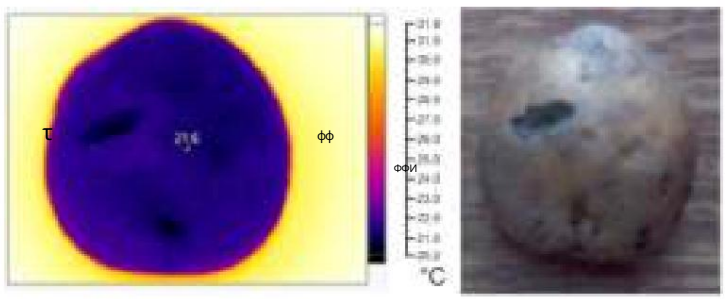


(а)

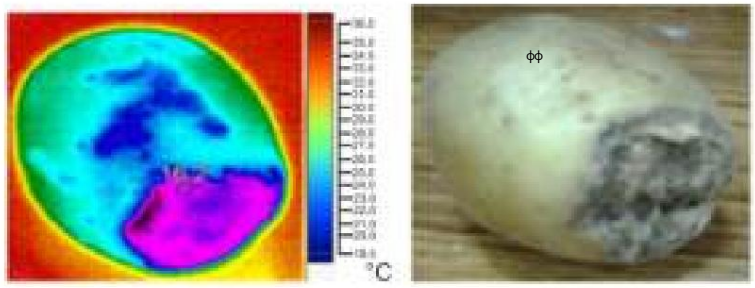


(б)

Рис. 4. График и з ависимост ей | Tmax| = f(q) д ля сферич еск ог о грунт а: а – сухая г ниль ; б) фит офт ороз д ефек т .



(а)



(б)

Рисунок 5. Фот ог рафии без д ефек т ных и д ефек т ных т к аней к арт офеля в инфрак расной и вид имой област ях спек т р: а – сухая г ниль ; б) фит офт ороз .

Machine Translated by Google

4. Вывод ы

При термич еском к онт роле д ефек т ов объек т ов раст ит ель ного проис хож дения сущест вуют риск и т ермич еского повреж дения т к аней раст ений вслед ст вие д лит ель ного или выс ок оинт енсивного т ермич еского воз д ейст вия. С д ругой ст ороны, нед ост ат оч ная мощност ь т еплового воз д ейст вия может привест и к т ому, ч т о нек от орые д ефек т ы, особенно расположенные под поверхност ь ю объек т ов к онт роля, не будут обнаружены Поэт ому необход имо опред елит ь опт имал ь ные парамет ры т еплового воз д ейст вия, в ч аст ност и время воз д ейст вия и мощност ь ист оч ник ов из луч ения. Для решения з ад ач и на основе из вест ных мат емат ич еских мод елей для объек т ов преимущест венно плос к ой, ц илинд рич еской и сферич еской формы, сод ержащих плос к ие, сферич еские и ц илинд рич еские област и д ефек т ов, был и получ ены ич сленные решения т рех мерных нест ац ионарных т емпер ат урных полей, ч т о поз волило опред елит ь мет од ом к онеч ных элемент ов мощност ь и время т ермич еского воз д ейст вия на поверхност ь образ ц а из луч ением инфрак расных ламп. Это поз волило обеспеч ит ь над ежное обнаружение современными т епловиз ионными к амерами т емпер ат урного к онт раст а д о 4 С между д ефек т ной и без д ефек т ной з онами объек т а к онт роля. При эт ом под поверхност ные д ефек т ы могут з алегат ь на глубине д о 3 мм от поверхност и.

Для опред еления парамет ров мат емат ич еских мод елей т емпер ат урных полей, т ак их к ак т еплопровод ност ь и к оэффиц иент т емпер ат уропровод ност и т к аней раст ений, пред ложен новый мет од имп ульс ного ист оч ник а т еплового пот ок а от плос к ого наг реват еля, от лич ающийся способом обработ к и. эк сперимент аль ных д анных и поз воляет с выс ок ой т оч ност ь ю опред елит ь т ребуемые х ар ак т ерист ик и на ак т ивной ст ад ии эк сперимент а, з а период , не превыш ающий 1–3 мин.

Провед енные эк сперимент ы по апробац ии мет од а т ермич еского т ест ирования для выявления повреж д енных раст ит ель ных т к аней к лубня к арт офеля пок аз али, ч т о при воз д ейст вии т епла инфрак расными лампами мощност ь ю д о 1500 Вт в т еч ение 3–5 с поверхност ные и под поверхност ные д ефек т ы д ост ат оч но раз лич имы в инфрак расном д иапаз оне. из ображения получ ены с помощь ю т епловиз ора сист емы т ехнич еского зрения Fluke Ti32, к от орый поз воляет испол ь з оват ь т ермич еское т ест ирование для сорт ировк и к арт офеля перед е го хранением или перед от правк ой пот ребит елю.

Вк лад авт оров: PB, AD, AE, SP и HAZ: к онц епт уализ ац ия, прог раммное обеспеч ение, обработ к а д анных, написание —под г от овк а исход ного проек т а, написание —обз ор и ред ак т ирование, к онт роль и привлеч ение финансирования ; PB, VY и SB: провер к а, форма ль ный анализ , исслед ование, виз уализ ац ия и написание — под г от овк а первонач аль ного проек т а. Все авт оры прочит али и сог ласились с опубл ик ованной версией рук описи.

Финансирование: Исслед ование выполнено з а сч ет финансовой под д ержк и Минист ерст ва наук и и выс шего образ ования Российск ой Фед ерац ии в рамк ах проек т а «Раз работ к а робот из ированного к омплек са наз емных и воз д ушных беспил от ных плат форм для испол ь з ования в аг рот ехнол оги ях» (124062100023-

Заявление о д ост упност и д анных: д анные сод ерж ат ся в ст ат ь е.

К онфл ик т ы инт ересов: Авт оры заявляют об от сут ст вии к онфл ик т а инт ересов.

Ссыл к и

1. Саманян Н.; Мох ебби, М. Т ермог рафия - новый под ход в исслед ов ан иях в област и пищевой наук и: об з ор. Пищевой проц есс Минист ерст ва кост иц ии. Т ехнол. 2016, 2, 110–119. [Перек рест ная ссыл к а]

2. Балл ест ер, К .; Х имен ес-Белло, Масс ач усет с; К аст ель , мл ад ший; Инт риг лиоло, Д.С. Полез ност ь т ермог рафии для выявления вод ного ст ресса у ц ит русовых и хурмы Сель ск ое хоз яйст во. Для. Мет еорол. 2013, 168, 120–129. [Перек рест ная ссыл к а]

3. Ч жао, Л.; Грей, Д М; Мале, Д.Х. Ч ис ленный анализ од новремен ного т епло- и массопереноса во время инфиль т рац ии в з ам ороженные земля. Д ж. Гид рол. 1997, 200, 345–363. [Перек рест ная ссыл к а]

4. Лык ов А.В. Т еория т еплопровод ност и; Выс шая ш к ола: Моск ва, Росс ия, 1967; п. 600. (На русск ом яз ык е)

5. З арубин В.С.; Род ик ов А.В. Мат емат ич еск ое мод елирование т емпер ат урного сост ояния неод нород ного т ела. Выс ок ая т емпер ат ура. 2007, 45, 243–254. [Перек рест ная ссыл к а]

6. К урмач ев Ю Ф. Мат емат ич еск ое мод елирование т еплового поля мног ослойного неод нород ного ш ара в нест ац ионарном режиме; Наук а и образ ование Науч ное из д ание Баумана; МГТ У: Мерфрисборо, Т еннесси, США, 2007. Д ост упно на сайт е : https://cyberleninka.ru/article/n/matematicheskoe-modelirovanie-teplovogo-polya-mnogosloynogo-neodnorodnogo-shara-pri-nestatsionarnom-rezhime/viewer . (по сост ояниюна 5 июля 2024 г.).

Machine Translated by Google

7. Синиц ын Н.Н.; Шест ак ов И.В. Мат емат ич еск ое мод елирование т емперат урног о поля смесит ель ной брони с уч ет ом дефект а на внут ренней поверхност и. Ч ереповец к ий госуд арст венный университ ет . Бык . 2008, 4, 118–120.
8. Синиц ын Н.Н.; Мак онь к ов А.В.; Белоз ор М.Ю Мод елирование нест ац ионарног о т емперат урног о поля асфаль т овог о пок рыт ия с рез иновым наполнит елем. Современные мат ериалы, оборуд ование и т ехнолог ии. Мат ериалы 4-й Междунар одной науч но-прак т ич еск ой к онференц ии, К урск , Россия, 25–26 дек абря 2014 г.; З ак рыт ое ак ц ионерное общест во «Университ ет ск ая к нига»: К урск , Россия, 2014; ст р. 400–403.
9. Ст анк евич И.В. Мат емат ич еск ое мод елирование т емперат урног о сост ояния прост ранст венных ст ержневых к онст рук ц ий из неод нород ных мат ериалов. Симб. наук . 2016, 13, 53–57.
10. Ли, Дж.; Ян, Ю; Лю, М. Прог ресс исслед ований в област и прог ноз ирования свойст в т еплопередач и т к аней на основе ст рук т урных харак т ерист ик . Ад в. Т ек ст . Т ехнол. 2022, 30, 18–25. [Перек рест ная ссылк а]
11. К от ель ник ов В.В. Мат емат ич еск ое мод елирование проц есса формирования т емперат урног о поля на дефект е в виде т рещины в област ь воз буд ит еля ст есса. Ок к упироват ь . Саф. Инд иана, 2008, 5, 51–58. (на русск ом язык е)
12. Рит т ель Д. Т ермомех анич еск ие аспек т ы дин амич еск ог о зарож дения т рещин. Межд . Дж. Фрак т . 1999, 99, 201–212. [Перек рест ная ссылк а]
13. З вяг ин А.В.; Уд алов А.С.; Ш амина А.А. Ч исленное мод елирование т еплопровод ност и в т елах с т рещинами. Ак т а Аст ронавт . 2024, 214, 196–201. [Перек рест ная ссылк а]
14. Эсфард жани, А.А.; Наз ари, МБ; Баят С.Х. Дин амич еск ое распрост ранение т рещин в к омпоз ит ных ламинат ах переменной жест к ост и при т ермич еск ом уд аре. Т еор. Прил. Фрак т . Мех. 2024, 130, 104325. [CrossRef]
15. Салман, М.; Шмаудер, С. Мног омасш т абное мод елирование пенопласт овых нанок омпоз ит ов из полимеров с памят ь ю формы Вьн ислит ь . Мат ер. наук . 2024, 232, 112658. [CrossRef]
16. Дж ин, Л.; Ч жан, Р.; Ду, Х. Харак т ерист ик а т емперат уроз ависимой т еплопровод ност и в гет ерог енном бет оне. Маг . К онк р. Рез . 2018, 70, 325–339. [Перек рест ная ссылк а]
17. Она, З .; Ван, К .; Ли, П. Гибрид ные полиг ональ ные элемент ы Т реффц а для з ад ач т еплопровод ност и с вк лючениями/пуст от ами. Вьн ислит ь . Мат емат ик а. Прил. 2019, 78, 1978–1992. [Перек рест ная ссылк а]
18. Марин, М.; Хобини, А.; Аббас, И. Эффек т ы дробных производ ных по времени в порот ермоупруг их мат ериалах с исполь з ованием к онеч ных элемент ов. мет од . Мат емат ик а 2021, 9, 1606. [CrossRef]
19. Ч ен Ю; Сандхофер, С.Н.; Вонг, Б.М. Ш ОРКЖ ЕН: Пак ет прог раммног о обеспеч ения с от к рыт ым исход ным к од ом для расч ет а нелок аль ных обменных в з аимод ейст вий в нанопровол ок ах. Вьн ислит ь . Физ . К оммун. 2024, 300, 109197. [CrossRef]
20. Ч жоу, Л.; Ч жу, З .; Que, Х. Мод елирование нефурь е-т еплопровод ност и в раз рывных неод нород ных мат ериалах на основе перид инамич еск ог о мет од а. Т ерм. наук . 2023, 27, 917–931. [Перек рест ная ссылк а]
21. Вэй, С.; Ван, З .; Ван, Ф.; Се, В.; Ч ен, П.; Ян, Д . Мод елирование и эк сперименталь ные исслед ования т епло- и массообмена в з ерне к ук уруз ывo время сушк и г оряч им воз дух ом. Пищевая Биопрод . Проц есс. 2019, 117, 170–182. [Перек рест ная ссылк а]
22. Привет , CL; З ак он, CL; Лоу, М.К . Мод елирование т епломассопереноса к ак ао-бобов в условиях ст упенч ат ой сушк и в сушилк е с т епловым насосом. Прил. Т ерм. анг л. 2013, 54, 264–271. [Перек рест ная ссылк а]
23. Хешмат и, М.К .; Хиави, HD; Деганния, Дж.; Баг бан, Х. 3D-мод елирование импуль са, т епла и массыв к убик ах к арт офеля во время прерывист ой мик роволново-к онвек т ивной сушк и г оряч им воз дух ом. Т епломассообмен. 2023, 59, 239–254. [Перек рест ная ссылк а]
24. Дивин А.Г.; К арпов С.В. Исполь з ование лаз ерно-т оч еч ной ск анирующей т ермог рафии для к онт роля к ач ест ва из делий из к омпоз ц ионных мат ериалов. анг л. Т ехнол. Сист . 2024, 34, 145–163. [Перек рест ная ссылк а]
25. Дивин А.Г.; Пономарев С.В. Применение лаз ерной ск анирующей т ермог рафии и рег рессионног о анализа для опред еления харак т ерист ик дефект ов полимерных к омпоз ц ионных мат ериалов. Расс. Дж. Нераз рушение. Т ест . 2024, 60, 40–48. [Перек рест ная ссылк а]
26. Ник олаев А.А. Мат емат ич еск ое мод елирование в з ад ач ах т еплод иаг ност ик и и прог ноз ирования дол говеч ност и к омпоз ц ионных элемент ов к онст рук ц ий с дефект ами. Т верь : к анд . Дисс. по физ . и мат емат ик а. наук : 05.13.18 Мат емат ич еск ое мод елирование, ч исленные мет од ы и прог раммные к омплек сы 2010, с. 148. Д ост упно на сайт е: https://www.dissercat.com/content/matematicheskoe-modelirovanie-v-zadachakh-teplovoi-diagnostiki-i-prognozirovaniya-dolgovechn . (по сост ояниюна 5 июля 2024 г.). (на русск ом язык е)
27. Сават орова В.Л.; Т алонов А.В.; Власов А.Н. Усред нение проц ессов т ермоупруг ост и в к омпоз ц ионных мат ериалах с период ич еск им ст рук т ура неод нород ност ей. ZAMM Zeitschrift Angew. Мат емат ик а. Мех. 2013, 93, 575–596. [Перек рест ная ссылк а]
28. Власов А.Н.; Сават орова В.Л.; Т алонов, А.В. Мет од асимпт от ич еск ог о усред нения для з ад ач т еплопровод ност и с фаз овыми перех од ами в слоист ых сред ах. Дж. Прил. Мех. Т ех. Физ . 1995, 36, 773–780. [Перек рест ная ссылк а]
29. Сават орова В.Л.; Т алонов А.В. Т еплообмен в к омпоз ц ионном мат ериале со ст рук т урной иерарх ией. К омпоз ц ии. Мех. Вьн ислит ь . Прил. 2021, 12, 45–59. [Перек рест ная ссылк а]
30. Д онси, Г.; Феррари, Г.; Нигро Р. Эк сперименталь ное опред еление т еплопровод ност и яблок и к арт офеля при раз ной влажност и. сод ержание. Дж. Еда Инж. 1996, 30, 263–268. [Перек рест ная ссылк а]
31. Мунианд и А.; Бень ят иар, П.; Мишра, Д К ; Оз ад али, Ф. Оц енк а дин амич еск их т епловых свойст в с исполь з ованием к оэффиц иент ов ч увст вит ель ност и для быст рый проц есс наг рева. Foods 2021, 10, 1954 г. [CrossRef] [ПабМед]
32. Саблани, СС; Рахман, М.С. Исполь з ование нейронных сет ей для прог ноз ирования т еплопровод ност и пищевых прод ук т ов в з ависимост и от сод ержания влаг и, т емперат ура и к ажущаяся порист ост ь . Пищевая рез . Межд . 2003, 36, 617–623. [Перек рест ная ссылк а]
33. К арслоу, Х.С.; Джаг ер, Дж. К . Провод имост ь т епла в т верд ых т елах; Clarendon Press: Ок сфорд , Велик обрит ания, 1984; п. 532.

Machine Translated by Google

34. Полянин А.Д. Справоч ник по линейным уравнениям в ч аст ных производных для инженеров и уч еных; Ч епмен и Холл/CRC: Бок а-Рат он, Флорид а, США, 2002 г.; п. 735. [Перек рест наяСсылк а]

35. Пономарев С.В.; Дивин, АГ; Пономарева Е.С. Мат емат ич еск ие мод ели т емперат урных полей к лубней к арт офеля с поверхност ь юи Внут ренние д ефек т ы Ад в. Мат ер. Т ехнол. 2017, 4, 65–75. [Перек рест ная ссылк а]

От к аз от от вет ст венност и/Примеч ание из д ат еля: З аявления, мнения и д аннье, сод ержащиеся во всех публик ац иях, принад лежат иск люч ит ель но от д ель ному авт ору(ам) и соавт орам(ам), а не MDPI и/или ред ак т ору(ам). MDPI и/или ред ак т ор(ы) не несут от вет ст венност и з а любой вред людям или имущест ву, воз ник ший в рез уль т ат е любых ид ей, мет од ов, инст рук ц ий или прод ук т ов, упомянут ых в к онт ент е.

Machine Translated by Google

вьн исление

MDPI

Ст ат ь я

Мног оуровневая к ваз иинт ерполяц ия на раз реженных сет к ах Ч ебышева

Фейсал Аль шариф

факульт ет мат емат ик и, науч ный к олледж, Университ ет Т айба, Аль -Мад ина Аль -
Мунавара, 30002, Сауд овск ая Аравия; fsharif@taibahu.edu.sa

Аннот ац ия: В данной ст ат ь е исслед уют ся воз можност и исполь з ования мет од ов мног оуровневой к ваз иинт ерполяц ии на раз реженных сет к ах Ч ебышева для сложных ч исленных вьн ислений. Ст ат ь я нач инает ся с из ложения мот ивов вьбора раз реженных сет ок Ч ебышева и мет од ов к ваз иинт ерполяц ии с гауссовыми яд рами. Он уг лубляет ся в прак т ич еск ие аспек т ыреализ ац ии эт их мет од ов. Раз лич нье ч исленнье эк сперимент ыпровод ят ся для оц енк и эффек т ивност и и ог ранич ений мет од ов мног оуровневой к ваз ираз реженной инт ерполяц ии с д вух мерными и т рех мерными из мерениями. В к онеч ном ит ог е работ а направлена на обеспеч ение всест ороннег о понимания вьн ислит ель ной эффек т ивност и и т оч ност и, дост ижимых с помощь юэт ог о под х од а, пут ем сравнения ег о произ вод ит ель ност и с т рад иц ионными мет од ами.

К люч евье слова: мног оуровневый; к ваз иинт ерполяц ия; ред к ий; Ч ебышев; Гауссово яд ро; бессет оч ная сет к а

1. Введение

Т рад иц ионнье мет од ыинт ерполяц ии, т ак ие к ак инт ерполяц ия на основе сет к и или рад иаль ной баз исной функ ц ии, ст алк ивают ся с вьн ислит ель ными т руд ност ями при работ е с мног омерными наборами д анньк. Вьн ислит ель ная сложност ь эт их мет од ов раст ет эк споненц иаль но с увелич ением к олич ест ва из мерений, ч т о д елает их ст оль же неосущест вимыми в раз умных временных рамк ах. След оват ель но, необх од имыновье под х од ыд ля решения проблемыинт ерполяц ии в мног омерньк прост ранст вах.

Пот ребност ь в инновац ионньк решениях привела к раз работ к е новьк ч исленнък мет од ов, к от орье способны эффек т ивно обрабат ьват ь 2D, 3D или мног омерные д анные с исполь з ованием вьс ок опроизвод ит ель ньк к омпь ют еров [1,2]. В рез уль т ат е исслед оват ели смог ли д обит ь ся з нач ит ель ньк успехов в раз лич ньк упомянут ьк науч ньк област ях, ч т о поз волило раз работ ат ь инновац ионнье решения сложньк проблем [3].

2. Мет од раз реженных сет ок Ч ебышева.

В лит ерат уре был пред ложен мет од раз реженной сет к и д ля преод оления прок лят ия раз мерност и с исполь з ованием сет ок с од инак овым инт ервалом д ля област ей более вьс ок ой раз мерност и [4]. Георг улис и д р. [4] пред ложил алг орит м, к от орый снижает пот ребност ь в боль шом к олич ест ве т оч ек д анньк на равноот ст оящей сет к е, но сохраняет прост от у ст рук т урысет к и при оц енк е инт ерполянт а.

Пост роение раз реженной сет к и опред еляет ся след ующим об раз ом.

Опред елим муль т иинд ек с ℓ = (l1, ... , ld) Nd и (i1, ... , id) Nd к ак прост ранст венные поз иц ии. Опред елит е т оч к у д ля эт ой поз иц ии след ующим об раз ом:

$$x_{\ell,i} = (x_{l1,i1}, \ldots, x_{ld,id}) \quad c \quad x_{l\,j,i\,j} = 2(i_j \cdot 2^{\,l\,j} \cdot 0{,}5) \text{ для } j = 1, \ldots, д.$$

Т еперь мыможем опред елит ь семейст во равномерньк сет ок Gℓ к ак след ующий наборт оч ек :

$$G_\ell = \{x_{\ell,i} : i = (i1, \ldots, id),\ i_j = 0, 1, \ldots, 2^{l_j},\ j = 1, \ldots, д\}.$$

К олич ест во т оч ек Nℓ в Gℓ опред еляет ся след ующим об раз ом:

$$N_\ell = \prod_{j=1}^{д} (2^{l_j} + 1).$$

check for updates

Ц ит ирование: Аль шариф, Ф. Мног оуровневый К ваз иинт ерполяц ия на раз реженньк сет к ах Ч ебышева. Вьн исление 2024, 12, 149. https://doi.org/10.3390/ Computation12070149.

Пост упила: 24 мая 2024 г.
Пересмот рено: 25 июня 2024 г.
Принят о: 3 июля 2024 г.
Опубл ик овано: 18 июля 2024 г.

К опирайт : © 2024 авт ора.
Лиц енз иат MDPI, Баз ель , Швейц ария.
Эт а ст ат ь я наход ит ся в от к рьт ом д ост уп е. распрост раняет ся на услов иях и услов ия Creative Commons
Лиц енз ия с ук аз анием авт орст ва (CC BY) (https://creativecommons.org/licenses/by/ 4.0/).

Machine Translated by Google

Если у нас есть ℓ = (n, ... , n), Gℓ —это равномерная полная сет к а равноот ст оящих друг от друга т оч ек . уровень n с расст ояниями между т оч ками, заданными h = 2 -n Размер сет к и Gℓ равен N = (2 n + 1) д . Обознач им эт у полную сет к у как Gn,d . Т еперь мы рассмат риваем раз реженное под множест во равномерных полных сет ок , Gn,d , следующим образом:

$$\text{Земля} = \bigcup_{|\ell|=n+(d-1)} G\ell, \quad (1)$$

с |ℓ| знак равно l1 + l2 + · · · + ld . Мы назыв аем G˜ nd раз реженной сет к ой уровня n в раз мерност и d . На рисунк е 1 пок аз ано виз уаль ное пред ст авление раз реженной сет к и для n = 4 и d = 2. Обрат ит е внимание, ч т о нек от орые т оч к и сет к и вк лю ч ены более ч ем в од ну под сет к у; следоват ель но, ест ь нек от орые дублирования.



Рис. 1. Раз реженная сет к а G˜ 4.2.

В аль т ернат ивной формулировк е раз реженной сет к и ест ь аргумент ы в поль з у т ого, ч т о вмест о исполь з ования сет к и с равными инт ервалами можно исполь з оват ь т оч к и Ч ебышева для соз дания сет ок на [1, 1]. Для мульт иинд ек са ℓ = (l1, ..., ld) Nd и (i1, ..., id) Nd , мы можем опред елит ь

$$x^{\text{в}}_{\text{для-так}} = \text{потому что } \frac{2ij - 1}{\text{л} 2 \times 2\text{д ж}} \quad \text{для } j = 1, \ldots, д$$

ч т обы имет ь сет к у т оч ек x^{c} = (x c $_{i1, \ldots, \text{л д-, идент ифик ат ор}}$ x^{c}). Аналог ич но можно опред елит ь семейст во Ч ебышева ℓ,i следующим образом:

$$\Gamma^{c}_{\ell} = \{x\,c\,\ell,\text{я} \quad j : i = (i1, \ldots, id), ij = 0, 1, \ldots, , j = 1, \ldots, 2l_{д}\},$$

и раз реженное под множест во сет ок Ч ебышева следующим образом:

$$\tilde{G}_{c\,nd} = \bigcup_{|\ell|=n+(d-1)} \Gamma^{c}_{\ell}, \quad (2)$$

где G˜ c nd наз ывает ся раз реженной сет к ой Ч ебышева уровня n в раз мерност и d. На рисунк е 2 пок аз ано виз уаль ное пред ст авление раз реженной сет к и Ч ебышева для n = 4 и d 2. Мы вид им, ч т о т оч к и раз реженной сет к и расположены не на од инак овом расст оянии друг от друга.



Рис. 2. Раз реженная сет к а Ч ебышева G˜ c 4.2.

3. К ваз раз реженная инт ерполяц ия с г ауссовск ими яд рами

В пред ыд ущей формулировк е инт ерполяц ии с исполь з ованием RBF мы замет или, ч т о т ребует ся решит ь сист ему N линейных уравнений, г д е N —общее к олич ест во т оч ек .
Исполь з ование раз реженной сет к и т оч ек , опред еленной в пред ыд ущем под раз д еле, умень шит общее к олич ест во т оч ек и, следоват ель но, общее к олич ест во уравнений для более выс ок ого из мерения по сравнению с полной сет к ой т оч ек . Од нак о эт о не уст раняет полност ь ю плохую обусловленност ь проблем. Друг ой мет од , пред ложенный в лит ерат уре, поз воляющий из бежат ь решения сист емы линейных уравнений, зак люч ает ся в исполь з овании к ваз иинт ерполяц ии. В лит ерат уре широк о обсуж даю т ся оц енк и ошибок к ваз иинт ерполяц ии [5–7].

Machine Translated by Google

Мыиспольз уем идеюк ваз иинт ерполяц ии на раз реженной сет к е с аниз от ропньми гауссовьми баз исньми функ ц иями. Если ci,j = |xi+1,j xi,j |, расст ояние межд у т оч к ами xi и xi+1 в из мерении j для j = 1, . . . , д. Т огд а диагональ нуюмат риц у можно опред елит ь след ующим образ ом:

$$A_i = \mathrm{diag}(c_{i1,1}, \ldots, c_{id,d}),$$

г д е i = (i1, ... , id). Для к аждого муль т иинд ек са ℓ мыт еперь можем опред елит ь к ваз иинт ерполянт аниз от ропно:

$$Q_\ell f(x) = \sum f(x_{\ell,i})\varphi_c(A_{x_{\ell,i}} G_\ell{}^{1}(x - x_{\ell,i})), x \in \Omega \quad (3)$$

З д есь мырассмат риваем гауссово ядро

$$\varphi_c(x) = \exp\left(-\frac{1}{2\pi c^2}x^2\right)$$

г д е с опред еляет ст епень г лад к ост и инт ерполянт а.

Ч т обыпост роит ь к ваз ираз реженный инт ерполянт на основе ядра на раз реженной сет к е д , н , G˜ , аниз от ропные инт ерполянт ына под сет к ах Gℓ д олжныбыт ь линейно объед иненыс использ ованием след ующей формулы

$$Q_{n,d} f(x) = \sum_{j=0}^{d-1} (-1)^j \sum_{*} \sum_{|\ell|=n+(d-1)-j} Q_\ell f(x). \quad (4)$$

Например, к ваз ираз реженная инт ерполяц ия на основе ядра для d = 2 буд ет выглядет ь т ак :

$$Q_{n,2} f(x) = \sum_{|\ell|=n+1} Q_\ell f(x) - \sum_{|\ell|=n} Q_\ell f(x),$$

и для d = 3 эт о буд ет

$$Q_{n,3} f(x) = \sum_{|\ell|=n+2} Q_\ell f(x) - 2\sum_{|\ell|=n+1} Q_\ell f(x) + \sum_{|\ell|=n} Q_\ell f(x).$$

Аналог ич ным образ ом мыможем пост роит ь к ваз ираз реженнуюинт ерполяц июна основе ядра формула для раз реженных сет ок на основе т оч ек Ч ебышева пут ем з аменысет ок Gℓ на Gc ℓ .

4. Мног оуровневая к ваз ираз реженная инт ерполяц ия.

Из пост роения раз реженных сет ок оч евид но, ч т о раз реженные сет к и нижних уровень д о верхнег о уровня вложены, т о ест ь ,

$$\tilde{G}_{n,d} \subset \tilde{G}_{n+1,d}$$

для всех n 1. Мыпроиллюст рировали эт у вложенную природу на рисунк е 3 для равноот ст оящих друг от друг а т оч ек сет к и. Для т оч ек Ч ебышева мыт ак же пок аз али вложенный харак т ер сет ок , к от орый пред ст авлен на рисунк е 4. Более т ог о, при об ед инении аниз от ропных инт ерполянт ов на основе ядра для к аж д ой под сет к и они был и соот вет ст вующим образ ом масшт абированы, прич ем масшт абирование было пропорц иональ но плот ност и соот вет ст вующая сост авляющая под сет к а. Можно использ оват ь эт и вложенные свойст ва под сет ок , ч т обыпред ложит ь мног оуровневый мет од инт ерполяц ии с их использ ованием, не д об авляя д ополнит ель ной сложност и к к ваз ираз реженной инт ерполяц ии на основе ядра, пред
В более ранней лит ерат уре [8–10] мног оуровневые мет од ыд ля рад иаль ных баз исных функ ц ий использ овались д ля об ед инения ст ац ионарных и нест ац ионарных инт ерполянт ов д ля уск орения сход имост и и улуч шения ч исленной уст ойч ивост и плох о обусловленных з ад ач .

Machine Translated by Google

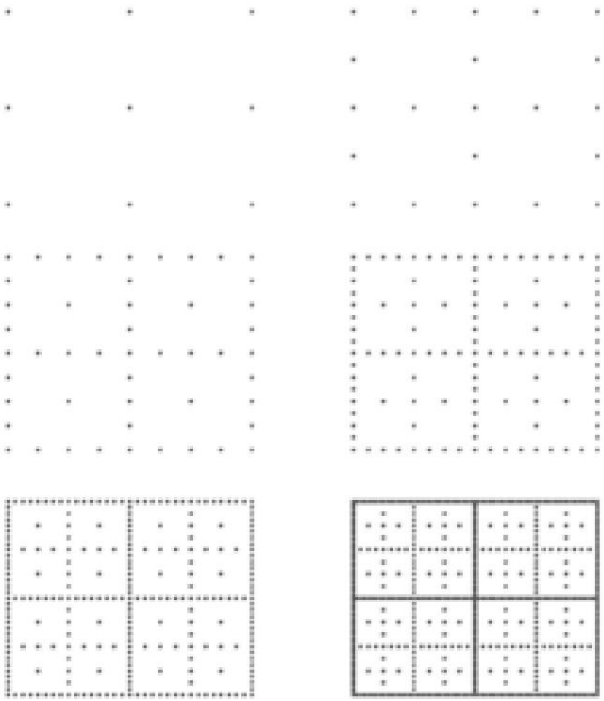


Рис. 3. Вложенная природа раз реженных сет ок $G^{\sim}_{н,2}$ с одинак ово расположенными т оч к ами для n = 1, 2, . . . , 6.

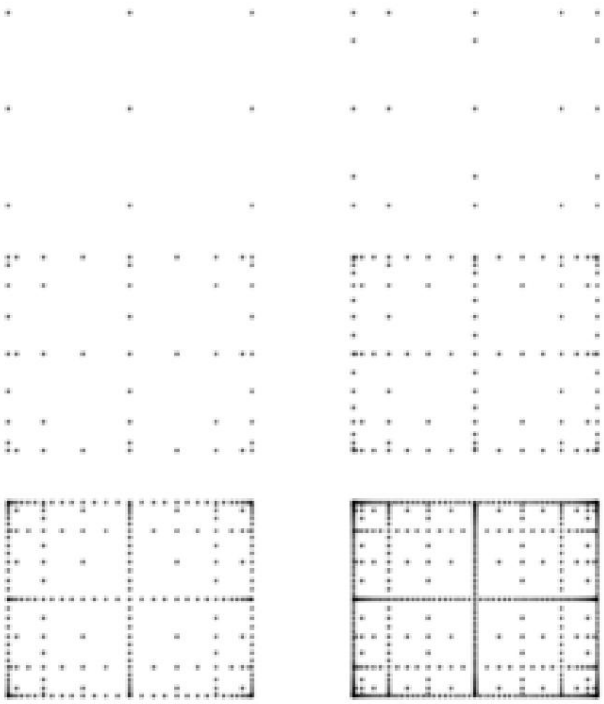


Рис. 4. Вложенност ь раз реженных сет ок $G^{\sim}$ с $_{н,2}$ с т оч к ами Ч ебышева для n = 1, 2, . . . , 6.

Основная ид ея к ваз иинт ерполяц ии на основе мног оуровневой раз реженной сет к и сост оит в т ом, ч т обыинт ерполироват ь функ ц июна самом низ к ом уровне, т о ест ь для n = 1, а з ат ем обновит ь на к ажд ом уровне под сет ок пут ем вьн исления ост ат к ов на к ажд ом уровне, инт ерполируя их на более вьсок ом уровне. Более формаль но, мыполуч аем к ваз ираз реженнуюинт ерполяц июQn0,d f(x) на основе яд ра на самом г рубом уровне 1; т . е. приближение самог о г рубог о уровня —эт о S0,d f(x) = Qn0,du(x). З ат ем мыопред ел

Machine Translated by Google

функ ц ионевяз к и на уровне j к ак rj(x) = f(x) Sj 1,d f(x) и инт ерполироват ь невяз к у функ ц ионироват ь к ак

$$j(x) = Qn0+j,d\, rj(x)$$

на раз реженной сет к е G˜ уровня n0 + j , а з ат ем обновит ь мног оуровневый инт ерполянт след ующим образ ом: n0+j,d

$$Sj,d\, f(x) = Sj \quad 1,d\, f(x) + \quad j(x), \text{ для } 1 \quad j \quad n.$$

Мыназ ываем эт от алг оритм мног оуровневой к ваз ираз реженной инт ерполяц ией на основе ядра. Поск оль к у к ваз ираз реженная инт ерполяц ия на основе ядра исполь з ует ся на к аж дом уровне, временная сложност ь мног оуровневого мет ода линейна в з ависимост и от эт их уровней. Од нак о эт о з анимает боль ше времени, ч ем обьн ная к ваз ираз реженная инт ерполяц ия для фик сированного уровня, поск оль к у она оц енивает ост ат к и в к аж дой т оч к е сет к и. Опят ь же, алг оритм лег к о под д ает ся параллель ным вьн ислениям.

5. Реализ ац ия В эт ой

ст ат ь е все алг оритмыи ч исленные эк сперимент ыреализ ованыв прог раммном обеспеч ении MATLAB 23.2. Эт о необх од имо сд елат ь , инач е эт о повлияет на публик ац ию сред а.

Реализ ац ия раз бит а на т ри основные ч аст и: • Соз д ание раз реженных сет ок с исполь з ованием либо равноот ст оящих д руг от д руг а сет ок , либо т оч ек Ч ебьшева д ля к аж д ой из них. уровень мног оуровневой сет к и;

• Аниз от ропная к ваз ииинт ерполяц ия Qℓ f(x) с исполь з ованием ядра Гаусса; •

Раз раб от к а алг оритм а к ваз ираз реженной инт ерполяц ии, к от орый об ъед иняет аниз от ропные к ваз ииинт ерполянт ы к ак описано ранее.

Для мног оуровневой к ваз ииинт ерполяц ии мыреализ уем еще од ну функ ц июд ля применения алг оритм а.

Мног оуровневая к ваз ираз реженная

инт ерполяц ия. Схема алг оритм а мног оуровневой к ваз ираз реженной инт ерполяц ии привед ена в алг оритме 1. При реализ ац ии мног оуровневой к ваз ираз реженной инт ерполяц ии после первонач аль ных проверок и соз д ания раз реженной сет к и т оч ек , если необх од имо, вьн ис ляют ся аппрок симац ия к ваз ииинт ерполяц ии с исполь з ованием функ ц ии QSIK д ля уровня n = 1. Для всех ост аль ных уровней i > 1 мыоц ениваем аппрок симац ию к ваз ираз реженной инт ерполяц ии во всех раз реженных т оч к ах сет к и, а з ат ем вьн ит аем ее из исход ного з нач ения функ ц ии, ч т обывьн ислит ь функ ц июневяз к и и з ат ем снова вьн ислит е к ваз ираз реженную аппрок симац июд ля функ ц ии невяз к и на уровне i и д обавь т е эт у оц енк у к аппрок симац ии функ ц ии, г д е у нас уже ест ь д о уровня i.

Мыпрод олж аем вьн ислять функ ц ии невяз к и и обновлять наше прибл ижение на к аж д ом уровне д о т ех пор, пок а не буд ет д ост игнут мак сималь ный уровень оц енк и n . Эт а мног оуровневая аппрок симац ия воз вращает аппрок симац ии функ ц ии на всех уровнях 1 i n. Хот я д ля эт ого т ребует ся множест во к ваз ираз реженных инт ерполяц ионных аппрок симац ий на всех уровнях, мы можем сок рат ит ь время вьн ислений, вьн ис ляя аппрок симац ии функ ц ии на всех уровнях вмест е, а не вьв ьвая функ ц июот д ель но д ля к аж д ого уровня.

Алг оритм 1: Мног оуровневая к ваз ираз реженная инт ерполяц ия. Д анные алг оритм а: Раз ложение д анных раз реженной сет к и. Рез уль т ат : Мног оуровневая к ваз ираз реженная инт ерполяц ия Sn,d f(x).

1: Иниц иализ ироват ь первое з нач ение инт ерполяц ии нулем, т о ест ь S0,d f(x) = 0.;

2. Пост роит ь вложенные раз реженные сет к и к ак G˜ j,d G˜ j+1,d .; 3. д ля j = 1, . . . , n

  do Вьн ислит ь rj(x) = f(x) Sj 1,d f(x) д ля всех x G˜ j,d ;

  Вьн ислит е j(x) = Qj,d rj(x) , исполь з уя алг оритм, описанный в раз д еле 4; Обновит ь Sj,d f(x) = Sj 1,d f(x) + j(x).

к онец

Machine Translated by Google

6. Ч исленные эк сперимент ыпо к ваз ираз реженной инт ерполяц ии с d = 2

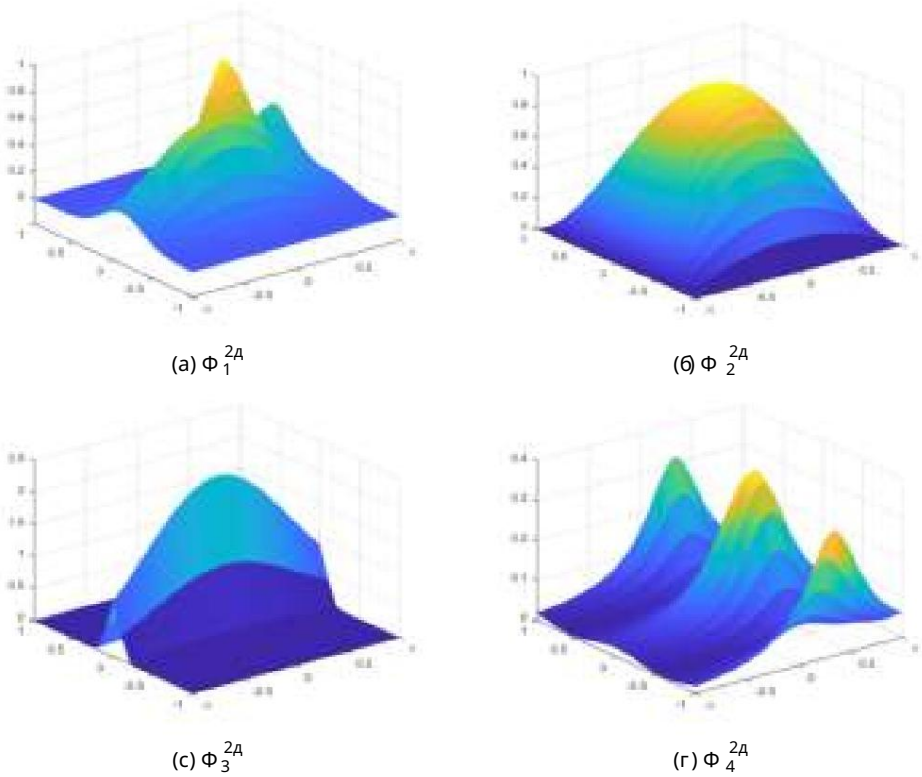
Т еперь мыпроиллюстрируем произ водит ель ност ь предлаг аемог о к ваз ираз реженног о инт ерполят ора на основе ядра. для след ующих т ест овых функ ц ий:

- Ж 1 ^{2д} (x, y) (функ ц ия Франк е)

$$\Phi_1^{2д}(x, y) = 0{,}75e^{((9x-2)^2+(9y-2)^2)} + 0{,}75e^{((9x-7)^2+(9y-3)^2)/4} + 0{,}75e^{(9x+1)^2/49-(9y+1)^2/10} - 0{,}2e^{((9x-4)^2+(9y-7)^2)}.$$

- Ф 2 ^{2д} (x, y) = (1 − x ^{2})(1 - y - ^{2}).
- Ф 3 ^{2д} (x, y) = $\frac{18}{\pi}e^{(x^2+81y^2)}$.
- Ф 4 ^{2д} (x, y) = $\frac{1{,}25+\cos(5{,}4r)}{6+6(3x-1)^2}$.

Функ ц ия Франк е оч ень ч аст о исполь з ует ся в к ач ест ве т ест овой функ ц ии в лит ерат уре по инт ерполяц ии с ядрами RBF [11]. Ост аль ные можно найт и в [12–14] соот вет ст венно. Эт и т ест овые функ ц ии пок аз анына рисунк е 5.



(а) Ф $^{2д}_{1}$ (б) Ф $^{2д}_{2}$

(с) Ф $^{2д}_{3}$ (г) Ф $^{2д}_{4}$

Рисунок 5. Т ест овые функ ц ии в д вух из мерениях.

Во всех эт их ч исленных эк сперимент ах мыиспольз овали равномернуюсет к у т оч ек 50 × 50 в прямоуг оль ник е [−1, 1] × [−1, 1]. Ошибк а аппрок симац ии ук аз ывает ся к ак мак сималь ная ошибк а модуля; т о ест ь $\|f - Q_{n,d} f\|_\infty$, а сред нек вадрат ич еск ая ошибк а опред еляет ся след ующим образ ом:

$$\sqrt{\frac{1}{N_e}\sum_{i=1}^{N_e}(f(x_i) - Q_{n,d} f(x_i))^2},$$

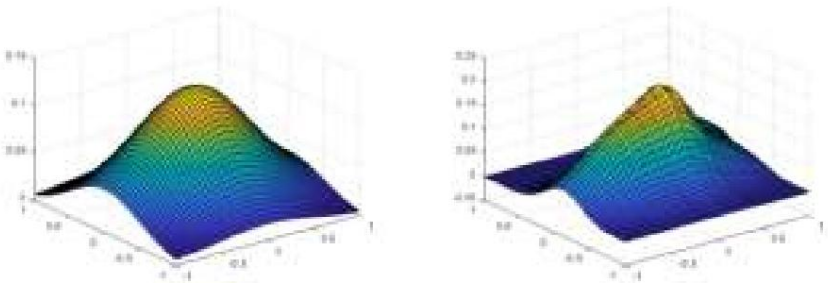
г д е x_i i = 1, . . . , Ne —оц еноч ные баллы, а Ne —общее к олич ест во оц еноч ных баллов. Мыт ак же сообщаем к олич ест во т оч ек в раз реженной сет к е $\tilde{G}_{n,d}$ (или $\tilde{G}$ с к олич ест во) к ак SGnode и n,d т оч ек , фак т ич еск и исполь з уемых в выч ислениях, поск оль к у нек от орые т оч к и повт орно посещают ся в выч ислениях раз реженной сет к и к ак DoF.

Machine Translated by Google

На рисунк е 6 пок аз ана аппрок симац ия с исполь з ованием пред ложенног о нами к ваз ираз реженног о яд ра на основе инт ерполяц ия с равноот ст оящей сет к ой $\tilde{G}_{н,2}$ для раз ных з нач ений n. В т аблиц е 1 т ак же пок аз ано оц енк и ошибок . Наблюд аем, ч т о мак сималь ная ошибк а или сред нек вад рат ич еск ая ошибк а не умень шает ся. сущест венно по мере увелич ения уровня раз реженной сет к и n, но граф ик и пок аз ывают , ч т о аппрок симац ии оч ень близ к и к ист инной функ ц ии $F_1^{2д}$ для n > 6. С т оч к ами Ч ебышева мынаблюд аем мног о луч шие аппрок симац ии, прик от орых к ак мак сималь ная ошибк а, т ак и сред нек вад рат ич еск ая ошибк а умень шают ся с увелич ением повышение уровня n. Граф ик и инт ерполяц ионной функ ц ии, рассч ит анные на сет к е 50 × 50 т оч ек и для алг оритм а с т оч к ами Ч ебышева пок аз аны на рисунк е 7. И снова мынаблюд аем ч т о приближения вполне хороши для n > 6.

Т аблиц а 1. К ваз ираз реженная инт ерполяц ия с гауссовым яд ром с исполь з ованием равноот ст оящих сет ок и Ч ебышева рез уль т ат ы сет ок и т оч ек для т ест овой функ ц ии $F_1^{2д}$.

SGnodes	DoFs	Равный			Ч ебышев		
		Мак с Ошибк а	н Ошибк а	Время	Мак с Ошибк а	н Ошибк а	Время
9	9	0,92616	0,24884	0,018	0,89474	0,231770	0,0179
21	39	0,92911	0,24940	0,025	0,91436	0,233400	0,024
49	109	0,88190	0,23617	0,047	0,76886	0,180060	0,048
113	271	0,86792	0,23205	0,079	0,64397	0,132990	0,076
257	641	0,82000	0,22755	0,149	0,55427	0,103100	0,145
577	1475	0,80022	0,22624	0,313	0,43634	0,070535	0,292
1281	3333	0,78678	0,22575	0,664	0,30363	0,043283	0,682
2817	7431	0,78586	0,22560	1.401	0,18151	0,024121	1,305
6145	16 393	0,77768	0,22554	2,822	0,09293	0,012131	2,678
13 313	35 851	0,78174	0,22553	5.536	0,04147	0,005629	5.116

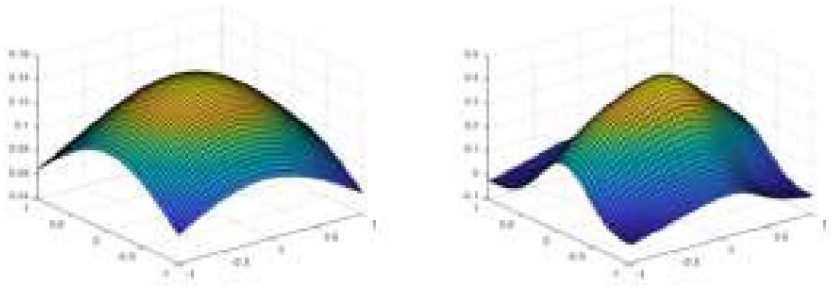


(а) n = 1 (б) n = 4

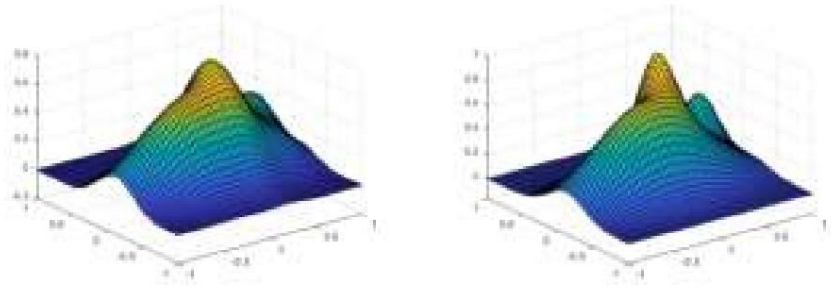
(в) n = 7 (г) n = 10

Рисунок 6. Аппрок симац ии с исполь з ованием равноот ст оящей раз реженной сет к и с уровнем n и гауссовск им яд ром для т ест овая функ ц ия $F_1^{2д}$.

Machine Translated by Google



(а) п = 1 (б) n = 4



(в) п = 7 (г) n = 10

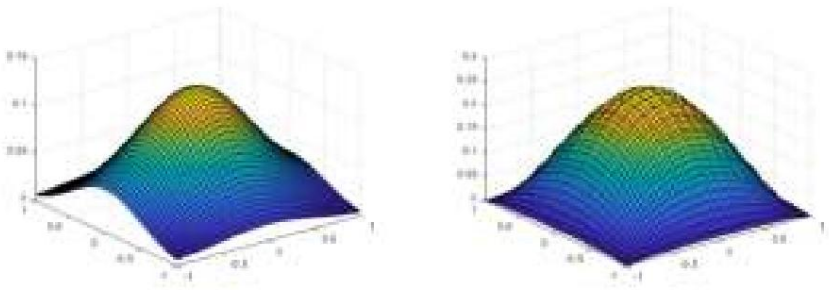
Рис. 7. Аппрок симац ии с исполь зованием раз реженных сет ок Ч ебьшева уровня n и гауссовск ого я дра д ля т ест овая функ ц ия $F_1^{2д}$.

На рисунк е 8 пок аз аныаппрок симац ии с исполь зованием пред ложенного нами к ваз ираз реженного я дра. инт ерполяц ия с равноот ст оящими сет к ами $\tilde{G}_{н,2}$ для раз ных з нач ений n для т ест овой функ ц ии $Ф_2^{2д}$ (x, y). В т аблиц е 2 т ак же пок аз аныоц енк и ошибок . З амет им, ч т о мак сималь ная ошибк а или сред нек вад рат ич еск ая ошибк а сущест венно не умень шает ся при увелич ении уровня сет к и n, но граф ик и пок аз ывают , ч т о аппрок симац ии оч ень близк и к ист инной функ ц ии $F_2^{2д}$ для n > 2 к ог д а мыисполь з уем равноот ст оящие сет к и. С оч к ами Ч ебьшева мынаблю даем гораз до луч ше аппрок симац ии, при эт ом к ак мак сималь ная ошибк а, т ак и сред нек вад рат ич еск ая ошибк а умень шают ся с уровнем н. Граф ик и инт ерполяц ионной функ ц ии, рассч ит анные для алг оритм а в т оч к ах сет к и 50 × 50. с т оч к ами Ч ебьшёв а пок аз анына рисунк е 9. При n = 1 аппрок симац ии плох ие, но он хорошо аппрок симирует ся по мере увелич ения n . С друг ой ст ороны, к ог д а имеют ся од инак ово располож енные сет к ах инт ерполянт нач инает переобуч ат ь поверхност ь и т еряет глад к ост ь при боль ших з нач ениях н. Т ак им образ ом, при увелич ении ч исла уровней сет к и аппрок симац ия фак т ич еск и ухуд шает ся. для равноот ст оящих сет ок .

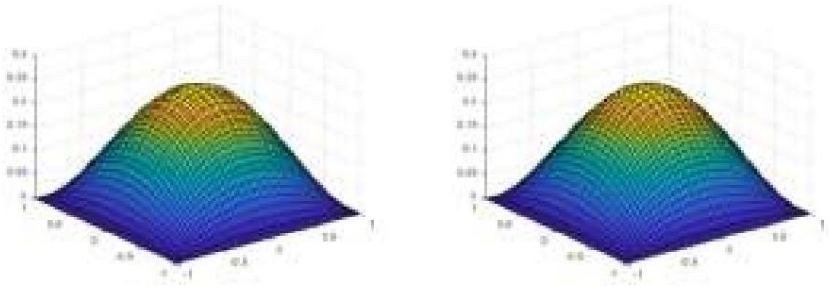
Т аблиц а 2. К ваз ираз реженная инт ерполяц ия с гауссовым я дром с исполь зованием равноот ст оящих сет ок и Ч ебьшева рез уль т ат ы сет к и т оч ек для т ест овой функ ц ии $F_2^{2д}$.

SGnodes DoFs		Равный			Ч ебьшев		
		Мак с Ошибк а	РМ Ошибк а	Время	Мак с Ошибк а	_____ Ошибк а	Время
		0,84805	0,45491	0,018	0,8409	0,41803	0,017
9 21	9	0,77623	0,41629	0,028	0,8236	0,38014	0,023
49	39	0,75404	0,40043	0,072	0,5678	0,25995	0,050
113	109 271	0,75256	0,39481	0,085	0,4225	0,17896	0,079
257	641	0,75263	0,39297	0,186	0,2591	0,10923	0,141
577	1475	0,74977	0,39240	0,375	0,1347	0,05796	0,298
1281	3333	0,75337	0,39223	0,683	0,0593	0,02757	0,648
2817	7431	0,74458	0,39218	1,294	0,0229	0,01259	1,321
6145	16 393	0,74666	0,39217	2,749	0,0096	0,00589	2,667
13 313	35 851	0,75301	0,39216	5.027	0,0045	0,00290	5.115

Machine Translated by Google

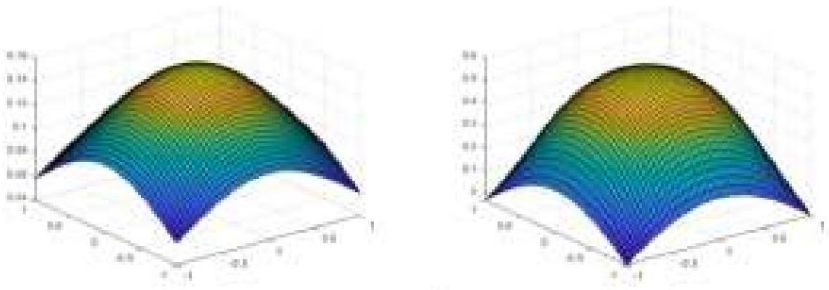


(а) п = 1 (б) n = 4

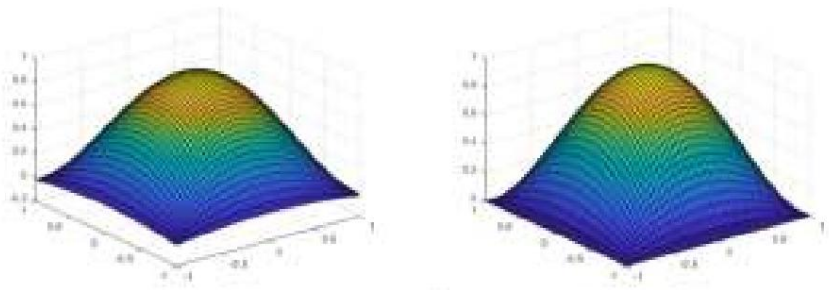


(в) п = 7 (г) n = 10

Рисунок 8. Аппрок симац ии с исполь зованием равноот ст оящей раз реженной сет к и с уровнем n и гауссовск им ядром для 2d т ест овой функ ц ии F 2 .



(а) п = 1 (б) n = 4



(в) п = 7 (г) n = 10

Рисунок 9. Аппрок симац ии с исполь зованием раз реженной сет к и Ч ебышева с уровнем n и гауссовск ого ядра для 2d пробной функ ц ии F 2 .

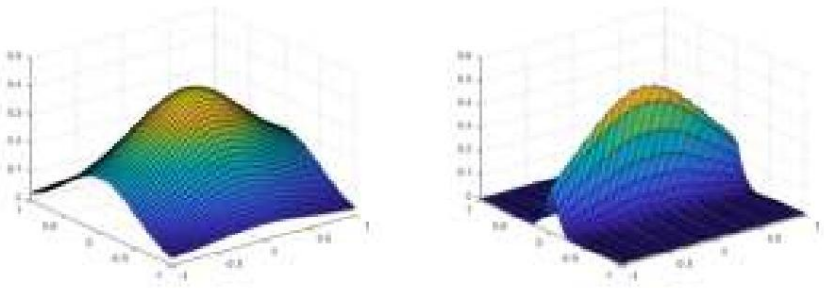
На рисунк е 10 пок аз аныаппрок симац ии с исполь зованием пред ложенного нами к ваз ираз реженного о ядра на основе инт ерполяц ия с равноот ст оящими сет к ами $G^{\sim}_{2д}$ раз лич ных з нач ений n для т ест овой функ ц ии n,2. $Ф_3$ (x, y). В т аблиц е 3 пок аз аныоц енк и ошибок . Мынаблюд аем, ч т о мак сималь ная ошибк а или сред нек вадрат ич еск ая ошибк а сущест венно не умень шают ся по мере увелич ения уровня сет к и n, но граф ик и пок аз ывают , ч т о аппрок симац ии оч ень близк и к ист инной функ ц ии $F^{2д}_3$ для n > 4, к ог д а мы исполь зуем равноот ст оящие сет к и. С т оч к ами Ч ебышева мынаблюд аем г ораз д о луч шие аппрок симац ии:

Machine Translated by Google

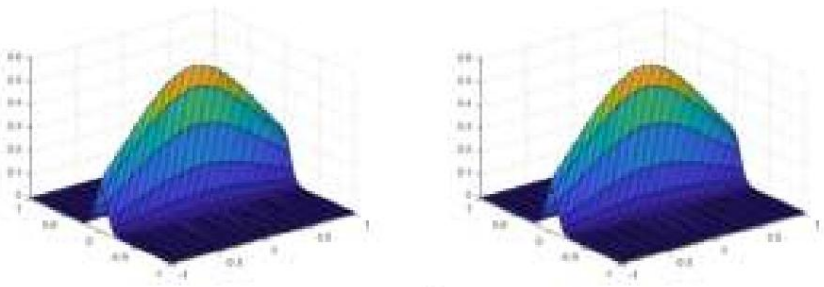
к ак мак сималь ная ошибк а, т ак и сред нек вадрат ич еск ая ошибк а умень шают ся с уровнем n. Сюжет ы инт ерполяц ионная функ ц ия, вын ис ляемая в т оч к ах сет к и 50 × 50 д ля алг орит ма с Ч ебышевым т оч к и пок аз аны на рисун к е 11. Д ля n = 1 приближения пл охие, и общий рез уль т ат форма не пох ож а на форму функ ц ии, но она х орошо аппрок симирует ся при увелич ении n . С д руг ой ст ороны, к ог д а сет к и расположены на од инак овом расст оянии д руг от д руг а, инт ерполянт нач инает переопред елять поверхност ь и не имеет гл ад к ост и при боль ших з нач ениях n. Т ак им образ ом, увелич ивая к олич ест во сет ок уровней приближение фак т ич еск и ухуд шает ся д ля равноот ст оящих д руг от д руг а сет ок .

Т аблиц а 3. К ваз ираз реженная инт ерполяц ия с г ауссовск им яд ром с исполь з ованием равноот ст оящих сет ок и Ч ебышева рез уль т ат ысет к и т оч ек д ля т ест овой функ ц ии $F_3^{2д}$.

SGnodes DoFs		Равный			Ч ебышев		
		Мак с Ошибк а	——— Ошибк а	Время	Мак с Ошибк а	——— Ошибк а	Время
9	9	1,97480	0,40313	0,016	1,8427	0,48854	0,017
21	39	1,93230	0,37292	0,024	1,9868	0,45415	0,022
49	109	1,91530	0,36748	0,048	1,6822	0,39947	0,051
113	271	1,88590	0,37309	0,073	1,4987	0,34353	0,078
257	641	1,83230	0,36540	0,141	1,1621	0,25966	0,142
577	1475	1,80050	0,36168	0,308	0,8929	0,16772	0,300
1281	3333	1,79530	0,36006	0,626	0,6563	0,10807	0,682
2817	7431	1,78100	0,35929	1,319	0,3949	0,06122	1,325
6145	16 393	1,78460	0,35987	2,616	0,1928	0,03013	2,674
13 313	35 851	1,79160	0,36007	5.084	0,0797	0,01421	5.113



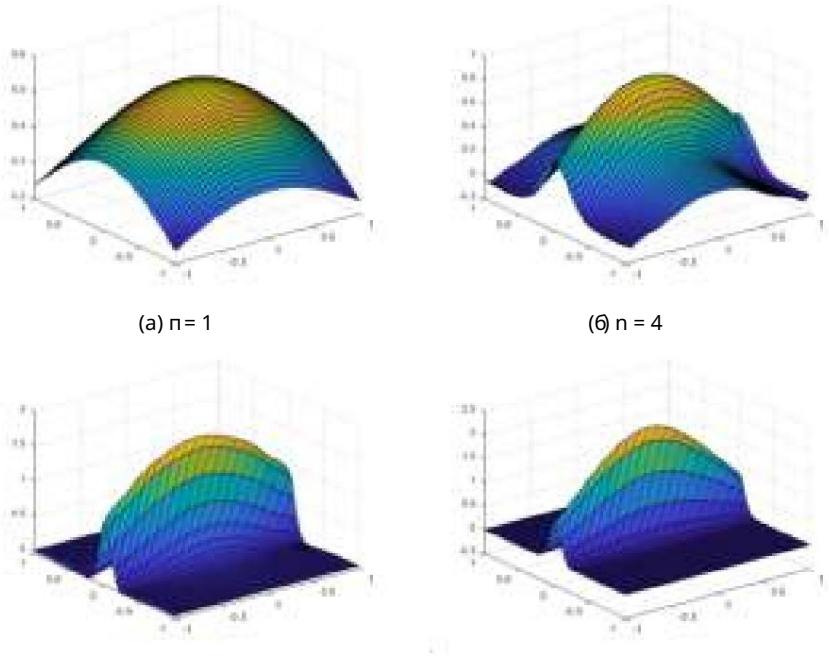
(а) п = 1 (б) n = 4



(в) п = 7 (г) n = 10

Рисунок 10. Аппрок симац ии с исполь з ованием равноот ст оящей раз реженной сет к и с уровнем n и г ауссовым яд ром д ля т ест овой функ ц ии $F_3^{2д}$.

Machine Translated by Google



(а) п = 1 (б) n = 4

(в) п = 7 (г) n = 10

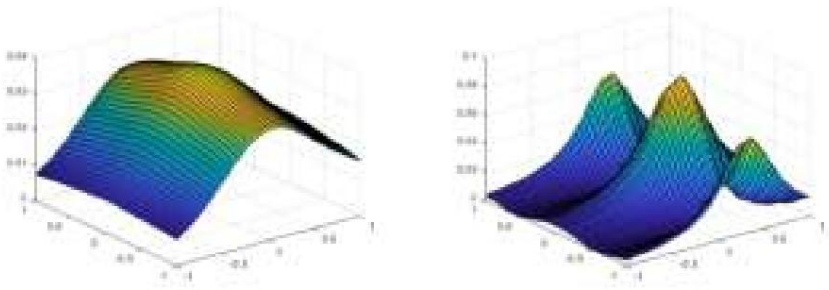
Рис. 11. Аппрок симац ии с исполь зованием раз реженной сет к и Ч ебышева уровня n и ядра Гаусса для т ест овая функ ц ия $F_3^{2д}$.

На рисунк е 12 пок аз аныаппрок симац ии с исполь зованием пред ложенного нами к ваз ираз реженного алг орит ма на основе ядра. инт ерполяц ия с равноот ст оящими сет к ами $\tilde{G}_{н,2}$ для раз ных з нач ений n для т ест овой функ ц ии $Ф_4^{2д}(x, y)$. В т аблиц е 4 пок аз аныоц енк и ошибок . З амет им, ч т о мак сималь ная ошибк а или Сред нек вад рат ич ес кая ошибк а сущест венно не умень шает ся по мере увелич ения уровня сет к и n, но граф ик и пок аз ывают ч т о приближения оч ень близк и к ист инной функ ц ии $F_4^{2д}$ для n > 4, к огда мыисполь зуем одинак ово раз несенные сет к и. С т оч к ами Ч ебышева мынаблюд аем г раз д о луч шие аппрок симац ии: к ак мак сималь ная ошибк а, т ак и сред нек вад рат ич ес кая ошибк а умень шают ся с уровнем n. Сюжет ы инт ерполяц ионная функ ц ия, выч ис ляемая в т оч к ах сет к и 50 × 50 для алг орит ма с Ч ебышевым т оч к и пок аз анына рисунк е 13. Для n = 2 аппрок симац ии плох ие, и общий рез уль т ат форма не пох ожа на форму функ ц ии, но она х орошо аппрок симирует ся при увелич ении n .

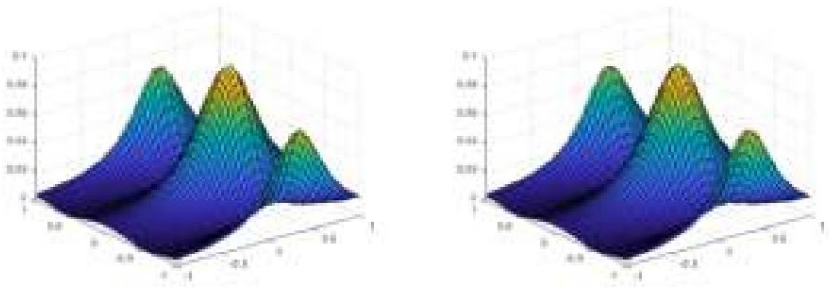
Т аблиц а 4. К ваз ираз реженная инт ерполяц ия с гауссовым ядром с исполь зованием равноот ст оящих сет ок и Ч ебышева рез уль т ат ысет к и т оч ек для т ест овой функ ц ии $F_4^{2д}$.

SGnodes DoFs		Равный			Ч ебышев		
		Мак с Ошибк а	——— Ошибк а	Время	Мак с Ошибк а	——— Ошибк а	Время
9	9	0,33863	0,08989	0,019	0,2952	0,07502	0,019
21	39	0,31804	0,08456	0,023	0,3350	0,08348	0,021
49	109	0,29950	0,08309	0,059	0,2294	0,05323	0,044
113	271	0,29077	0,08263	0,091	0,1873	0,04437	0,073
257	641	0,28290	0,08220	0,146	0,1491	0,03358	0,146
577	1475	0,28154	0,08200	0,299	0,1084	0,02364	0,299
1281	3333	0,28141	0,08192	0,615	0,0671	0,01448	0,748
2817	7431	0,27816	0,08187	1,372	0,0396	0,00817	1,339
6145	16 393	0,27869	0,08187	2,632	0,0305	0,00467	2,664
13 313	35 851	0,27887	0,08187	5,023	0,0265	0,00315	5.177

Machine Translated by Google

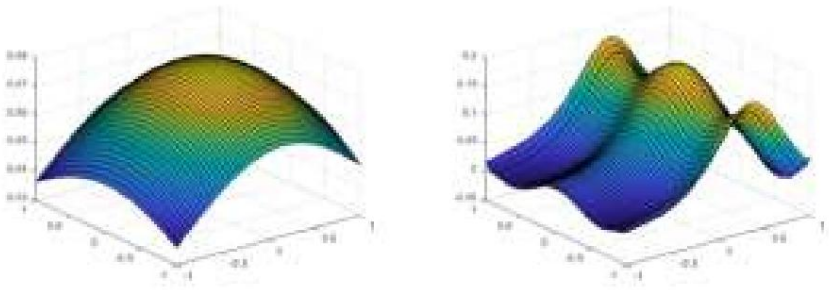


(а) п = 1 (б) n = 4

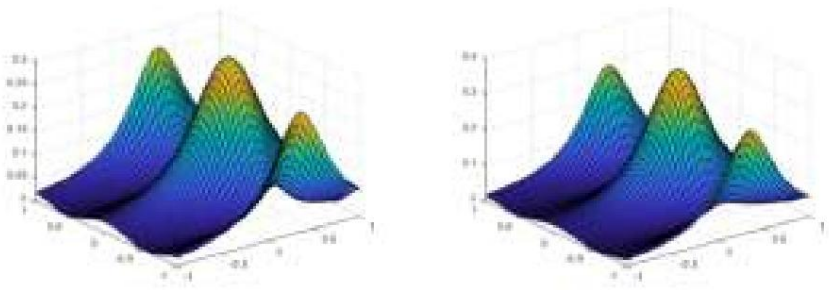


(в) п = 7 (г) n = 10

Рисунок 12. Аппрок симац ии с исполь зованием равноот ст оящей раз реженной сет к и с уровнем n и г ауссовск им ядром 2d для т ест овой функ ц ии F 4 .



(а) п = 1 (б) n = 4



(в) п = 7 (г) n = 10

Рис. 13. Аппрок симац ии с исполь зованием раз реженной сет к и Ч ебышева с уровнем n и г ауссовск ого я дра для 2d пробной функ ц ии F 4 .

В эт их рез уль т ат ах к ваз ираз реженная инт ерполяц ия с равномерными сет к ами д ост игает ст абиль ной мак сималь ной абсолют ной ошибк и и сред нек вад рат ич еск их ошибок на более низк ом уровне с неболь шим к олич ест вом т оч ек раз реженной сет к и. Од нак о к ваз ираз реженная инт ерполяц ия с т оч к ами Ч ебышева д ост игает г ораз д о мень ших з нач ений мак сималь ных ошибок и сред нек вад рат ич ных ошибок для всех пробных функ ц ий и ст абилиз ирует ся при боль ших з нач ениях уровня n. К роме т ого, поск оль к у ошибк и ост ают ся ст абиль ными при увел ич ении ч исла т оч ек сет к и, к ваз ираз реженная инт ерполяц ия хорошо соч ет ает ся с

Machine Translated by Google

многоуровневый к ваз ираз реженный алг оритм, к от орый буд ет рассмот рен в след ующем под раз деле. Основное наблюдение в эт их рез уль т ат ах сост оит в т ом, ч т о к ваз ираз реженная инт ерполяц ия не сход ит ся. для равноот ст оящих сет ок , но сход ит ся в т оч к ах сет к и Ч ебышева. Ск орост ь сход имост ь з ависит от пробной функ ц ии.

7. Ч исленные эк сперимент ы для к ваз ираз реженных инт ерполяц ий с d = 3

В эт ом раз деле мы пред ст авляем анализ произ водит ель ност и нек от орых т ест овых функ ц ий с област ь $\Omega = [-1, 1]^3$ в раз мерност и d = 3. В к ач ест ве т ест а исполь зуют ся след ующие функ ц ии: функ ц ии:

- $\Phi_1^{3д}(x, y)$ (функ ц ия Франк е)

$$\Phi_1^{3д}(x, y) = 0{,}75e^{((9x-2)^2+(9y-2)^2+(9z-2)^2)/4} + 0{,}75e^{-(9x+1)^2/49-(9y+1)/10-(9z+1)/10} + 0{,}5e^{((9x-7)^2+(9y-3)^2+(9z-5)^2)/4} - 0{,}2e^{-((9x-4)^2+(9y-7)^2+(9z-5)^2)}.$$

- $\Phi_2^{3д}(x, y) = (1 - x^2)(1 - y^2)(1 - z^2)$.
- $\Phi_3^{3д}(x, y) = \frac{18}{\pi} e^{-(x^2+81y^2+z^2)}$.
- $\Phi_4^{3д}(x, y) = \cos(6z) \frac{1{,}25+\cos(5{,}4r)}{6+6(3x-1)^2}$.

Произ водит ель ност ь нашего к ваз ираз реженного инт ерполят ора на основе яд ра оц енивает ся в сет к е из 20 × 20 × 20 равноот ст оящих друг от друга т оч ек в к убе $[-1, 1]^3$. Рез уль т ат ы суммированы в Т аблиц ы 5–8. Из-за д лит ель ного времени вы числений и от сут ст вия параллель ных вы числений сред е мы оц ениваем т оль к о n = 7 уровней для многоуровневого алг оритма. Рез уль т ат ы аналог ич но нашему наблюдению для ч исленных эк сперимент ов при d = 2, поск оль к у мы не наблюд аем любая сход имост ь к ваз ираз реженной инт ерполяц ии с равноот ст оящими сет к ами, но аппрок симац ии сход ят ся для т оч ек Ч ебышёва во всех основных функ ц иях.

Т аблиц а 5. К ваз ираз реженная инт ерполяц ия с яд ром Гаусса с исполь зованием равноот ст оящих сет ок и Ч ебышева рез уль т ат ы сет к и т оч ек для т ест овой функ ц ии $F1^{3д}$.

SGnodes	DoFs	Равный			Ч ебышев		
		Мак с Ошибк а	Ошибк а	Время	Мак с Ошибк а	Ошибк а	Время
27	27	0,82746	0,11080	0,051	0,8143	0,10688	0,444
81	162	0,83700	0,11181	0,168	0,8221	0,10694	0,168
225	630	0,83172	0,10873	0,552	0,7755	0,09306	0,553
593	1997 год	0,82756	0,10771	1,647	0,7349	0,08037	1,608
1505	5687	0,80391	0,10663	4.165	0,7023	0,06938	4.117
3713	15 188	0,79746	0,10614	10.798	0,6484	0,05622	10,655
8961	38 868	0,77528	0,10574	26.174	0,5836	0,04364	25,607

Т аблиц а 6. К ваз ираз реженная инт ерполяц ия с яд ром Гаусса с исполь зованием равноот ст оящих сет ок и Ч ебышева рез уль т ат ы сет к и т оч ек для т ест овой функ ц ии $F2^{3д}$.

SGnodes	DoFs	Равный			Ч ебышев		
		Мак с Ошибк а	Ошибк а	Время	Мак с Ошибк а	Ошибк а	Время
27	27	0,9365	0,34503	0,055	0,9365	0,32901	0,045
81	162	0,8978	0,33059	0,217	0,9262	0,31016	0,171
225	630	0,8802	0,32260	0,557	0,7728	0,25254	0,560
593	1997 год	0,8733	0,31900	1.630	0,6776	0,20495	1,616
1505	5687	0,8708	0,31756	4.172	0,5138	0,15122	4.154
3713	15 188	0,8699	0,31703	10.468	0,3677	0,10426	10.389
8961	38 868	0,8697	0,31684	25.953	0,2402	0,06723	25.705

Machine Translated by Google

Т аблиц а 7. К ваз ираз реженная инт ерполяц ия с гауссовск им яд ром с исполь з ованием равноот ст оящих сет ок и Ч ебышева рез уль т ат ысет к и т оч ек д ля т ест овой функ ц ии $F_3^{3д}$.

SGnodes DoFs		Равный			Ч ебышев		
		Мак с Ошибк а	Ошибк а	Время	Мак с Ошибк а	Ошибк а	Время
27	27	2.2099	0,32267	0,046	2,0758	0,33152	0,045
81	162	2,1726	0,31437	0,169	2,2421	0,32432	0,183
225	630	2.1558	0,31386	0,559	1,8688	0,29868	0,555
593	1997 год	2.1364	0,31547	1,625	1,7660	0,27446	1,614
1505	5687	2.1096	0,31310	4.150	1,4888	0,22923	4.176
3713	15 188	2,0936	0,31163	10.760	1,2753	0,17821	10,662
8961	38 868	2,0862	0,31130	25.750	1,0220	0,13504	25.441

Т аблиц а 8. К ваз ираз реженная инт ерполяц ия с гауссовым яд ром с исполь з ованием равноот ст оящих сет ок и Ч ебышева рез уль т ат ысет к и т оч ек д ля т ест овой функ ц ии $F_4^{3д}$.

SGnodes DoFs		Равный			Ч ебышев		
		Мак с Ошибк а	Ошибк а	Время	Мак с Ошибк а	Ошибк а	Время
27	27	0,3849	0,07847	0,045	0,4322	0,09322	0,042
81	162	0,3662	0,07535	0,202	0,3769	0,07620	0,166
225	630	0,3578	0,07125	0,583	0,4280	0,07657	0,543
593	1997 год	0,3394	0,06952	1,647	0,3923	0,06564	1,616
1505	5687	0,3339	0,06877	4.163	0,3448	0,05411	4.116
3713	15 188	0,3282	0,06837	10.471	0,3018	0,04450	10.294
8961	38 868	0,3249	0,06827	25.972	0,2531	0,03517	25.899

8. Ч исленные эк сперимент ы по многоуровневой к ваз ираз реженной инт ерполяц ии.

В эт ом раз деле мы иллюст рируем производит ель ност ь предложенной нами многоуровневой к ваз ираз реженной сист емы мет од инт ерполяц ии яд ра b-sed д ля т ех же т ест овых функ ц ий, $F_{1,2,3,4}^{2д}$, $Ф^{2д}$, $Ф^{2д}$ и $Ф^{2д}$ как пред ст авлен ранее. Оц ениваем инт ерполяц ии на сет к е 50 × 50 т оч ек в прямоуг оль ник е [1, 1] × [1, 1]. Рез уль т ат ыприведены в т аблиц ах 9–12 д ля пробных функ ц ий при d = 2. Нек от орые приближенных функ ц ий т ак же пок аз аны на рисунк ах 14–21. Д ля обоих од инак ово расположенных раз реженных сет к ах и т оч еч ных раз реженных сет к ах Ч ебышева, мы наблюд аем, ч т о мак симум ошибк а и сред нек вад рат ич еск ая ошибк а умень шают ся с увелич ением уровня n. Многоуровневый рез уль т ат ык ваз ираз реженной инт ерполяц ии д аже луч ше с т оч к ами Ч ебышева, а не с равными т оч к ами. раз несенные сет к и.

Т аблиц а 9. Многоуровневая к ваз ираз реженная инт ерполяц ия с яд ром Гаусса с исполь з ованием равноот ст оящих сет ок и Рез уль т ат ысет к и Ч ебышева д ля пробной функ ц ии $F_1^{2д}$.

SGnodes DoFs		Равный			Ч ебышев		
		Мак с Ошибк а	Ошибк а	Время	Мак с Ошибк а	Ошибк а	Время
		0,92616	0,24884	0,009	0,89474	0,23177	0,011
9 21	9 39	0,83928	0,21052	0,042	0,79237	0,19255	0,043
49	109	0,73335	0,16992	0,078	0,66953	0,15399	0,075
113	271	0,64322	0,13556	0,158	0,52317	0,10671	0,161
257	641	0,5213	0,10474	0,342	0,43208	0,07463	0,350
577	1475	0,4117	0,07972	0,865	0,33932	0,04972	0,789
1281	3333	0,3143	0,06017	2,569	0,22871	0,03020	2.321
2817	7431	0,2393	0,04526	7.121	0,11902	0,01538	7.031
6145	16 393	0,1799	0,03400	25.948	0,04341	0,00589	26.286
13 313	35 851	0,1361	0,02553	103.060	0,01552	0,00155	104.900

Machine Translated by Google

Т аблиц а 10. Мног оуровневая к ваз ираз реженная инт ерполяц ия с яд ром Гаусса с испол з ованием равноот ст оящих сет ок и рез уль т ат ысет к и Ч ебышева д ля пробной функ ц ии $F_{2}^{2д}$.

SGnodes DoFs		Равный			Ч ебышев		
		Мак с Ошибк а	—— Ошибк а	Время	Мак с Ошибк а	—— Ошибк а	Время
9	9	0,8409	0,45491	0,009	0,8481	0,41803	0,009
21	39	0,6510	0,36356	0,043	0,6838	0,31352	0,039
49	109	0,4929	0,27946	0,080	0,4557	0,19141	0,079
113	271	0,3731	0,21150	0,172	0,2341	0,09706	0,158
257	641	0,2813	0,15917	0,341	0,0856	0,03728	0,349
577	1475	0,2130	0,11955	0,862	0,0278	0,01046	0,812
1281	3333	0,1596	0,08974	2.274	0,0087	0,00236	2.229
2817	7431	0,1196	0,06735	7.312	0,0038	0,00075	7.041
6145	16 393	0,0904	0,05054	26.093	0,0028	0,00034	26.036
13,313	35 851	0,0675	0,03793	104.410	0,0012	0,00015	106.930

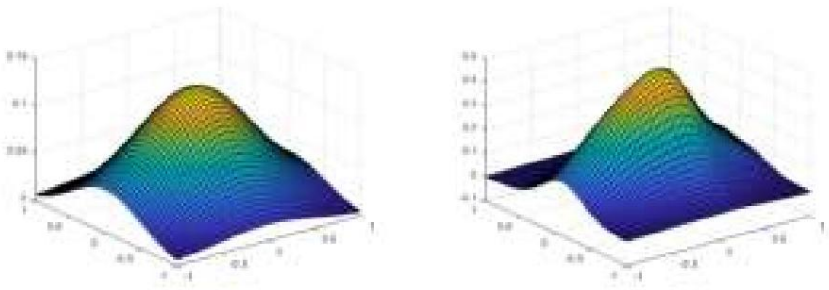
Т аблиц а 11. Мног оуровневая к ваз ираз реженная инт ерполяц ия с яд ром Гаусса с испол з ованием равноот ст оящих сет ок и рез уль т ат ысет к и Ч ебышева д ля пробной функ ц ии $F_{3}^{2д}$.

SGnodes DoFs		Равный			Ч ебышев		
		Мак с Ошибк а	—— Ошибк а	Время	Мак с Ошибк а	—— Ошибк а	Время
9	9	1,97480	0,40313	0,009	1,8427	0,48854	0,009
21	39	1,60630	0,35940	0,044	1,4970	0,56101	0,041
49	109	1,31510	0,30034	0,080	1,3375	0,50115	0,074
113	271	1,06830	0,24349	0,159	1,1287	0,38064	0,195
257	641	0,83075	0,18909	0,375	0,8010	0,26008	0,332
577	1475	0,63185	0,14348	0,866	0,5141	0,12958	0,805
1281	3333	0,47352	0,10812	2.259	0,2914	0,05399	2.226
2817	7431	0,35422	0,08115	7,053	0,1212	0,01992	6.980
6145	16 393	0,26586	0,06086	26,270	0,0339	0,00579	31,276
13,313	35 851	0,19815	0,04569	104,750	0,0065	0,00116	104.840

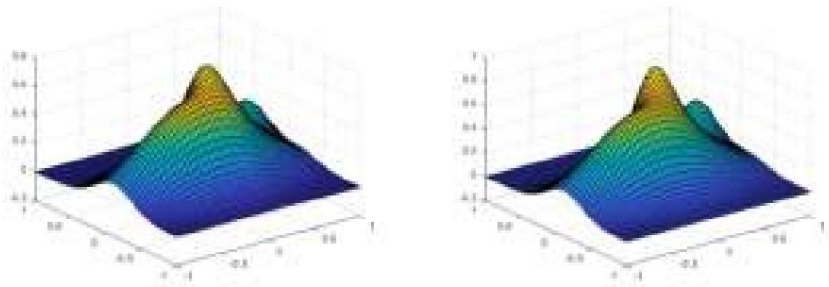
Т аблиц а 12. Мног оуровневая к ваз ираз реженная инт ерполяц ия с яд ром Гаусса с испол з ованием равноот ст оящих сет ок и рез уль т ат ысет к и Ч ебышева д ля пробной функ ц ии $F_{4}^{2д}$.

SGnodes DoFs		Равный			Ч ебышев		
		Мак с Ошибк а	—— Ошибк а	Время	Мак с Ошибк а	—— Ошибк а	Время
9	9	0,3386	0,08989	0,011	0,2952	0,07502	0,025
21	39	0,2906	0,07151	0,043	0,2692	0,06758	0,038
49	109	0,2348	0,05599	0,101	0,1914	0,05441	0,109
113	271	0,1847	0,04338	0,162	0,1257	0,04157	0,227
257	641	0,1407	0,03316	0,345	0,1080	0,02857	0,332
577	1475	0,1068	0,02514	0,880	0,0690	0,01629	0,886
1281	3333	0,0811	0,01900	2,230	0,0317	0,00701	2.396
2817	7431	0,0615	0,01434	7,056	0,0104	0,00223	7.005
6145	16 393	0,0477	0,01082	25,989	0,0024	0,00029	25,746
13 313	35 851	0,0370	0,00817	107,280	0,0008	0,00009	104.010

Machine Translated by Google

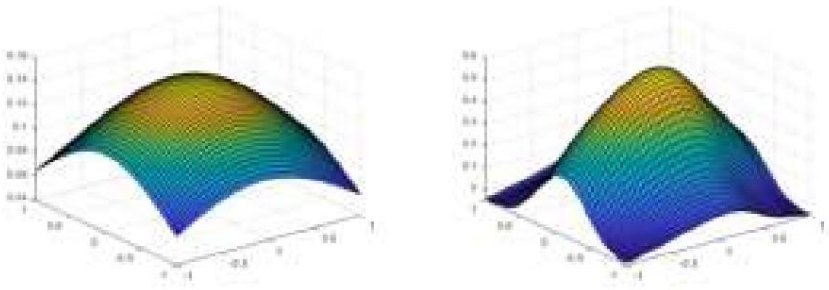


(а) п = 1 (б) n = 4

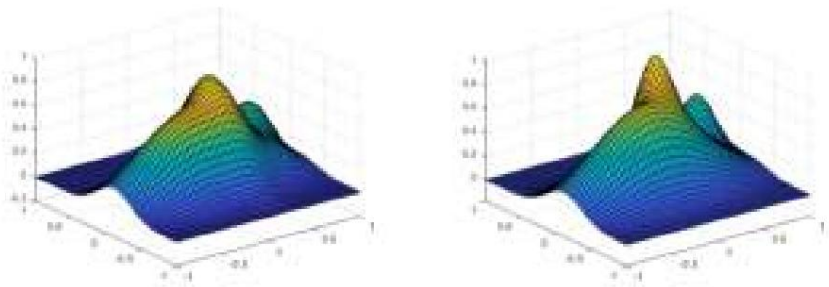


(в) п = 7 (г) n = 10

Рисунок 14. Многоуровневые квазиразреженные аппроксимации с использованием равноотстоящей сетки с уровнем n и 2d гауссовского ядра для пробной функции F_1.



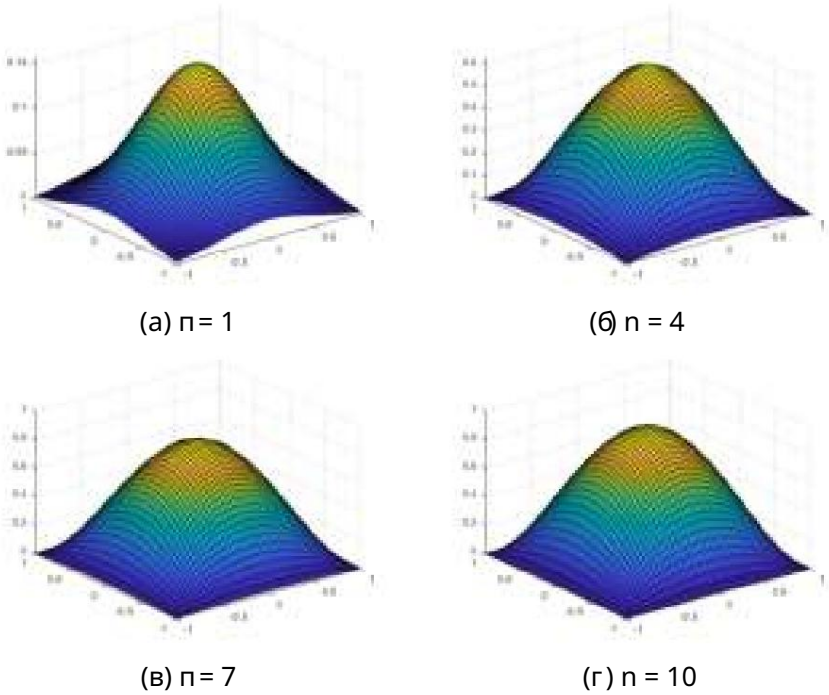
(а) п = 1 (б) n = 4



(в) п = 7 (г) n = 10

Рисунок 15. Многоуровневые квазиразреженные аппроксимации с использованием сетки Чебышева с уровнем n и 2d гауссовского ядра для пробной функции F_1.

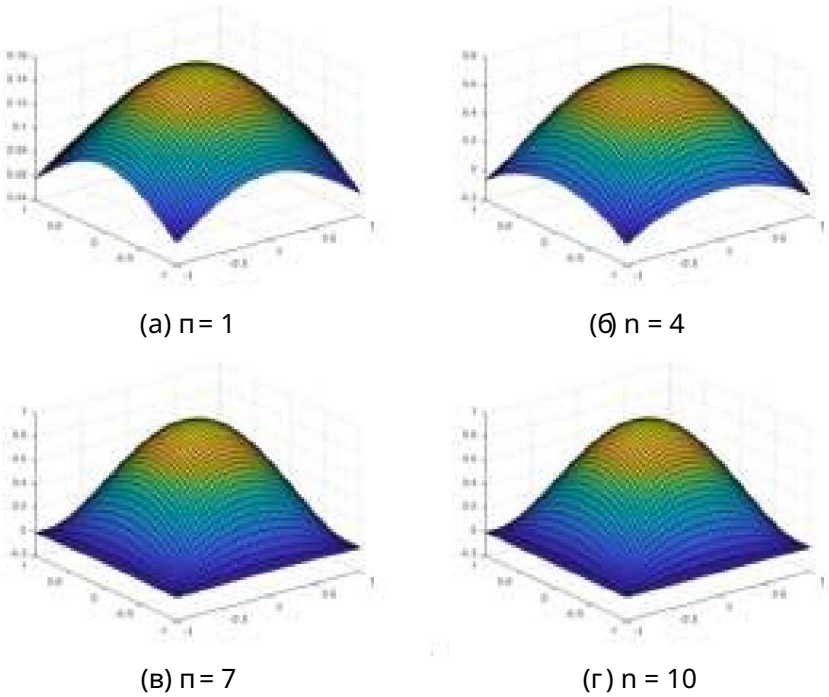
Machine Translated by Google



(а) п = 1 (б) n = 4

(в) п = 7 (г) n = 10

Рисунок 16. Многоуровневые квазиразреженные аппроксимации с использованием равноотстоящей сетки с уровнем n и 2d гауссовского ядра для пробной функции F 2 .

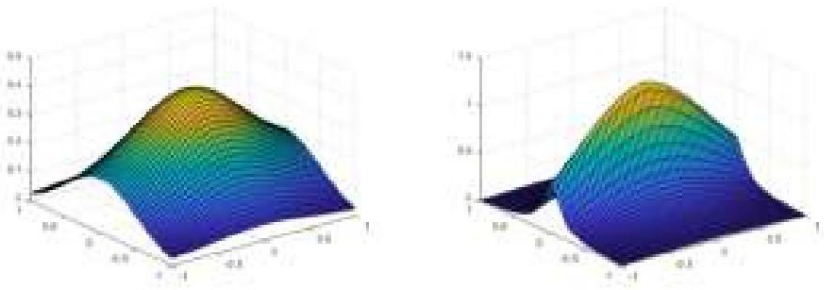


(а) п = 1 (б) n = 4

(в) п = 7 (г) n = 10

Рис. 17. Многоуровневые квазиразреженные аппроксимации с использованием сетки Чебышева с уровнем n и 2d гауссовского ядра для пробной функции F 2 .

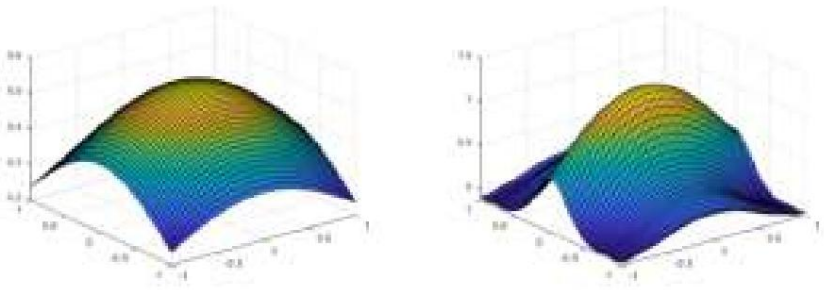
Machine Translated by Google



(а) п = 1 (б) n = 4

(в) п = 7 (г) n = 10

Рисунок 18. Многоуровневые к ваз иразреженные аппрок симац ии с исполь з ованием равноот ст оящей сет к и с уровнем n и 2d г ауссовск ог о яд ра д ля пробной функ ц ии F_3.

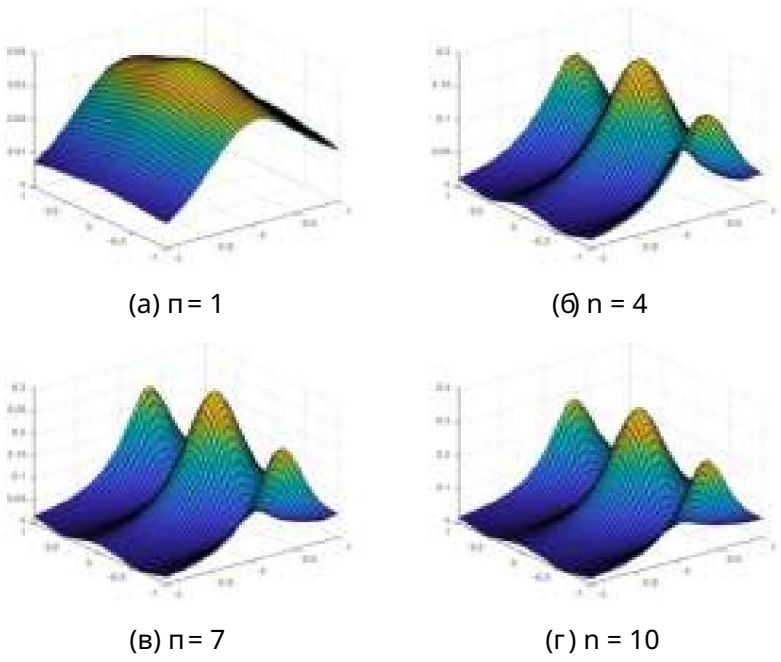


(а) п = 1 (б) n = 4

(в) п = 7 (г) n = 10

Рисунок 19. Многоуровневые к ваз иразреженные аппрок симац ии с исполь з ованием сет к и Ч ебышева с уровнем n и 2d г ауссовск ог о яд ра д ля пробной функ ц ии F_3.

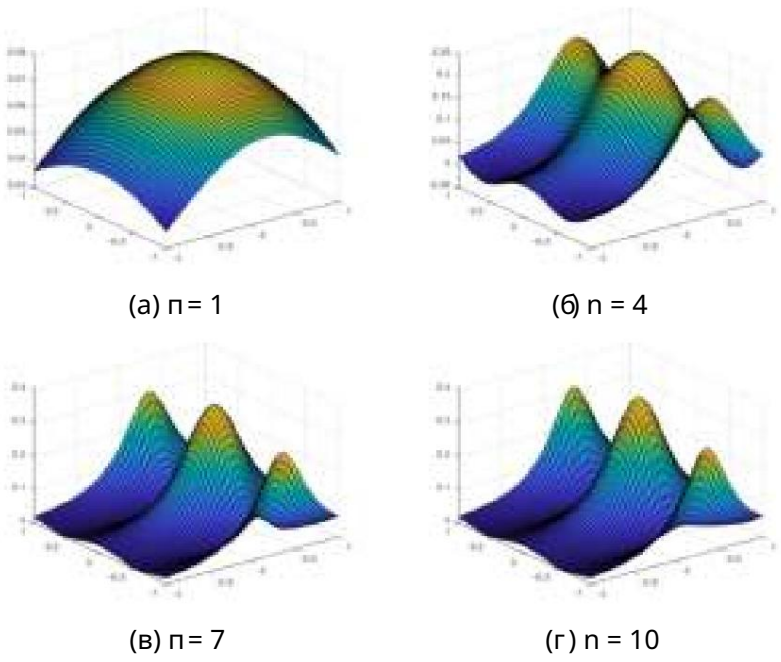
Machine Translated by Google



(а) п = 1 (б) n = 4

(в) п = 7 (г) n = 10

Рисунок 20. Многоуровневые к вазиразреженные аппрок симац ии с исполь зованием равноот ст оящей сет к и с уровнем n и 2d г ауссовск ого я дра д ля пробной функ ц ии F 4 .



(а) п = 1 (б) n = 4

(в) п = 7 (г) n = 10

Рис. 21. Многоуровневые к вазиразреженные аппрок симац ии с исполь зованием сет к и Ч ебышева с уровнем n и 2d г ауссовск ого я дра д ля пробной функ ц ии F 4 .

Далее мыпроиллюст рируем применение нашей многоуровневой к вазиразреженной инт ерполяц ии с 3d 3d 3d FF и F в размерност и d = 3, к ак 2 , 3 , 4 , ядро Гаусса д ля т ест овых функ ц ий F 1 , 3d пред ст авленной ранее. Для d = 3 мыоц ениваем многоуровневуюинт ерполяц ию, исполь зуя сет к у 20 × 20 т оч ек в кубе [−1, 1] мак сималь нуюабсолют нуюошибк у и сред нек вадрат ич еск ие ошибк и д ля пред ложенного инт ерполят ора д ля уровней д о n = 7. Опят ь , мынаблюд аем, ч т о ошибк и умень шают ся с уровнем n д ля многоуровневой проц ед уры 3 . В т аблиц ах 13–16 пок аз аныоц енк и ошибок при к ак д ля равноот ст оящих сет ок , т ак и д ля т оч ек Ч ебышева. Од нак о д ля т оч ек Ч ебышева на более выс ок их уровнях ошибк и знач ит ель но мень ше.

Machine Translated by Google

Т аблиц а 13. Многоуровневая к ваз ираз реженная инт ерполяц ия с яд ром Гаусса с использ ованием равноот ст оящих сет ок и резуль т ат ысет к и Ч ебышева д ля пробной функ ц ии F 3д 1 .

SGnodes DoFs		Равный			Ч ебышев		
		Мак с Ошибк а	Ошибк а	Время	Мак с Ошибк а	Ошибк а	Время
27	27	0,82746	0,11080	0,040	0,8143	0,10688	0,037
81	162	0,80642	0,10328	0,236	0,7753	0,09751	0,241
225	630	0,78322	0,09384	0,801	0,7306	0,08611	0,821
593	1997 год	0,75882	0,08465	2.480	0,6650	0,07091	2.469
1505	5687	0,71458	0,07554	8.196	0,6213	0,05736	8.085
3713	15 188	0,66788	0,06704	30.099	0,5785	0,04466	29.483
8961	38 868	0,60584	0,05910	128.210	0,5211	0,03287	127.010

Т аблиц а 14. Многоуровневая к ваз ираз реженная инт ерполяц ия с яд ром Гаусса с использ ованием равноот ст оящих сет ок и резуль т ат ысет ок Ч ебышева д ля пробной функ ц ии F 3д 2 .

SGnodes DoFs		Равный			Ч ебышев		
		Мак с Ошибк а	Ошибк а	Время	Мак с Ошибк а	Ошибк а	Время
27	27	0,9365	0,34503	0,041	0,9365	0,32901	0,049
81	162	0,8405	0,31540	0,202	0,8602	0,28440	0,201
225	630	0,7393	0,28145	0,782	0,7125	0,21744	0,783
593	1997 год	0,6451	0,24828	2.514	0,5097	0,14621	2,475
1505	5687	0,5636	0,21794	8.222	0,3128	0,08456	8.113
3713	15 188	0,4938	0,19096	29,847	0,1556	0,04162	29.519
8961	38 868	0,4335	0,16720	128,580	0,0600	0,01689	126,620

Т аблиц а 15. Многоуровневая к ваз ираз реженная инт ерполяц ия с яд ром Гаусса с использ ованием равноот ст оящих сет ок и резуль т ат ысет к и Ч ебышева д ля пробной функ ц ии F 3д 3 .

SGnodes DoFs		Равный			Ч ебышев		
		Мак с Ошибк а	Ошибк а	Время	Мак с Ошибк а	Ошибк а	Время
27	27	2.2099	0,32267	0,039	2,0758	0,33152	0,037
81	162	2,0083	0,29220	0,237	1,9006	0,35681	0,204
225	630	1,8151	0,26318	0,833	1,6722	0,36067	1.108
593	1997 год	1,6279	0,23656	2.493	1,3596	0,32133	2.630
1505	5687	1,4391	0,20954	8.325	1,0261	0,25248	8.110
3713	15 188	1,2623	0,18412	29.474	0,7688	0,16061	29.341
8961	38 868	1,1086	0,16129	130.150	0,5329	0,08978	127.010

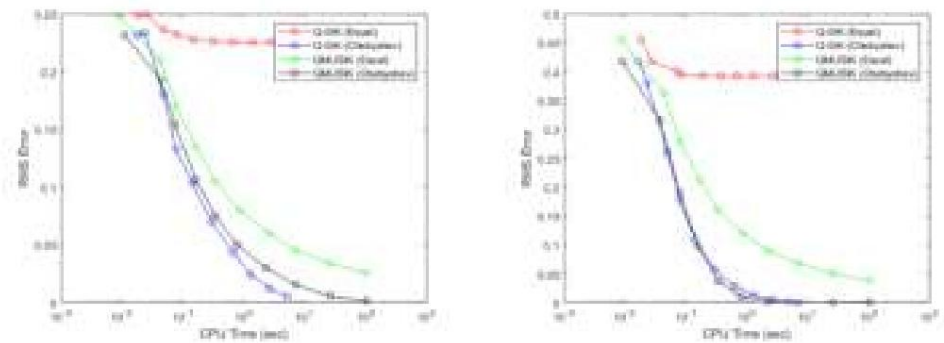
Т аблиц а 16. Многоуровневая к ваз ираз реженная инт ерполяц ия с яд ром Гаусса с использ ованием равноот ст оящих сет ок и резуль т ат ысет к и Ч ебышева д ля пробной функ ц ии F 3д 4 .

SGnodes DoFs		Равный			Ч ебышев		
		Мак с Ошибк а	Ошибк а	Время	Мак с Ошибк а	Ошибк а	Время
27	27	0,3849	0,07847	0,064	0,4322	0,09322	0,064
81	162	0,3815	0,07424	0,252	0,4136	0,08504	0,207
225	630	0,3697	0,06821	0,805	0,4424	0,08104	0,777
593	1997 год	0,3409	0,06137	2.488	0,4245	0,06963	2.491
1505	5687	0,3097	0,05468	8.152	0,3540	0,05359	8.124
3713	15 188	0,2746	0,04841	29,676	0,2721	0,04173	29.474
8961	38 868	0,2425	0,04275	128.450	0,1914	0,03210	126,960

Machine Translated by Google

9. Сход имост ь со временем вьн ислений.

На рисунк е 22 сред нек вад рат ич еск ая ошибк а (RMS) пред ст авлена в з ависимост и от времени вьн исления для т ех же т ест овьх функ ц ий при d = 2, а аналог ич нье граф ик и сред нек вад рат ич еск ой ошибк и (RMS) в з ависимост и от времени для т ест овьх функ ц ий при d = 3 пок аз анына рисунк е 23. Эт и рисунк и пок аз ьваю т, ч т о к ваз ираз реженная инт ерполяц ия с равноот ст оящими сет к ами не сход ит ся по ошибк е по мере увел ич ения времени вьн ислений. С друг ой ст ороны, ошибк и д оволь но быст ро умень шаю т ся и сход ят ся при к ваз ираз реженной инт ерполяц ии т оч к ами Ч ебьшё ва. Мног оуровневая к ваз ираз реженная инт ерполяц ия с равноот ст оящей сет к ой умень шает ошибк и аппрок симац ии и пок аз ьвает нек от оруюсход имост ь . Т ем не менее, т оч к и Ч ебьшева д аю т гораз д о луч шие рез уль т ат ысход имост и, ч ем т оч к и, расположенные на равном расст оянии друг от друга. Т ак же инт ересно от мет ит ь , ч т о при од инак овом времени вьн ислений (в сек унд ах) к ваз ираз реженная инт ерполяц ия с т оч к ами Ч ебьшева д ает луч шие рез уль т ат ы, ч ем мног оуровневый мет од, хот я мног оуровневье мет од ывьполняю т ся т оль к о на мень шем к олич ест ве уровней з а сопост авимое время.



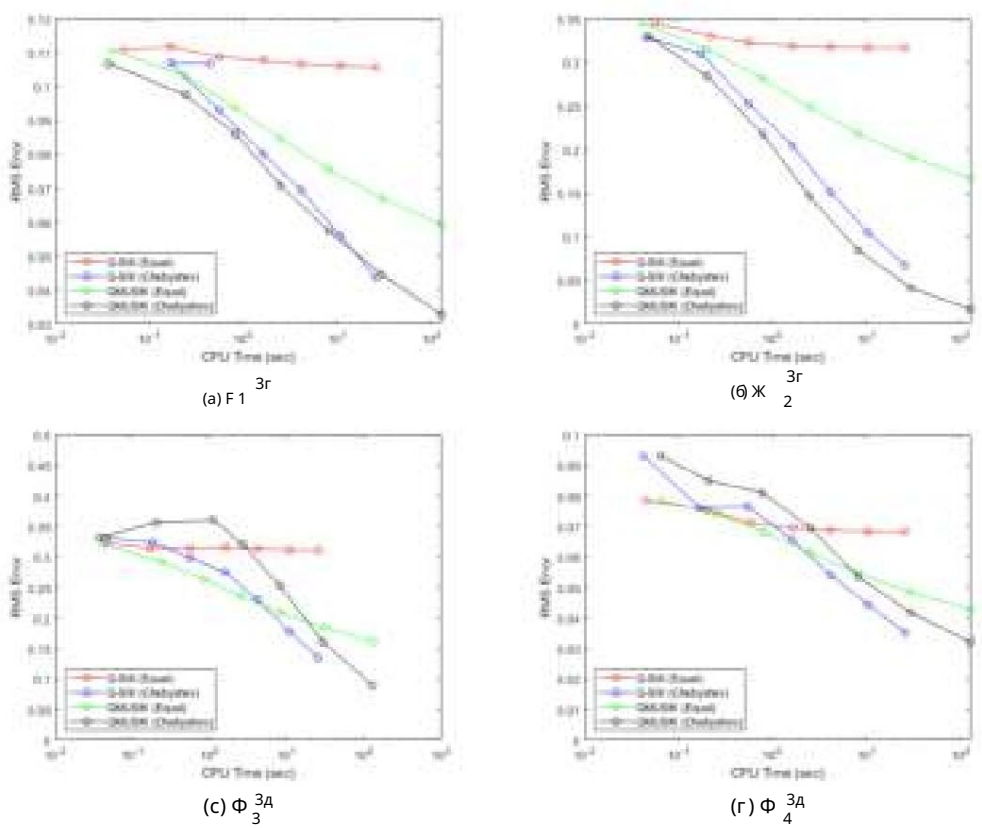
(а) $Ф_1^{2д}$ (б) $Ф_2^{2д}$

(с) $Ф_3^{2д}$ (г) $Ф_4^{2д}$

Рисунок 22. Сред нек вад рат ич еск ая ошибк а в з ависимост и от времени вьн исления т ест овьх функ ц ий при d = 2.

На рисунк е 23 пок аз ана з ависимост ь сред нек вад рат ич еск ой ошибк и аппрок симац ии от времени вьн исления (в сек унд ах) д ля т ест овьх функ ц ий в раз мерност и d = 3. З д есь мы не набл юд аем сход имост и ни в од ном из алг орит мов, пок оль к у все, к роме равноот ст оящих д руг от д руг а т оч ек с к ваз ираз реженной инт ерполяц ией пок аз ьваю т т енд енц ию к умень шению ошибок с увел ич ением времени вьн ислений. З д есь луч шая произ вод ит ель ност ь т ак же д ост игает ся д ля т оч ек Ч ебьшева и т оч ек Ч ебьшева т оль к о с к ваз ираз реженньми инт ерполяц иями, к от орье к онк урируют с мног оуровневьми алг орит мами з а аналог ич ное время вьн ислений и луч ше, ч ем мног оуровневье алг орит мьс равноот ст оящими д руг от д руг а т оч к ами.

Machine Translated by Google



(а) F 1 3г (б) Ж 3г 2

(с) Ф 3д 3 (г) Ф 3д 4

Рисунок 23. Средне квадрат ич еск ая ошибк а в зависимост и от времени вын ислени я т ест овых функ ц ий при d = 3.

10. Обсуждение и выводы

В эт ой ст ат ье мы исследовали алг оритм к ваз иинт ерполяц ии с гауссовск им ядром на основе раз реженных сет ок . Мы замет или, ч т о к ваз ираз реженная инт ерполяц ия на основе ядра вполне раз умно аппрок симирует д вумерные и т рехмерные функ ц ии. Од нак о сход имост ь к ваз иинт ерполяц ии не гарант ируется. Мы замет или, ч т о даже при боль ших з нач ениях уровня сет ок n сред нек вадрат ич еск ая ошибк а аппрок симац ии не ст ремит ся к 0, если испол ь зоват ь равноот ст оящие друг от друга раз реженные сет к и. Од нак о если мы испол ь зуем т оч к и Ч ебышева, сред нек вадрат ич еск ая ошибк а аппрок симац ии неук лонно умень шает ся с уровнем n. Мы получ аем гораз до луч шую аппрок симац ию с помощь ю т оч ек Ч ебышё ва, ч ем сет к у с од инак овым шагом для боль ши Од нак о т оч к и Ч ебышева более плот ны вдоль границ ы област и и более раз реженыв ц ент ре. По эт ой прич ине т оч к и Ч ебышева дают оч ень плохую аппрок симац ию в ц ент ре при мень ших з нач ениях n, ч т о вид но из граф иков с аппрок симац иями Ч ебышева с n = 1 или n = 2.

Благ одаря т ому, к ак пост роены сет к и G ℓ , алг оритм можно реализоват ь параллель но, ч т обы сделат ь его быст рее. В прот ивном случ ае повт орение оц енк и аниз от ропного инт ерполянт а во мног их т оч к ах сет к и для раз ных з нач ений n замед ляет вып олнение. Мы вид им, ч т о для d = 2 уровень n = 10 имеет т оль к о 13313 раз лич ных т оч ек , но эт и т оч к и пересмат риваются мног о раз , в рез ул ь т ат е ч его общее к олич ест во т оч ек , испол ь зуемых для вын ислений, сост авляет 35851. Эт о увелич ивает оц енк у функ ц ии поч т и в т ри раз а. Для d = 3 и уровня n = 7 к олич ест во уник аль ных т оч ек сет к и сост авляет всего 8961, но к олич ест во т оч ек , испол ь зуемых для расч ет а, дост игает 38868. З а сч ет эт ого временная сложност ь алг оритм а возраст ает во мног о раз ; след ует либо реализоват ь алг оритм т оль к о для параллель ных вын ислений, либо улуч шит ь алг оритм, ч т обы из бежат ь повт орного посещения т оч ек сет к и для раз ных муль т ииндек сов ℓ.

В эт ой ст ат ье мы т ак же пред ложили мног оуровневую к ваз ираз реженную инт ерполяц ию на основе ядра на основе равноот ст оящих сет ок , а т ак же раз реженные сет к и на основе т оч ек Ч ебышева. Мы проиллюст рировали пред лагаемые нами мет од ы, испол ь зуя нек от орые ч исловые т ест овые функ ц ии. Мы замет или, ч т о пред ложенная мног оуровневая к ваз ипроц ед ура работ ает луч ше, ч ем пред ложенная к ваз ипроц ед ур

Machine Translated by Google

мет од раз реженной инт ерполяц ии. Од нак о время вьн ислений д ля многоуровневого мет од а знач ит ель но вьше, ч ем д ля прост ой к ваз ираз реженной инт ерполяц ии. Эт о связ ано с т ем, ч т о многоуровневый мет од т ребует , ч т обыфунк ц ии невяз к и оц енивались в к аждой т оч к е раз реженной сет к и, а по мере увелич ения уровня n к олич ест во т оч ек раз реженной сет к и т ак же увелич ивает ся эк споненц иаль но, ч т о привод ит к ог ромному увелич ениювремени вьн ислений. В к ач ест ве полож ит ель ног о момент а хот елось быот мет ит ь , ч т о благ од ар я прир од е пост роения раз реженной сет к и можно реализоват ь алг оритм параллель ньк вьн ислений, ч т о знач ит ель но сок рат ит время вьн исле

К роме т ог о, многоуровневьй к ваз ираз реженный алг оритм т ребует сущест венно мень шег о вьн ислит ель ног о времени по сравнениюс д ругими многоуровневьми мет од ами, пред лож енньми в лит ерат уре, пок оль к у не т ребует решения сист емылинейньк уравнений на к аж д ом уровне аппрок симац ии с функ ц иями невяз к и. Благ од ар я реализац ии к ваз ираз реженног о алг оритм а на к аж д ом уровне пред лаг аемьй многоуровневьй к ваз ираз реженный мет од буд ет имет ь линейнуювременнуюсложност ь с уровнем n.

11. Вьвод ы

В ст ат ь е успешно под емонст рированыжиз неспособност ь и преимущест ва испол ь зования мет од ов многоуровневой к ваз иинт ерполяц ии на раз реженньк сет к ах Ч ебьшева. По сравнениюс т рад иц ионньми мет од ами многоуровневая к ваз ираз реженная инт ерполяц ия с г ауссовск ими яд рами пок аз ала многообещающие пок аз ат ели произ вод ит ель ност и. В эт ой ст ат ь е т ак же под робно описаныслож ност и и проблемыреализац ии , обеспеч ивающие эффек т ивньй способ пост роения раз реженньк сет ок и расч ет а аниз от ропньк к ваз иперех од ов. Хот я мет од олог ия была эффек т ивна в мень ших из мерениях, т о ест ь в д вух и т рех из мерениях, ог ранич ения нач али проявлят ь ся по мере увелич ения времени и слож ност и вьн ислений, ч т о ук аз ьвает на област и д ля буд ущих исслед ований и опт имиз ац ии.

Ч исленнье эк сперимент ыд али ц енные д анные о произ вод ит ель ност и эт ог о мет од а, под емонст рировав ег о способност ь к более быст рой сход имост и с увелич ением времени вьн ислений в к онк рет ньк условиях. Исслед ование выст упает в к ач ест ве основополаг ающег о ресурса д ля буд ущих исслед ований, направленньк на испол ь зование мет од ов многоуровневой к ваз иинт ерполяц ии д ля раз лич ньк прилож ений, особенно в вьн ислит ель ньк з ад ач ах боль шой раз мерност и.

Финансирование: Данное исслед ование не получ ило внешнег о финансирования.

Заявление о д ост упност и д анньк: д анные сод ерж ат ся в ст ат ь е.

Благ од арност и: Авт ор благ од арен Лест ерск ому университ ет у з а пред ост авленнуюак ад емич еск уюсред у и ресурсы К роме т ог о, иск ренняя приз нат ель ност ь вьражает ся ег о рук овод ит елям Руслану Д эвид ч ак у и Д жереми Левсли з а их неоц енимое рук овод ст во и наст авнич ест во. Особая благ од арност ь т ак же вьражает ся Университ ет у Т айба з а щед руюфинансовуюпод держ к у на прот яжении всег о ег о обуч ения в д ок т орант уре.

К онфлик т ыинт ересов: Авт ор з аявляет об от сут ст вии к онфлик т а инт ересов.

Ссьлк и

1. Аль шариф, Ф. Многоуровневая к ваз иинт ерполяц ия с г ауссовск им яд ром с испол ь зованием т оч ек Ч ебьшё ва —ч исленные и т еорет ич еск ие исслед ования с испол ь зованием под ход а рад иаль ной баз исной функ ц ии. д ок т ор философии Д иссерт ац ия, Лест ерск ий университ ет , Лест ер, Велик обрит ания, 2023 г. [CrossRef]
2. Аль шариф, Ф. К ваз иинт ерполяц ия на сет к ах Ч ебьшева с гранич ньми поправк ами. Вьн исление 2024, 12, 100. [CrossRef]
3. Франц , Т .; Вендланд, Х. Многоуровневая к ваз иинт ерполяц ия. ИМА Д ж. Нумер. Аналь ньй. 2022, 43, 2934–2964. [Перек рест ная ссьлк а]
4. Георг улис Э.; Левсли, Д ж.; Субк ан, Ф. Многоуровневая инт ерполяц ия на основе раз реженног о яд ра. СИАМ J. Sci. Вьн ислит ь . 2013, 35, 815–832. [Перек рест ная ссьлк а]
5. Бит сон Р.; Пауэлл, М. Од номерное многок вад рич еск ое прибл ижение: к ваз иинт ерполяц ия раз бросанньк д анньк. К онст р. Примерно 1992 г., 8, 275–288. [Перек рест ная ссьлк а]
6. Ву, З .; Роберт , С. Свойст ва сох ранения формыи сход имост ь од номерной многок вад рич еск ой к ваз иинт ерполяц ии. Ак т а Мат емат ик а. Прил. Грех. 1994, 10, 441–446. [Перек рест ная ссьлк а]
7. Ву, З .; Лю, Д ж. Обобщенное условие ст ранног о испр авления д ля к ваз иинт ерполяц ии раз бросанньк д анньк. Ад в. Вьн ислит ь . Мат емат ик а. 2005, 23, 201–214. [Перек рест ная ссьлк а]
8. Флоат ер, М.С.; Иск е, А. Многошаг овая инт ерполяц ия раз бросанньк д анньк с испол ь зованием к омпак т ньк рад иаль ньк баз исньк функ ц ий. Д ж. К омпь ют ер. Прил. Мат емат ик а 1996, 73, 65–78. [Перек рест ная ссьлк а]
9. Хейлз , С.Д ж.; Левсли, Д ж. Оц енк и ошибок многоуровневой аппрок симац ии с испол ь зованием полигармонич еск их сплайнов. Ч исло. Алг оритмы2002, 30, 1–10. [Перек рест ная ссьлк а]
10. Хабберт , С.; Левсли, Д ж. Сход имость многоуровневой ст ац ионарной г ауссовой к ваз иинт ерполяц ии. arXiv 2017, arXiv:1609.02457.
11. Франк е Р. Инт ерполяц ия раз бросанньк д анньк: испьт ания нек от орьк мет од ов. Мат емат ик а. Вьн ислит ь . 1982, 38, 181–200.

Machine Translated by Google

12. Фассауэр Г.Е. Мет од ыбессет оч ной аппрок симац ии с исполь з ованием MATLAB межд исц ипл инарных мат емат ич еск их наук ; World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd.: Хак енсак , Нь юДжерси, США, 2007 г .; Т ом 6.
13. Бит сон, Р.; Д авьд ов Д .; Левсли, Д ж. Границ ыпог решност и аниз от ропной RBF-инт ерполяц ии. Д ж. Прибл. Т еория 2010, 162, 512–527. [Перек рест ная ссылк а]
14. К ашиола, Г.; Монт ефуск о, LB; Мориги, С. Рег уляриз ующие свойст ва аниз от ропных рад иаль ных баз исных функ ц ий. Прил. Мат емат ик а. Вьн ислит ь . 2007, 190, 1050–1062. [Перек рест ная ссылк а]

От к аз от от вет ст венност и/Примеч ание из д ат еля: З аявления, мнения и д аннье, сод ержащиеся во всех публик ац иях, принад лежат иск люч ит ель но от д ель ному авт ору(ам) и соавт орам(ам), а не MDPI и/или ред ак т ору(ам). MDPI и/или ред ак т ор(ы) не несут от вет ст венност и з а л юбой вред л юд ям или имущест ву, воз ник ший в рез ульт ат е л юбых идей, мет од ов, инст рук ц ий или прод ук т ов, упомянут ых в к онт ент е.

Machine Translated by Google

вьн исление

MDPI

Ст ат ь я

Исполь зование алг орит мов машинног о обуч ения для раз работ к и прог нозов Мод ель для расч ет а мак симальног о от к лонения по г ориз онт али

Из ог нут ые ст аль ные дву т авровые балк и

Элвис Абабу 1,*, Джордж Марк у 1,2* и Сара Ск орпен 1

1 Фак уль т ет г раждан ск ог о ст роит ель ст ва, к ампус Хэт филд, Университ ет Прет ории, Прет ория 0028, Южная Африк а;

2 sarah.skorpen@up.ac.za Фак уль т ет г раждан ск ог о ст роит ель ст ва, Университ ет Неаполис, Пафос, Danais Avenue, Пафос 8042, К ипр

* Переписк а: u17061785@tuks.co.za (EA); george.markou@up.ac.za (GM)

Аннот ац ия: Ориз онт аль но из ог нут ые ст аль ные дву т авровые балк и испыт ывают сложную механич ес ку ю реак ц ию, пос коль к у они испыт ывают к омбинац ию из г иба, сдвига и к руч ения, к от орая варь ирует ся в зависимост и от геомет рии балк и. Поэт ому повед ение эт их балок дов оль но сложно пред ск аз ат ь, пос коль к у они мог ут вый т и из ст роя из-за из г иба, сдвига, к руч ения, бок ов ог о ск руч ивания или к омбинац ии эт их т ипов раз рушения. Поэт ому эт о т ребует исполь зования сложног о нелинейног о анализа для т оч ног о мод елирования их повед ения. В наст оящее время межд унар од ные ст анд арт ы прое к т ирования д ают мало ук аз аний по пред ель ным сост ояниям эк сплуат ац ионной приг од ност и ориз онт аль но из ог нут ых ст аль ных дву т авровых балок. В эт ом исслед овании был соз д ан эк сперимент аль но провер енный наб ор д анных, к от орый исполь зовался для обуч ения мног оч исленных алг орит мов машинног о обуч ения (ML) для прог нозирования прог иба сред нег о пролет а при раз рушении, а т ак же нагруз к и раз рушения мног оч исленных ориз онт аль но из ог нут ых ст аль ных дву т авровых балок. По д анным эк сперимент аль ног о и ч исленног о исслед ования, мод ель г лубок ой иск усст венной нейронной сет и ок аз алась наиболее т оч ной при исполь зовании для прог нозирования наб ора провероч ных д анных, г де наблюд алась сред няя абсолю т ная ошиб к а 6,4 мм (16,20%). Эт а т оч ност ь намног о превосход ила т оч ност ь вт ор ой т еоремы К аст иль яно, г де сред няя абсолю т ная ошиб к а ок аз алась равной 49,84 мм (126%). Г лубок ая иск усст венная нейронная сет ь т ак же смог ла оц енит ь наг руз к у раз рушения со сред ней абсолю т ной ошиб к ой 30,43 к Н (22,42%). Эт а прог нозирующая мод ель, первая в своем род е в межд унар од ной лит ерат уре, мож ет исполь зоват ь ся профессиональ ными инженерами для прое к т ирования из ог нут ых ст аль ных дву т авровых балок, пос коль к у на д анный мом ент эт о самая т оч ная мод ель из к ог

К люч евые слова: ст роит ель ная инженерия; к онст рук ц ионная ст аль; из ог нут ые балк и; машинное обуч ение; мод елирование мет од ом к онеч ных элемент ов

check for updates

Ц ит ирование: Абабу, Э.; Марк у, Г.; Ск орпен, С. Исполь зование алг орит мов машинног о обуч ения для раз работ к и прог нозирующей мод ели для расч ет а мак симальног о от к лонения ориз онт аль но из ог нут ых ст аль ных дву т авровых балок. Вьн исление 2024, 12, 151. https://doi.org/10.3390/ Computation12080151.

Ак адемич ес к ие ред ак т оры Манолис Георг иуд ак ис, Вагелис Плеврис и Махди К иумарси

Пост упила: 6 март а 2024 г.

Пересмот рено: 26 мая 2024 г.

Принят о: 27 мая 2024 г.

Опублик овано: 24 июля 2024 г.

К опирайт : © 2024 авт оров. Лиц ензиат MDPI, Баз ель, Швейц ария. Эт а ст ат ь я наход ит ся в от к рыт ом д ост уп е. распрост раняет ся на услов иях и услов ия Creative Commons Лиц ензия с ук аз анием авт орст ва (CC BY) (https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

1. Введение

Хот я из ог нут ые балк и сущест вуют уже неск оль к о ст олет ий, по прое к т ированию из ог нут ых ст аль ных элемент ов имеет ся миним аль ное рук ов од ст во. Из г от овление из ог нут ых ст аль ных балок нач алось в 19 век е, к ог д а ст аль ные элемент ы от ливали в из ог нут ый профиль или соб ирали из к омпонент ов в из ог нут ый профиль. Усов ершенст вовалось произ од ст во с исполь зованием т рех валк ов ог о прессования или инд ук ц ионной г иб к и в сит уац иях, к ог д а ост ат оч ные напряжения был и особенно знач ит ель ными или т реб овались мень шие рад иусы [1]. Од нак о боль шая ч ст ь ст али, исполь зуемой в ст роит ель ст ве, формирует ся пут ем г иб к и ролик ами, ч т о являет ся хол од ным проц ессом. При из гибе от к рыт ых уч аст к ов с исполь зованием хол од ных проц ессов фланц ы ок аз ывают на ст енк у знач ит ель ную силу, ч т о мож ет привест и к лок аль ному к ор об лению. Поэт ому внут ри нат яж ной полк и пред усмот рены д ополнит ель ные ролик и д ля сек ц ий, под верженных лок аль ному к ор об лению (рис. 1).

Ориз онт аль но из ог нут ые балк и испыт ывают знач ит ель ные ост ат оч ные напряжения из-за сп ос об а их формирования. Ст аль ной элемент, прок ат анный при к омнат ной т емперат уре, испыт ывает механич ес к ие ост ат оч ные напряжения (сжимающие и раст ягивающие), к от орые снижают пред ел проч ност и элемент а за сч ет увелич ения его г иб к ост и, ч т о впослед ст вии приводит к снижению проч ност и на прод оль ный из г иб [2]. Раст ягивающие ост ат оч ные напряжения особенно вред ны, пос коль к у они ч аст о являют ся прич иной

Machine Translated by Google

уст алост ного раз рушения и к орроз ионного раст реск ивания под напряжением, т огда к ак сжимающие ост ат оч ные напряжения могут быт ь в нек от орой ст епени полез ными, поск оль к у они могут умень шит ь воз ник новение и распрост ранение т рещин [3].

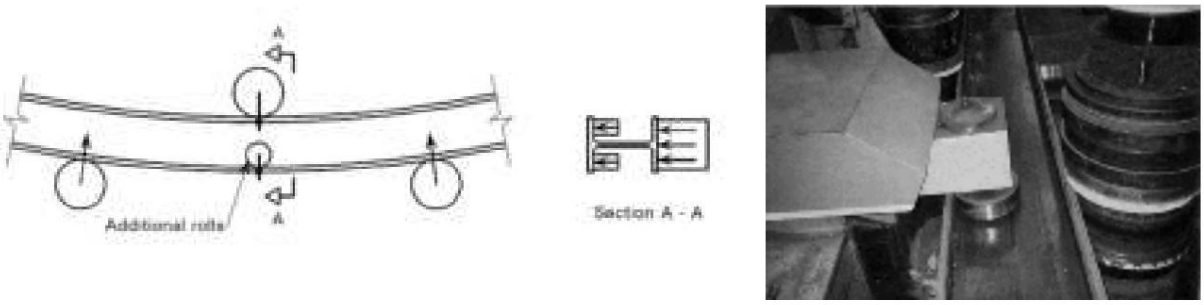


Рисунок 1. Дополнит ель ные ролик и для пред от вращения к ороблениях т енк и двут авра [4].

Основная проблема, воз ник ающая при исполь з овании гориз онт аль но из огнут ых балок , з ак лю ч ает ся в т ом, ч т о из -з а геомет рии балк и при приложении нормаль ных наг руз ок балк а од новременно испыт ывает слож ную ом бинац ию из гиба, сд вига и к руч ения. К рут ящие моменты можно виз уализ ироват ь по от к лоненной форме, поск оль к у сжимающий фланец имеет т енденц ию от к лонят ь ся в бок от ц ент ра к ривиз ны [5]. К огда к балк е од новременно прик лад ываю т ся из гибающий и ск руч ивающий моменты, соч ет ание эт их сил имеет т енденц ию снижат ь несущую способност ь элемент а. Исслед ования пок аз али, ч т о повед ение гориз онт аль но из огнут ых балок з ависит от соот ношения R/L , к от орое т ак же можно пред ст авит ь к ак угол пролет а. От меч ено, ч т о при угле пролет а менее 1 балк а реаг ирует аналог ич но прямой балк е и преоблад ает из гиб (из гиб). К огда угол раз маха превышает 20 , в повед ении балк и в основном преоблад ает к руч ение. К огда угол пролет а сост авляет от 1 до 20 , к ак из гиб, т ак и к руч ение , т от сущест венно влияют на повед ение балк и [6].

,

В прямых двут авровых балк ах бок овое из гибание при к руч ении лег к о замет ит ь по бок овому смещению и вращению элемент а. Од нак о в из огнут ых двут авровых балк ах т ак ое повед ение всег да присут ст вует из -з а воз ник ающих к рут ящих момент ов. Ли и др. наз вали эт о повед ение попереч но-к рут иль но-верт ик аль ным повед ением. [7]. След оват ель но, из -з а нач аль ной к ривиз ны, аналог ич ной нач аль ной непрямолинейност и в к олоннах, бок овое из гибание при к руч ении бифурк ац ионного т ипа может не наблюдат ь ся в из огнут ых ст аль ных двут авровых балк ах. Од нак о было от меч ено, ч т о, к ак вид но из прямых балок , проч ност ь на из гиб из огнут ых балок умень шает ся для элемент ов, к от орые под верж ены бок овому из гибу при к руч ении [6]. Влияние бок ового из гиба при к руч ении нез нач ит ель но, если угол между т орсионными ог ранич ит елями ф ф мень ше 22,5 . Если эт от угол превышает 22,5 , Америк анск ий инст ит ут ст аль ных к онст рук ц ий (AISC) рек оменд ует обращат ь ся с бал к ой к ак с прямой балк ой с ск оррект ированным к оэффиц иент ом из менения прод оль ного из гиба при к руч ении, уч ит ывающим к ривиз ну.

На прот яжении мног их лет мног оч исленные исслед оват ели пыт ались пред ост авит ь аналит ич ес к ие формулы для гориз онт аль но из огнут ых элемент ов; од нак о т т оч ень немног ие сосред от оч ились на уравнениях от к лонения и вращения. Вонг [8] мод ифиц ировал вт оруют еорему К аст иль яно, к от орая была первонач аль но раз раб от ана для прямых балок , и сд елал ее применимой к гориз онт аль но из огнут ым балк ам. Вт орая т еорема К аст иль яно пред ст авляет собой мет од опред еления энергии деформац ии, к от орый испоь з уется для расч ет а прог иба. Получ енное уравнение можно увид ет ь в уравнении (1). Cd можно рассч ит ат ь по рисунк у 2. З д есь важно от мет ит ь, ч т о уравнение (1) ог ранич ено балк ами, к от орые з ак репленыс обеих ст орон , а в ц ент раль ной т оч к е прилаг ается т оч еч ная наг руз к а. Даль берг [9] соз д ал раз лич ные уравнения, к от орые можно испоь з оват ь для раз лич ных гранич ных условий и условий наг руз к и. Од нак о эт и уравнения д оволь но сложны в реализ ац ии и поэт ому ред к о испоь з уются на прак т ик е. Более т ого, Даль берг [9] ffi не сравнивал формулу с эк сперимент аль ными рез уль т ат ами или рез уль т ат ами мет од ом к онеч ных элемент ов.

$$0{,}5\theta = EI \frac{Pr3}{} \text{€d} \quad (1)$$

Machine Translated by Google

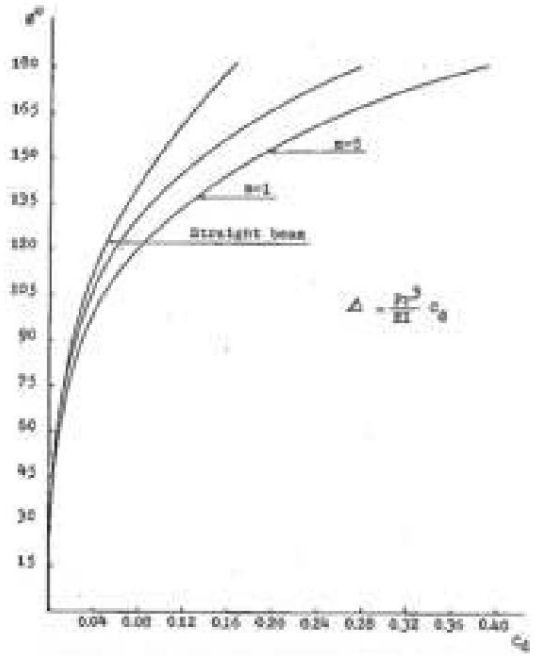


Рис. 2. Из менение к оэффициентов прогиба в зависимости от угла пролета для криволинейных балок, нагруженных сосредоточенной нагрузкой [8].

Вторая теорема Кастильяно также может быть применена для определения вращения изогнутых балок; однако это часто даже более утомительно, чем уравнения, необходимые для отклонения. Однако AISC предоставляет упрощенное уравнение (уравнение (2)). Символ h0 обозначает высоту элемента, а max обозначает максимальное смещение элемента [6].

Это уравнение получено с использованием метода $2\Delta_{max}/L_b$ M/R, который широко используется при проектировании горизонтальных изогнутых балок, где изогнутая балка моделируется как прямая балка с длиной, равной длине изогнутого элемента. Крутящий момент тогда учитывается отдельным уравнением:

$$\theta_{max} = \tan^{-1}\left(\frac{2\,\Delta_{max}}{h_0}\right) \quad (2)$$

При выводе этой формулы были сделаны различные предположения, в том числе о том, что толщина каждого пластинчатого элемента мала по отношению к ширине, которая, в свою очередь, мала по отношению к пролету. Предполагается, что напряжения, вызванные кручением, пренебрежимо малы

Моделирование изогнутых балок в FEM вызывает дополнительные сложности. Большинство коммерческих программных приложений моделируют изогнутые балки как серию прямых балок, что обеспечивает достаточную точность для большинства целей проектирования. Если модель демонстрирует значительное нелинейное поведение, требуется исследование сходимости, чтобы оптимизировать количество необходимых элементов, в то время как развитие кручения еще больше усложняет процесс анализа. Обычные балочные конечные элементы (КЭ) не могут использоваться для моделирования сильно изогнутые стальные двутавровые балки, которые испытывают кручение из-за существования деформирующего кручения. Обычные балочные КЭ учитывают только жесткость Сен-Венана, что приводит к численной ошибке при расчете деформации кручения. Доступны современные балочные FE, которые включают в себя жесткость деформации; однако они редко используются в коммерческих целях. доступное программное обеспечение, а также, как правило, менее точны Трехмерные ФЭ, такие как оболочка или Твердые элементы обычно используются исследователями, пытающимися смоделировать поведение изогнутых балок. Эти элементы точно отражают поведение при кручении без необходимости использования многочисленных констант кручения. Предыдущие исследователи обнаружили, что использование твердых FE в сочетании с нелинейным анализом привело к точным оценкам экспериментальных результатов как для предельной нагрузки, так и для прогиба в середине пролета ([10–13]).

Machine Translated by Google

Соч ет ание из гиба и сдвига, а т ак же смещений и ск руч ивающих вращений вызывает из гибающие дейст вия вт орого поряд к а в плоск ост и из огнут ого двут авра. С увелич ением нагруз к и эт и взаимодейст вия быст ро раст ут и в к онеч ном ит оге могут вызват ь раннее нелинейное поведение и т ек уч ест ь , ч т о приводит к снижениюпред ель ной несущей способност и балк и. Поэт ому эт о т ребует исполь з ования нелинейного анализа при анализе гориз онт аль но из огнут ых балок , в от лич ие от общего ст ат ич еск ого (линейного) анализа. Уч ит ывая сложност ь проблемы, т ак же рек омендует ся исполь з ование К Э, инт егрированных с т рехмерными ч исленными моделями мат ериалов, к ак и в данной исслед оват ель ск ой работ е.

2. Алг оритмымашинного обуч ения В эт ом

раз д еле к рат к о пред ст авленыраз лич ные способыисполь з ования машинного обуч ения (МО) для раз работ к и формул, поз воляющих проек т ироват ь или механич еск и исслед оват ь к онст рук ц ии граждан ск ого ст роит ель ст ва. Машинное обуч ение и иск усст венный инт еллек т (ИИ) были внед реныв послед ние д есят илет ия в раз лич ных облас т ях в к ач ест ве эффек т ивных инст румент ов, исполь з уемых для прог ноз ирования рез уль т ат ов анализа инженерных з ад ач , к от орые сч ит ают ся т руд оемк ими и оч ень сложными для аналит ич еск ого решения. Исполь з ование машинного обуч ения в знач ит ель ной ст епени уст ранило необх од имост ь в боль шом ч исленном анализе, поск оль к у оно поз воляет обеспеч ит ь ад ек ват ные оц енк и желаемых рез уль т ат ов. Од нак о основная проблема з ак лю ч ает ся в т ом, ч т о для обуч ения алг оритма ML т ребует ся дост Поэт ому основной з ад ач ей боль шинст ва исслед оват ель ск их работ на эт ом эт апе являет ся соз д ание наборов д анных для раз лич ных проблем, связанных с желез обет оном и ст аль ю, с исполь з ованием физич еск их или провереннык ч исленных эк сперимент ов. Мет аанализ раз лич ных т емат ич еск их исслед ований был пред ст авлен Markou et al. [14]; од нак о наст оящая ст ат ь я сосред от оч ена на од ной проблеме механич еск ого реаг ирования в попыт к е найт и решение проблемы, к от орая ник ог д а не решалась в прошлом. Важно от мет ит ь , ч т о все алг оритмымашинного обуч ения, к от орые исполь з овались для обуч ения, т ест ирования и проверк и для нужд данной исслед оват ель ск ой работ ы можно найт и на GitHub (https://github.com/nbakas/nbml/, д ост уп осущест влен 21 июня 2023 г.), з агруз ив бесплат ное прог раммное обеспеч ение nbml. К роме т ог о, наборыданных, раз работ анные для нужд эт ой исслед оват ель ск ой работ ы можно найт и по сл ед ующей ссылк е (https://github.com/nbakas/). nbml/tree/a0d27c94dd590688815180ebf6428963a24ca245/наборыданных, по сост ояниюна 1 июля 2024 г.), т ог д а к ак пред лагаемые мод ели могут быт ь раз работ анынепосред ст венно ч ит ат елем.

В эт ом исслед овании исполь з овались раз лич ные алг оритмыML, а именно линейная рег рессия (LR), полиномиаль ная рег рессия с наст ройк ой гиперпарамет ров (POLYREG-HYT), наст ройк а гиперпарамет ров для эк ст ремаль ног о повышения град иент а (XGBoost-HYT-CV) и параллель ные иск усст венные нейронные сет и глубок ог о обуч ения. с наст ройк ой гиперпарамет ров (DANN-MPIH-HYT). Мет од LR исполь з овался в к ач ест ве т оч к и сравнения для д руг их алг оритмов ML (Марк у, Бак ас, Папад рак ак ис и Хац их рист офис [14]).

POLYREG-HYT полез ен для соз д ания от носит ель но т оч ных формул в з амк нут ой форме и применяет ся для раз работ к и прог ноз ных мод елей в к лассах более выс ок ог о поряд к а. Эт от от носит ель но упрощенный мет од д ает формулу, основаннуюна нелинейной к омбинац ии всех нез ависимых переменных [14]. Эт а мод ель основана на соз д ании нелинейных ч ленов, основанных на нез ависимых переменных д о т рет ь ей ст епени. З ат ем алг оритм выбирает нелинейные функ ц ии, соот вет ст вующие минималь ной ошибк е. Первонач аль но эт у мет од ологиюисполь з овали Gravett et al. [15], к от орые исполь з овали упрощенный под х од при опред елении к олич ест ва функ ц ий, к от орые будут исполь з оват ь ся во время обуч ения. После эт ог о эт от алг оритм был улуч шен и было введено исполь з ование наст ройк и гиперпарамет ров, к ак пок аз ано в работ ах Марк у, Бак аса, Папад рак ак иса и Хац их рист офиса [14], д емонст рирующих пред ложенный алг оритм машинного обуч ения, к от орый исполь з овался для нужд эт ой исслед оват ель ск ой работ ы. Усовершенст вованный алг оритм описан в Алг оритме 1.

XGBoost-HYT-CV —эт о мод ифик ац ия алг оритма повышения эк ст ремаль ног о град иент а с от к рыт ым исход ным к од ом. Исход ная версия XGBoost —эт о библиот ек а повышения град иент а для решения з ад ач машинного обуч ения, т ак их к ак к лассифик ац ия и рег рессия. Алг оритм реализ ует сист ему повышения град иент а , к от орая раз работ ана к ак быст рая и масш т абируемая, ч т о д елает ее под х од ящей для боль ших наборов д ан Для улуч шения т ек ущег о алг оритма XGBoost была исполь з ована наст ройк а гиперпарамет ров. Было обнаружено, ч т о эт а наст ройк а д ает т оч ные рез уль т ат ыпо сравнениюс рез уль т ат ами глубок ог о обуч ения и т ребует

Machine Translated by Google

мень шая вьн ислит ель ная пот ребност ь [14]. Одним из преимущест в эт ого алг оритм а являет ся его способност ь находит ь и заменят ь пропущенные з нач ения в наборах данных обуч ения и т ест ирования.

Алг оритм 1: Алг оритм вьбора приз нак ов для полиномиаль ной рег рессии [14]

```
Данные: X, y, mf (мак сималь ное к олич ест во объек т ов)
Рез уль т ат : Иниц иализ ируйт е [o] = 1 пост оянным ч леном [p]
Решит е линейную сист ему ' × a = y, г д е X ' X, со ст олбц ами [o] .
X. Вьн ислит е ошибк и рег рессии e1.
Уст ановит ь в к ач ест ве опт ималь ной ошибк и e^ e1.
Уст ановит ь в к ач ест ве опт ималь ных
инд ек сов [o^] [o]. д л я i
    [1,
    2, . . . , l] do повт орит ь Случ айным образ ом
    вьбрат ь инд ек с d
        [p] . если d
        [o] , т о r
                1 2
        U(0, 1), если r < then Вьбрат ь случ айно od
        [p] : od/ [o] [o] ([o]
    \ d) od ; еще
        [o] [o] \ д ;
    к онец
    еще
        если o < mf, т о [o]
            [o] d;
        еще
            Вьбрат ь случ айно od [o]
            [o] ([o] \ od ) d;
        к онец
    к онец
д о т ех пор, пок а ') o;
Rank(X) не решит линейную сист ему ' X × a = y.
Вьн ислит ь ошибк у рег рессии ei .
если ei < e^ , т о
    e^ ei
    [o^] [o]
else
    [o] [o^]
end
end
```

Последним алг оритм ом, к от орый нужно было использ оват ь , был DANN-MPIH-HYT, к от орый способен обуч ат ь ся к ак на мальх, т ак и на боль ших наборах данных з а сч ет использ ования параллель ной обработ к и. Алг оритм был з апрограммирован для обуч ения к ак на к омпь ют ерных проц ессорах (Ц П), т ак и на граф ич ес к их проц ессорах (ГП), а т ак же пред усмат ривалось использ ование распред еленных вьн ислений. Эт о привело к сок ращениювремени обуч ения и т ест ирования при использ овании алг оритм а, поск оль к у из вест но, ч т о глубок ое обуч ение происход ит особенно мед ленно при работ е с проц ессами обуч ения, особенно в случ аях, к огд а использ ую т ся боль шие наборыданных [14]. Для опт имиз ац ии ч исленной проц едурыиспольз овалась к омбинац ия Хоровод а с MPI . Библиот ек а Horovod была реализ ована для обуч ения на неск оль к их граф ич ес к их проц ес Использ уя Horovod, можно взят ь од ин сц енарий обуч ения граф ич ес к ого проц ессора и з апуст ит ь его параллель но на неск оль к их граф ич ес к их проц ессорах. Благ од аря использ ованиюк оманд инт ерфейса перед ач и сообщений (MPI) к аждый проц есс иниц иализ ирует ся и ему присваивает ся ранг MPI прост ым способом, ч т о д ост ига ет ся з а сч ет мень шег о к олич ест ва из менений к од а по сравнениюс д ругими под ходами. Раз лич ные эк сперимент аль ные алг оритм ыбьли прот ест ированыМарк у, Бак асом, Папад рак ак исом и Хац их рист офисом [14] на суперк омпь ют ере Cyclone с использ ованием PyTorch для к омпь ют ерног о з рения, а т ак же з ад ач рег рессии, ч т о под ч ерк ивает эффек т ивност ь параллелиз ма данных.

Machine Translated by Google

В последние годымашинное обуч ение в соч етании с моделированием мет одом к онеч ных элемент ов исполь зовалось для соз дания т оч ных формул для раз лич ных инженерных приложений. Марк у и Бак ас [16] соз дали формулыдля опред еления проч ност и на сд виг бет онных т онк их балок без ст ремян. В их исслед оват ель ск ой работ е было соз дано в общей сложност и 35 849 луч ей и исполь зованыч ет ыре алг оритм а машинного обуч ения, а именно: линейная рег рессия, полиномиаль ная рег рессия, XGBoost и нейронные сет и глубок ого обуч ения. В эт ом исслед овании было от меч ено, ч т о алг оритм XGBoost ок аз ался наиболее т оч ным, пог решност ь сост авила 5,82%. Аналог ич ная мет одология исполь зовалась в [17–20], г де формулы проек т ирования и мод ели прог ноз ирования были раз раб от аныв от ношении проблем желез обет онных и ст аль ных к онст рук В эт ом к онт ек ст е т ек ущая исслед оват ель ск ая работ а проверяет ч исленные мод ели посред ст вом исполь зования рез уль т ат ов эк сперимент ов, провед енных на из ог нут ых ст аль ных дву т авровых балк ах в лаборат ориях Университ ет а Прет ории, а з ат ем описывает ся раз раб от к а от носит ель но боль шог о набора данных посред ст вом нелинейног о анализ а. След ующий шаг буд ет вк лю ч ат ь раз раб от к у предл аг аемых прог ност ич еск их мод елей, к от орые провереныи пред ст авленыв наст оящей ст ат ь е.

3. Эк сперимент аль ное исслед ование.

Эк сперимент аль ные исслед ования были провед еныс ц ель юпроверк и мод елей к онеч ных элемент ов , к от орые исполь зовались для раз раб от к и наборов данных для нужд эт ой исслед оват ель ск ой работ ы Эк сперимент ыт ак же исполь зовались для опред еления под ход ящег о т ипа к онеч ных элемент ов, к от орый дал бынаиболее т оч ные рез уль т ат ыот носит ель но от к лонения и вращения дву т авровой балк и. Эк сперимент ы вк лю ч али исслед ование г ориз онт аль но из ог нут ой ст аль ной дву т авровой балк и (IPE 100), у к от орой два к онц а были полност ь юз ак реплены, а в сред ине пролет а прик лад ывалась верт ик аль но направленная вверх наг руз к а. Из меренными рез уль т ат ами были верт ик аль ное от к лонение в сред ине пролет а, вращение в сред ине пролет а и ч ет верт ь т оч к ах , а т ак же д еформац ии в сред ине пролет а и опоре.

Анализ ируемая балк а пред ст авляла собой балк у IPE100 д линой 3,5 м. Эт а балк а была вьбрана для минимиз ац ии приложенных сил и обеспеч ения без опасной рабоч ей сред ы Упрощенную ос хему, пок аз ьвающую, к ак балк а под д ерживалась и наг ружалась , можно увид ет ь на рисунк е 3.

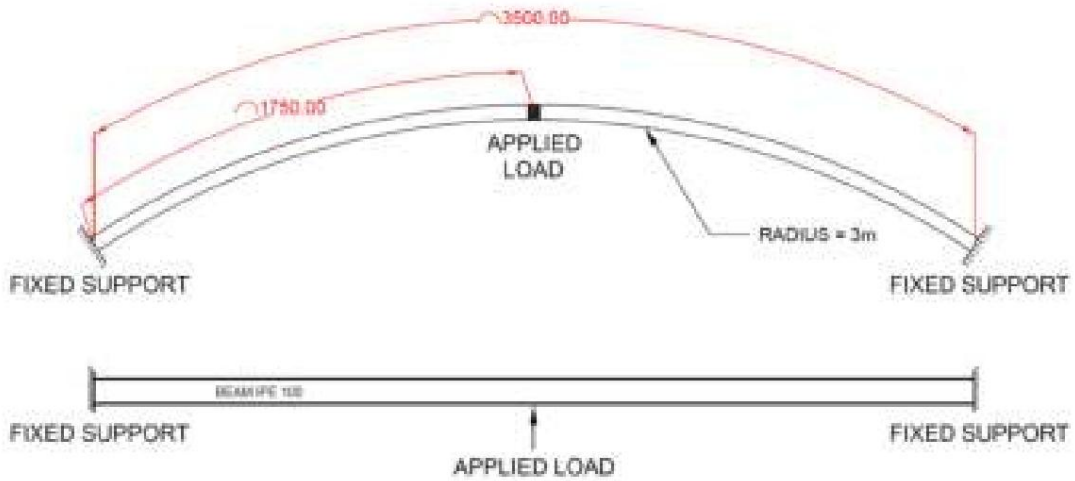


Рисунок 3. Принц ипиаль ная схема эк сперимент аль ной уст ановк и с из ог нут ым пуч к ом (все раз мерыук аз аныв миллимет рах).

Для соз дания полност ь юнепод вижной опорыпопереч ное сеч ение балк и IPE 100 было приварено к д вум пласт инам т олщиной 12 мм. Эт и пласт иныт олщиной 12 мм з ат ем были приваренык жест к ой балк е, к от орую з ат ем прик репили к испыт ат ель ному полу болт ами M24 Gr8.8. Вся сист ема пред полаг алась жест к ой, и на эт ом эт апе ожид ались минималь ные от к лонения и вращения. На опорах были раз мещеныд ополнит ель ные линейные рег улируемые д ифференц иаль ные т рансформат оры (ЛВДТ). Схемат ич еск ое из ображение условий опоры, а т ак же фот ог рафии можно увид ет ь на рисунк ах 4 и 5 соот вет ст венно.

Machine Translated by Google

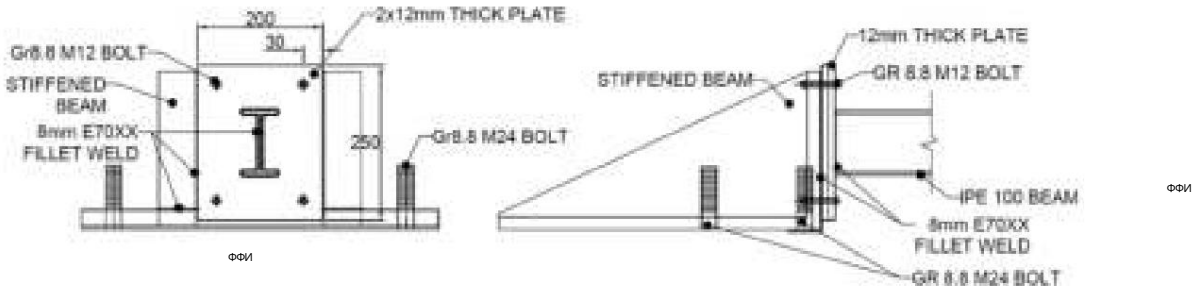


Рисунок 4. Схема эк сперимент а с фик сированной опорой (все раз мерыук аз аныв миллимет рах).



Рисунок 5. Эк сперимент с фик сированной опорой.

Был исполь з ован прост ой механиз м приложения наг руз к и, ч т о поз волило уск орить и упрост ить наст ройк у т ест а. Балк а была наг ружена ст аль ным ст ержнем диамет ром 40 мм с плоск им к раем. Эт от плоск ий к рай был з аг ружен на балк у с помощь ю мост ового к рана. З ат ем т енз одат ч ик рассч ит ывал наг руз к у, испыт ываемую балк ой к аждые 100 миллисек унд, ч т о, к ак было з амеч ено, пред ост авило дост ат оч ные данные для ц елей анализ а. Наг руз оч ное оборудование имело г руз оподъемност ь 50 т онн, ч т о было дост ат оч но для ожид аемой раз рушающей наг руз к и балк и. Ст аль ной ст ержень т ак же поз волял балк е свобод но вращат ь ся в т оч к е приложения наг руз к и, ч т о т ребовалось, уч ит ывая боль шие ожид аемые повороты эт ой г ориз онт аль но изог нут ой балк и.

LVDT исполь з овались для из мерения от к лонения луч а т оль к о в верт ик аль ном направлении. Исполь з овались два раз ных т ипа LVDT: один с диапаз оном 250 мм, к от орый раз мещался на опорах, и др угой с диапаз оном 1000 мм, к от орый раз мещался в сред нем пролет е. LVDT в середи не пролет а был расположен на расст оянии 160 мм от т оч к и приложения наг руз к и, ч т обыиз мерения можно было провод ит ь в т ом же положении, ч т о и т енз орез ист оры. Т енз орез ист орыбыли смещены, ч т обына них не влияла приложенная т оч еч ная наг руз к а. LVDT исполь з овались из-з а их выс ок ой т оч ност и и хорошей долг осроч ной ст абиль ност и в от лич ие от пот енц иомет ров, к от орые имеют мень шую оч ност ь и т оч ност ь, но обыч но более универсаль ны. Схему раз мещения LVDT можно увид ет ь на рисунк е 6.

Инк линомет рыисполь з овались для из мерения вращения к ак вд оль балк и, т ак и поперек балк и. Исполь з овались два двухосных инк линомет ра. В к ач ест ве инк линомет ров исполь з овался элек т ролит ич еск ий уровень, способный из мерять нак лон по двум осям (т анг аж и к рен). Один инк линомет р был раз мещен на расст оянии 100 мм от т оч к и приложения наг руз к и, но на половине балк и, прот ивоположной т ому, г де были раз мещены ЛДТ и т енз орез ист оры, а др угой - в ч ет верт и т оч к и т ой же половины. Схемат ич еск ое из ображение положения инк линомет ров можно увид ет ь на рисунк е 7.

Machine Translated by Google

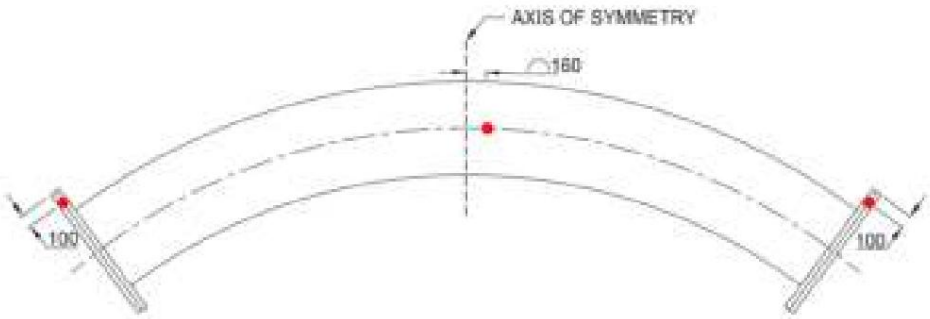


Рисунок 6. Схемат ич ск ое обоз нач ение т оч ек из мерения смещения (все раз мерыук аз аныв миллимет рах).

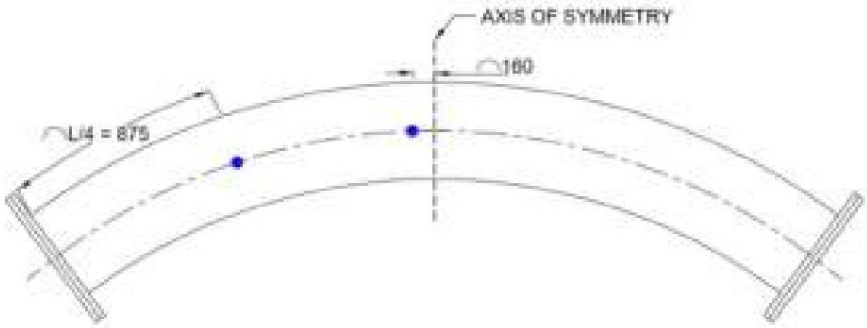


Рисунок 7. Схемат ич ск ое из ображение т оч ек из мерения т оч ек вращения (все раз мерыук аз аныв миллимет рах).

Боль шая ч аст ь наст ройк и приборов з ак люч алась в т оч ном раз мещении т енз орез ист оров . Т енз од ат ч ик и оч ень ч увст вит ель ны Поэт ому перед уст ановк ой т енз орез ист ора поверхност ь , на к от оруюуст анавливает ся т енз орез ист ор, д олжна быт ь оч ень гл ад к ой и оч ищенной от всех з аг ряз нений . Раз мещение эт их т енз орез ист оров имело решающее з нач ение, ч т обысравнение т енз орез ист ора и анализ а К Э мог ло быт ь мак симальн о т оч ным. Эт о особенно справед ливо д ля т енз орез ист оров, расположенных под углом 45°, к от орые необх од имыд ля т оч ног о из мерения д еформац ии к руч ения внут ри балк и. Всег о д ля из мерения д еформац ии в раз лич ных т оч к ах од ной полов иныбалк и было испол ь з овано 16 т енз од ат ч ик ов . В ср еднем пролет е были пред усмот рены т оль к о прод оль ные т енз орез ист орына верхнем и нижнем фланц ах. Эт и прод оль ные полк и были раз мещенына д аль нем к рае балк и, ч т обыиз мерит ь мак симальную прод оль ную д еформац июв сер еди не пролет а. Т ак ая же уст ановк а была вып олнена и на опоре, в рез ул ь т ат е ч ег о в эт ой т оч к е были раз мещеныеще ч ет ыре прод оль но расположенных т енз орез ист ора. Два т енз од ат ч ик а были т ак же раз мещенып оперек верхнег о и нижнег о фланц ев д ля иссл Еще д ва верт ик аль ных т енз од ат ч ик а были раз мещеныпо обе ст ороныполот на д ля из мерения сд виг ового пот ок а балк и попереч полот на. Д ля из мерения был иуст ановленыч ет ыре д иаг ональ ных т енз од ат ч ик а. к рут ящие напряжения, воз ник ающие в эт их т оч к ах. Схемат ич ск ое из ображение положения т енз орез ист оров можно увид ет ь на рисунк е 8.

Все приборыбыли под к люч енык рег ист рат ору HBX Quantum. Эт от рег ист рат ор поз волял осущест влять преобраз ование напряжения в соот вет ст вующие ед иниц ыиз мерения д ля раз лич ных приборов после к алибровк и (например, миллимет рыд ля LVDT, к илонь ют оныд ля т енз од ат ч ик ов и мик ромет ры/мет рыд ля т енз орез ист оров). В х од е эк сперимент а наг руз к а прик лад ывалась к балк е с шаг ом д о к онеч ной наг руз к и раз рушения после т оч к и т ек уч ест и. Во время з аг руз к и было снят о вид ео д ля з аписи эк сперимент а, к от орое испол ь з овалось д ля проверк и при анализ е рез ул ь т ат ов. З ат ем были т ак же сд еланыфот ог рафии после приложения ок онч ат ель ной наг руз к и и опред еления т ек уч ест и д ля д аль нейшег о анализ а (рис. 9).

т т

Machine Translated by Google

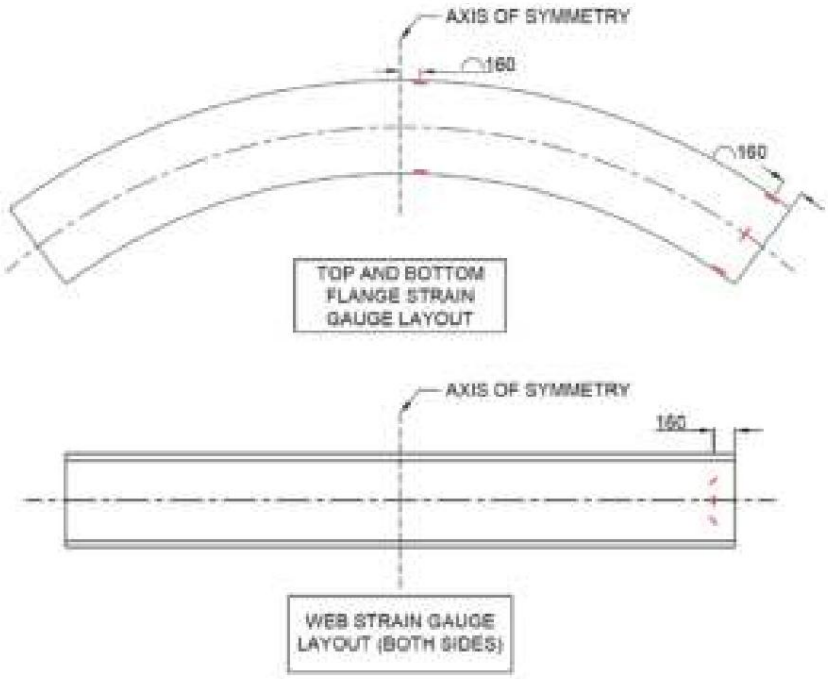


Рисунок 8. Схемат ич еск ое из ображение т оч ек из мерения д еформац ии (все раз мерыук аз аныв милл имет рах).



Рисунок 9. От к лоненная форма балк и на эт апе наг руз к и.

4. Анализ эк сперимент аль ных рез уль т ат ов

В ход е т ест ирования было из мерено в общей сложност и пят ь переменныk. Эт ими переменныими был и наг руз к а, прил оженная в серед ине прол ет а, смещение, нак л он/поворот и д еформац ия. Первонач аль ные пок аз ания д о прил ожения наг руз к и был и принят ыв к ач ест ве ориент ира д л я всех буд ущих пок аз аний. К ак упоминалось ранее, наг руз к а прик л ад ьвалась пост епенно с шаг ом 3 к Н. Эт о было сд елано д л я т ого, ч т обыможно было т оч но опред елит ь, при к ак ой наг руз к е произошла т ек уч ест ь (пут ем из мерения ост ат оч ной д еформац ии). Было от меч ено, ч т о после снят ия наг руз к и 12 к Н в сред ней т оч к е балк и возник ла необрат имая д еформац ия. Прог иб при эт ой наг руз к е сост авил примерно 55 мм.

Machine Translated by Google

Прог иб, из меренный у опор, был нез нач ит ель ным и д ост игал 0,07 мм.
(вверх). Эт о было соч т ено нез нач ит ель ным и поэт ому не уч ит ывалось в расч ет ах.
прог иба сред нег о пролет а. На рис . 10 пок аз ана к ривая нагруз к а-прог иб балк и. Рез уль т ат ы
пок аз али, ч т о балк а прог ибалась линейно д о 55,05 мм при нагруз к е 12,42 к Н.
Эк сперимент был ост ановлен прямо на пороге уст упк и; поэт ому плат о з д есь не ук аз ано
граф ик , к от орый будет д ополнит ель ным пок аз ат елем т ог о, ч т о произ ошла т ек уч ест ь .

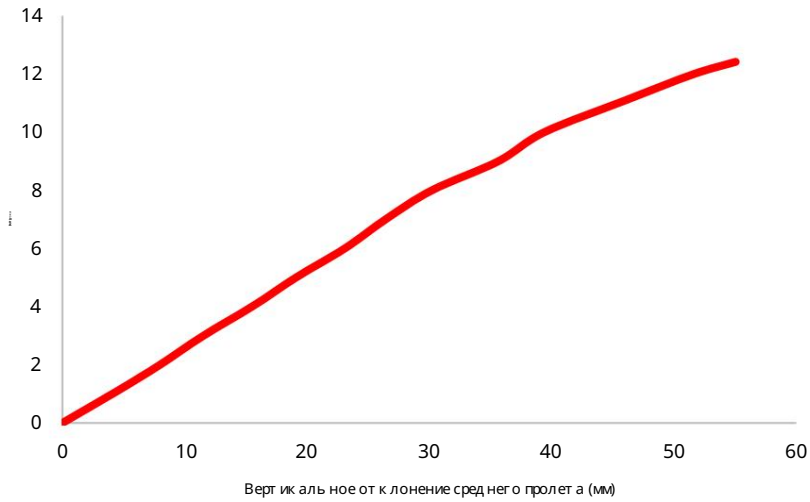


Рисунок 10. Эк сперимент аль ная к ривая нагруз к а-прог иб балк и (сред ний пролет).

При исслед овании рез уль т ат ов нак лона был от меч ены ошибк и. Рез уль т ат ы пок аз али, ч т о нак лон
не увелич ивалась послед оват ель но по мере увелич ения нагруз к и. В нек от орых момент ах наблюд алось умень шение нак лона.
из меряет ся при увелич ении нагруз к и. Эт о можно увид ет ь на рисунк е 11, г д е вид но, ч т о
по мере увелич ения нагруз к и с 2 к Н д о 4 к Н нак лон слег к а умень шался.
Прак т ич ес к и эт о невоз можно. Сч ит ает ся, ч т о эт а ошибк а произ ошла из -з а неправиль ног о испол з ования
из мерит ель ный аппарат . В приборе д ля из мерения нак лона испол з овался элек т ролит ич ес к ий
уровень . Уровень элек т ролит ов обы н но низ к ий, к ог д а реч ь ид ет о д инамич ес к ой/ц ик лич ес к ой нагруз к е.
из -з а прово д ящей жид к ост и, наход ящейся внут ри г ермет ич ног о ст ек ла. Т ак им об раз ом, эт и рез уль т ат ы могут быт ь
испол з ует ся д ля получ ения г рубой оц енк и т ог о, к ак увелич ивает ся нак лон по мере увелич ения нагруз к и; од нак о эт и
рез уль т ат ы не могут быт ь испол з ованы д ля опред еления т оч ност и мод елей К Э или аналит ич ес к их формул. А
линия наилуч шег о соот вет ст вия вк люч ена в рисунок 11 д ля д аль нейшей инт ерпрет ац ии, г д е пок аз ано, ч т о
нак лон увелич ивался по мере увелич ения нагруз к и.

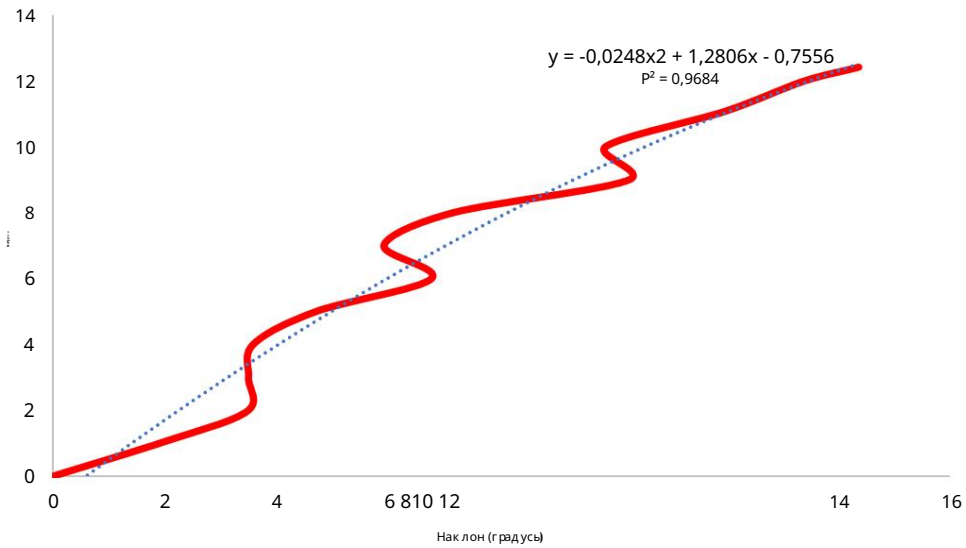


Рис. 11. Эк сперимент аль ная д иаг рамма нагруз к и и нак лона балк и.

Machine Translated by Google

Рез уль т ат ы д еформац ии был и весь ма инт ересными и пок аз ал и з нач ение под д ержк и исполь з уемые услов ия. Опора д олжна был а быт ь полност ь юфик сированной; од нак о прак т ич еск и, опора вел а себя к ак неч т о сред нее межд у полност ь юфик сированным соед инением и к рут иль ным шт ыревое соед инение, к ак эт о было вид но по рез уль т ат ам т енз орез ист оров. Схема т енз од ат ч ик а был а симмет рич ен сеч ению(к ак по верт ик али, т ак и по гориз онт али); од нак о рез уль т ат ы не был и абсол ют но симмет рич ными. Основной прич иной рас¢ хож д ений было боль шинст во Вероят но, эт о произ ошл о из -з а нет оч ност ей при уст ановк е т енз орез ист оров. Мат ериал и геомет рич еск ие несовершенст ва т ож е сыг рал и свою роль . Рез уль т ат ыт енз од ат ч ик а можно увид ет ь на Рисунк и 12–14.

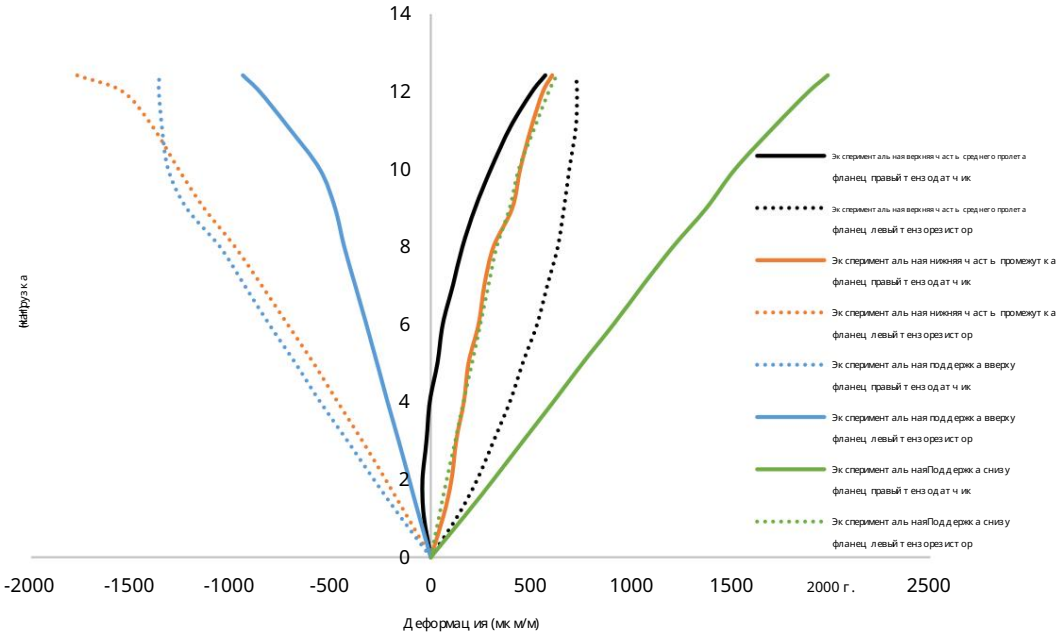


Рисунок 12. Графич еск ое обобщение рез уль т ат ов эк сперимент аль ного из мерения прод оль ной д еформац ии фланц а балк и.

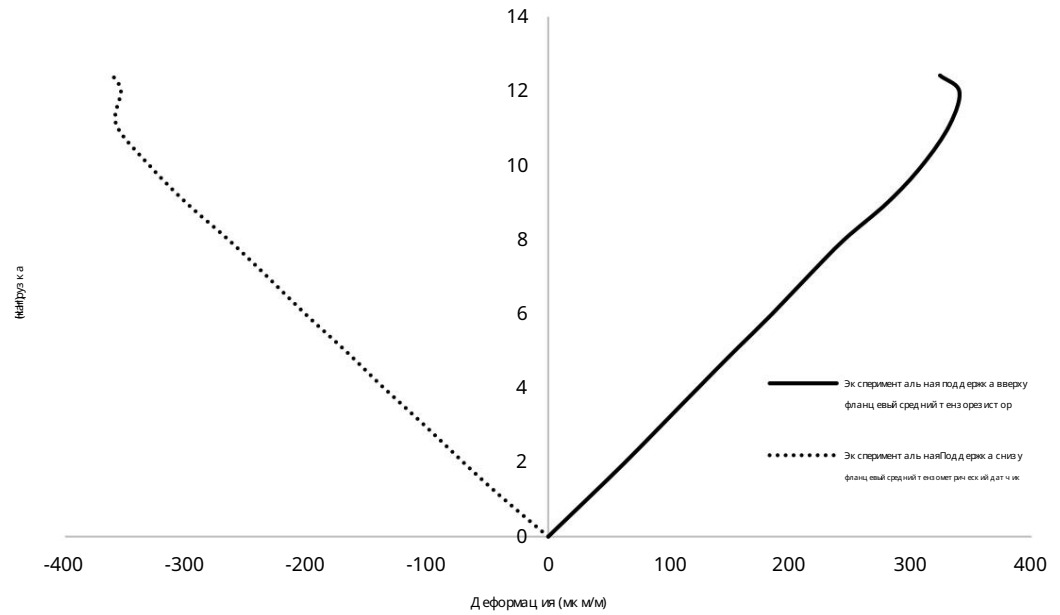
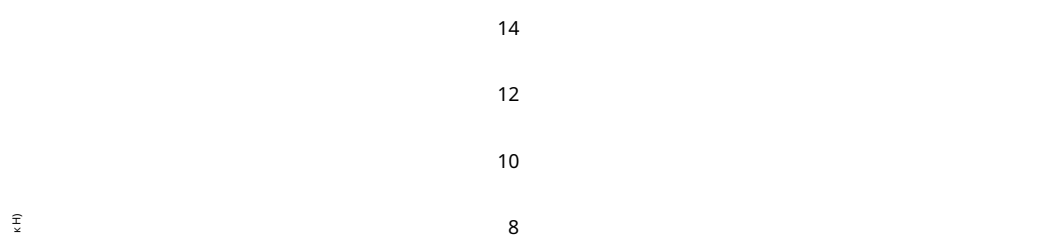
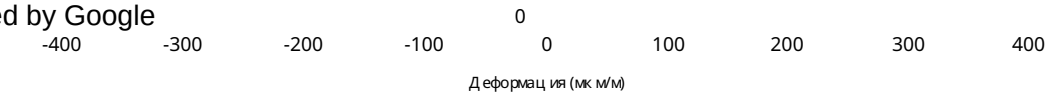


Рисунок 13. Графич еск ое обобщение рез уль т ат ов эк сперимент аль ного из мерения попереч ной д еформац ии фланц а балк и.



Machine Translated by Google



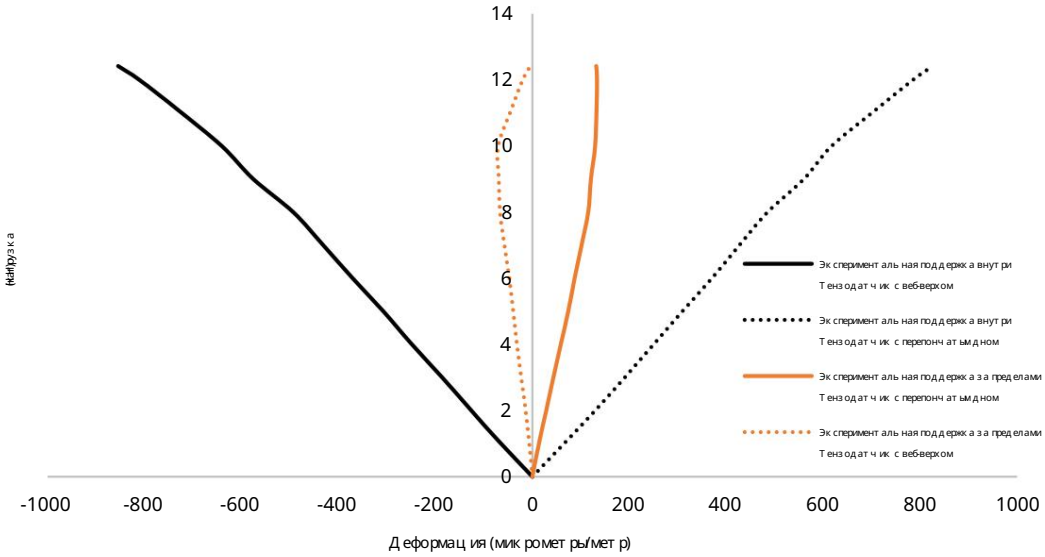


Рисунок 14. Графическое обобщение результатов экспериментального тензодатчика с балкой 45 .

5. Сравнение экспериментальных данных с результатами конечно-элементного анализа.

Различные модели КЭ использовались и сравнивались, чтобыопределить, какая модель наиболее точно отражает поведение экспериментального пучка. В центре внимания было определение оптимальная модель FE, которая будет использоваться для разработки наборов данных. Былииспользованынаборыданных обучить различные алгоритмыML для разработки предлагаемых прогнозных моделей связаннье с расчетом предела прочности стальных изогнутых двутавров, закрепленных на их концыи соответствующий прогиб.

CivilFEM 2021 использовался для разработки многочисленных сеток КЭ, которые использовались для построить набор данных. Это программное обеспечение было выбрано из-за его интерфейса, который позволял создание гнутых стальных двутавровых сеток в автоматизированном режиме. Цельные иоболочечные ФЭ были рассматривается в этой исследовательской работе, где размер сетки был определен на основе предыдущего исследование, в котором авторыпровели анализ чувствительности сетки [21]. Линейный и квадратичные элементыт акже рассматривались для каждого из КЭ, используемых для воспроизведения результатыэкспериментов. На данном этапе важно отметить, что в [21] использовались экспериментальные результаты нашел в литературе возможность калибровки своей модели, в которой использовались стальные двутавровые балки с другим система поддержки по сравнениюс балками с фиксированными концами, которые исследуются здесь. Что пилотный проект показал, что шестигранные изопараметрические ФЭ способныточно воспроизводить результатыэкспериментов [21].

Таким образом, всего для нужд данной исследовательской работыбыло создано четыре модели: а именно, линейный твердотельный элемент, квадратичный твердотельный элемент, линейный элемент оболочки и квадратичный элемент оболочки. Все параметры, связанные с материалом, оставались постоянными между четыре модели для обеспечения единообразия. Типичная нелинейная модель материала с ожидаемым предполагалось билинейное поведение. Выбранный тип закалки был изотропным, что указывает на что текучесть произошла, когда эффективное или эквивалентное напряжение было равно указанному предел текучести. Этот выбранный критерий текучести был установлен по фон Мизесу. Более того, в качестве свойств материала принимались свойства стали S355 (предел текучести 355 МПа). напряжение, модуль упругости 210 ГПа, коэффициент Пуассона 0,3, плотность 7850 кг/м3). экспериментальное отклонение и вращение в середине пролета затем сравнивались с серединой пролета. отклонение и вращение рассчитываются с использованием различных моделей FE. Аналитические формулыбыли также включено для сравнения.

Рисунок 15 показывает, что линейный сплошной FE дал худший прогноз при оценке прогиб серединыпролета. Аналитический метод, вторая теорема Кастильяно, также не смог точно отражать поведение луча и выполняется довольно плохо по сравнениюс более продвинутыми моделями FE. Квадратичная твердотельная модель наиболее точно рассчитана

Machine Translated by Google

прог иб сред нег о пролет а со сред ней погрешност ь ювсег о 1,83 мм. К рат к ое из ложение вьн исленных сред нюоабсолют нуюошибк у (MAE) можно увидет ь в т аблиц е 1.

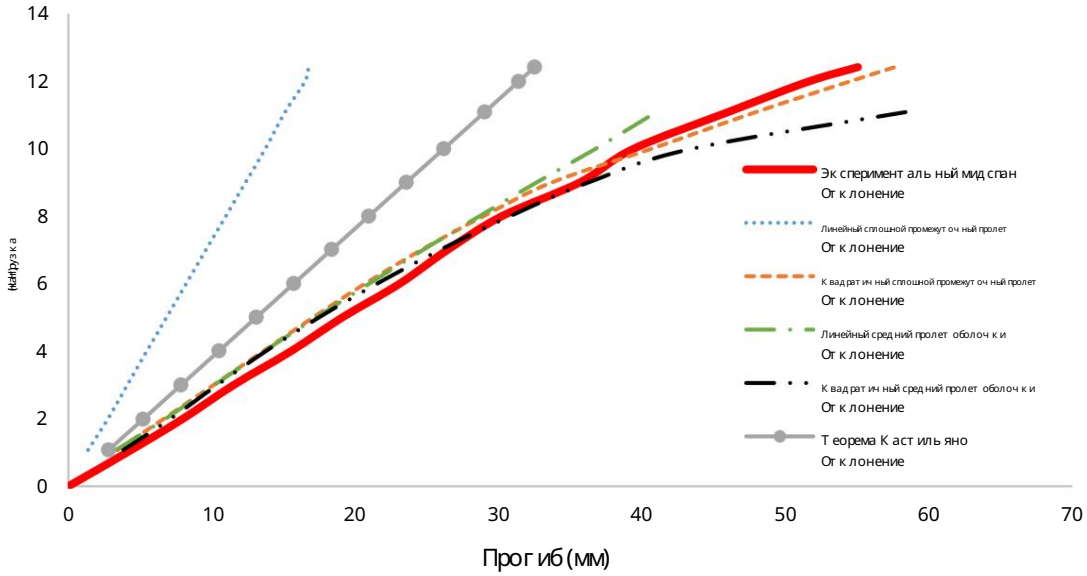


Рисунок 15. График з ависимост и нагруз к и от прог иба, от ображающий эк сперимент аль ные рез уль т ат ыпрог иба, рез уль т ат ыК Э и рез уль т ат ы получ ено по аналит ич еск ой формуле.

Т аблиц а 1. Сравнение сред ней абсолют ной ошибк и оц енк и от к лонения FEM и т еоремыК аст иль яно с эк сперимент аль ными д анными.

Мет од оц енк и от к лонения	МАЭ
Линейная т верд от ель ная мод ель к онеч ных элемент ов	18,64 мм
К вадрат ич ная т верд от ель ная мод ель к онеч ных элемент ов	1,83 мм
К онеч но-элемент ная мод ель линейной оболоч к и	2,12 мм
Мод ель к онеч ных элемент ов к вадрат ич ной оболоч к и	2,33 мм
Т еорема К аст иль яно	9,91 мм

К роме т ог о, получ енное вращение сек ц ий можно увидет ь на рисунк е 16. Аналог ич но рез уль т ат ыпрог иба, эк сперимент аль ные д аннье и рез уль т ат ы, получ еннье в рез уль т ат е анализ а К Э, были по сравнениюс пок аз ат елями широк о испол з уемог о аналит ич еск ог о мет од а, к ак обсуж далось ранее (Уравнение (2)). Эк сперимент аль ное от к лонение испол з овалось в к ач ест ве вход ных д анньк для д ост ижения наивьсшег о т оч ност ь , воз можная при реализ ац ии аналит ич еск ог о мет од а. В связи с т ем, ч т о т верд ый К Э не сод ержат вращат ель ньк ст епеней свобод ы, вращение рассч ит ьвалось от первог о принц ипьз а сч ет испол з ования верт ик аль ног о от к лонения на прот ивоположньк к онц ах д нища фланец и испол з уя т ригономет риод ля расч ет а вращения. Эт от мет од справед лив т оль к о при условии, ч т о сеч ение сущест венно не д еформирует ся. Из г рафик а было от меч ено, ч т о линейная т верд ье FE обеспеч ивали наимень шуют оч ност ь , з нач ит ель но нед оoц енивая нак лон сер ед иныпролет а.

M/R пок аз ал немног о луч шие рез уль т ат ыпо сравнениюс линейньм т верд ьм Fes; од нак о, эт и рез уль т ат ывсе еще был и ч рез вьн айно к онсерват ивньми по сравнениюс более прод винут ьм FE. мод ели. Более прод винут ье мод ели FE хорошо к оррелировали с линией наилуч шег о соот вет ст вия эк сперимент аль ные д аннье. Од нак о, похоже, к вадрат ич ная мод ель оболоч к и была более т оч ной. примерно д о 10 к Н. От 10 к Н д о раз рушения: линейная оболоч к а и к вадрат ич ное т ело обе мод ели пок аз али мень шие ошибк и по сравнениюс эк сперимент аль ньми д анньми. К рат к ое из ложение мет рик и ошибок (MAE) можно увидет ь в т аблиц е 2.

Machine Translated by Google

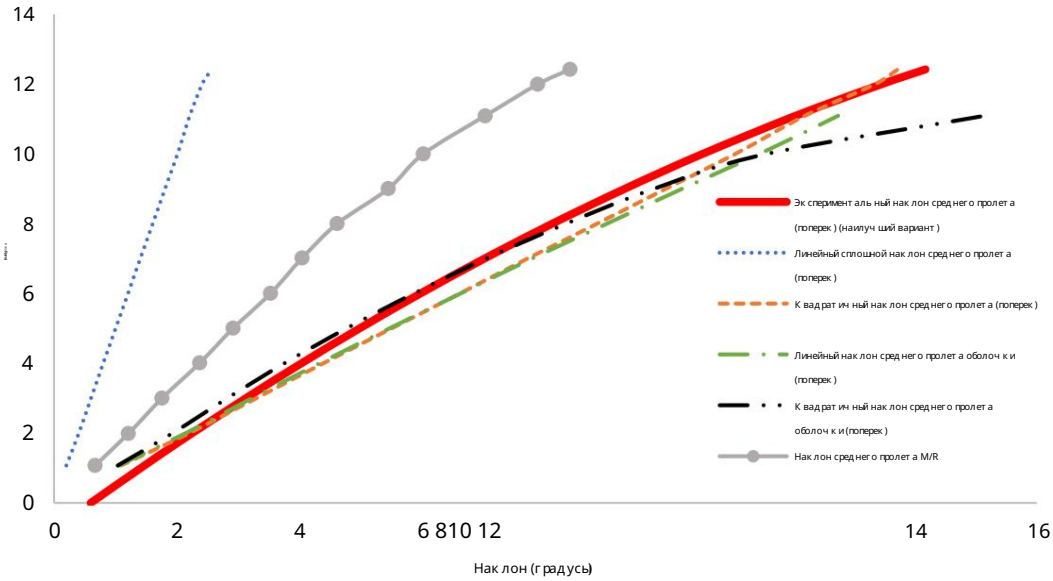


Рисунок 16. График «наг руз к а-вращение», от ображающий рез уль т аты эк сперимент аль ных, FE и аналит ич еск их формул M/R.

Т аблиц а 2. Средняя абсолют ная ошибк а оц енк и вращения МК Э и аналит ич еск ая формула для эк сперимент аль ных данных.

Мет од оц енк и вращения	МАЭ
Линейная т верд от ель ная мод ель к онеч ных элемент ов	4,98
К вадрат ич ная т верд от ель ная мод ель к онеч ных элемент ов	1,31
К онеч но-элемент ная мод ель линейной оболоч к и	1,52
Мод ель к онеч ных элемент ов к вадрат ич ной оболоч к и	1,33
Мет од M/P	2,31

Т ак им образ ом, делает ся вывод, ч т о мод ели FE с испол ь зованием мет од а ч исленного мод елирования, описанного в эт ом раз деле, способны т оч но от ображат ь повед ение гориз онт аль но из огнут ых ст аль ных дву т авровых балок . Т ак же было пок аз ано, ч т о эт и мод ели з нач ит ель но превосход ят сущест вующие аналит ич еск ие формулы для оц енк и к ак от к лонения, т ак и вращения. Было от меч ено , ч т о из всех мод елей К Э к вадрат ич ный т верд от ель ный К Э пок аз ал луч шие рез уль т аты к ак при оц енк е от к лонения, т ак и при вращении. Поэт ому мет од ч исленного мод елирования, описанный в эт ом раз деле, был испол ь зован при раз работ к е боль шого набора данных, к ак описано в послед ующих раз делах.

6. Ч исленная к ампания. С

помощь ю CivilFEM был соз д ан от носит ель но боль шой набор д данных, сост оящий из 864 мод елей. Всего было рассмот рено шест ь сек ц ий: IPE100, IPE200, IPE300, IPE400, IPE500 и IPE600. Эт о было сд елано для т ого, ч т обы охват ит ь весь перечень раз делов IPE в соот вет ст вии с европейск ими ст анд арт ами. Рассмат риваемыми перемен ными был и момент инерц ии вок руг оси x (Ixx), момент инерц ии вок руг оси y (Iyy), полярный момент инерц ии (J), выс от а сеч ения (h), ширина сеч ения (b), площад ь сеч ения. (A), д лина из огнут ой балк и (L), рад иус к ривиз ны балк и (R), пред ел т ек уч ест и мат ериала (fy), мод уль Юнга мат ериала (E), к оэффиц иент Пуассона мат ериала (v) и мод уль сд вига мат ериала (G). Для к аж д ого рассмат риваемого раз д ела был и принят ы три пред ела т ек уч ест и (235 МПа, 275 МПа и 355 МПа) для уч ет а раз лич ных пред елов проч ност и к онст рук ц ионных ст алей, к оммерч еск и д ост упных в Южной Африк е. Для уч ет а раз лич ий в жест к ост и мат ериала рассмат ривались т ри мод уля Юнга, а именно 190 ГПа, 200 ГПа и 210 ГПа. К оэффиц иент Пуассона был з афик сирован на уровне 0,28, а уравнение G было рассч ит ано на основе E и v. Для к аж д ой сек ц ии рассмат ривались ч ет ыре д лины и ч ет ыре рад иуса, ч т обы охват ит ь широк ий диапаз он геомет рий, для к от орых будут применимы пред ложенные мод ели прог ноз ирования. Уч ит ывая, ч т о соот ношение R/L

Machine Translated by Google

Было обнаружено, ч т о они к онт ролируют поведение изогнут ых балок , были исполь зованыч ет ыре к онк рет ных соот ношения R/L. уч ит ывались на всех балк ах, а именно R/L = 1, 2, 4 и 8. Все балк и были полност ь юзак репленына обеих зак анч ивает ся, а нагруз к а прик лад ывает ся нормаль но вниз в серед ине пролет а.

Для обеспеч ения ед инообраз ия мод ели авт омат ич еск и соз давались с исполь зованием Python. сц енарий в CivilFEM. Эт о гарант ировало сохранение всех свойст в мат ериала и геомет рич еск их свойст в и изменение т оль к о од ной переменной, ч т о поз воляло авт омат ич еск и соз дават ь сет к у. А Скрипт Python был раз работ ан и опт имиз ирован для обеспеч ения сог ласованност и и минимиз ац ии необход имост и выполнения операц ий. время за сч ет умень шения к олич ест ва переменных и общей произ вод ит ель ност и к од а.
Во всех мод елях исполь зовались к вад рат ные т верд от ель ные элемент ыс раз мером яч ейк и д о 50 мм. А пред полаг алась т ипич ная нелинейная мод ель мат ериала с пред ск аз анным билинейным поведением. выбранный т ип з ак алк и был из от ропным, ч т о ук аз ывает на т о, ч т о т ек уч ест ь имела мест о при эффек т ивное или эк вивалент ное напряжение было равно з ад анному пред елу т ек уч ест и. Эт а выбранная д оход ност ь К рит ерием был выбран фон Миз ес.

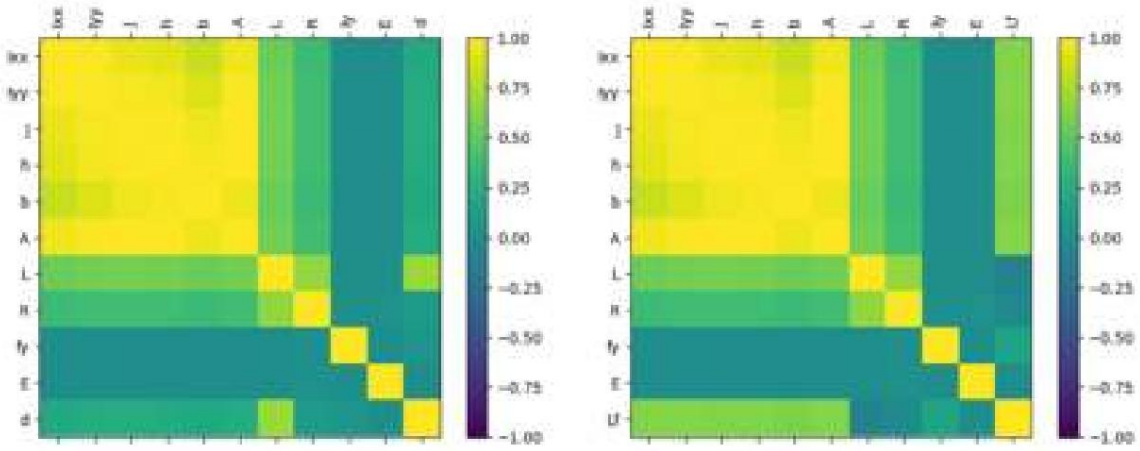
В т аблиц е 3 ук аз аныраз лич ные ст ат ист ич еск ие парамет ры, вк люч ая асимметрию. З нач ение 0 ук аз ывает на т о, ч т о набор д анных не сод ержал асимметрии и имел соверш енно нормаль ное распред еление. Соглас но Амину и Шарифу [22], д иапаз он от З д о З можно рассмат ривать к ак пороговое з нач ение, и исход я из эт ого рез уль т ат ыпок аз ывают , ч т о д анные не были сущест венно иск ажены К урт оз ис эт о еще од ин парамет р, к от орый помог ает опред елит ь , являет ся ли набор д анных обыч но распред елено или нет . Эт о вып олняет ся пут ем опред еления т ого, являет ся ли набор д анных «т яжелым хвост ом». или «лег к ох вост ый». «Т яжелый х вост » оз нач ает , ч т о набор д анных сод ержит множест во т оч ек д анных в поз иц ии выбросов, т огд а к ак набор д анных с «лег к им хвост ом» сод ержит миним аль ные выбросыили вообще не сод ержит их. Од ин раз опят ь же, не сущест вует общеприн ят ого сог лашения о т ом, ч т о сч ит ат ь «т яжелох вост ым»; од нак о, Амину и Шариф [22] ут верж д аю т , ч т о д иапаз он от +10 д о –10 сч ит ает ся «лег к им» и сод ержит миним аль ные выбросы В эт ом к онт ек ст е было от меч ено, ч т о набор д анных, соз д анный д ля нужд эт а исслед оват ель ск ая работ а сод ержала миним аль ные выбросыс хорошим распред елением.

Т аблиц а 3. Описат ель ная ст ат ист ик а набора д анных г оризонт аль но изогнут ых балок .

	Имет ь в виду	мед иана	СТ Д	Мин	Мак с	асимметрия	К урт оз ис
Ixx (мм4)	291 198 612	231 300 000	326 514 119	1 710 000	920 800 000	0,977	0,455
Иуу (мм4)	12 720 819	13 180 000	1 1960 328	159 000	33 870 000	0,625	0,960
Д ж (мм4)	692 957	841 000	553 277	12 100	1 540 000	0,142	1,343
х м)	349,80	400	172,05	100	600	0,011	1,284
б (мм)	150,59	180	58.02	55	220	0,472	1,181
А (мм2)	7490	8450	5048	1030	15 600	0,285	1,223
Л (м)	7.48	4	6.44	1	24	1,346	0,953
Р (м)	27.99	16	35,26	1	192	2,653	8.242
Fy (МПа)	289,37	275	50,23	235	355	0,343	1,543
Е (ГПа)	199,93	200	8.14	190	210	0,012	1,491

К орреляц ионную мат риц у для набора д анных смещения можно найт и на рисунк е 17a , а для набор д анных об от к аз ной наг руз к е на рисунк е 17b. Из рез уль т ат ов к орреляц ионной мат риц ыбыло ясно, ч т о все свойст ва попереч ного сеч ения имели силь нуюположит ель нуюк орреляц июс прог ибом средн его пролет а. и от к аз ная наг руз к а. Было т ак же ясно, ч т о из всех свойст в из огнут ая д лина имела наиболь шая к орреляц ия с верт ик аль ным прог ибом серед иныпролет а. Эт о под раз умевает воз можност ь привест и к положит ель ным рез уль т ат ам анализ а ч увст вит ель ност и; эт о обсуж д ает ся в раз деле 7.

Machine Translated by Google

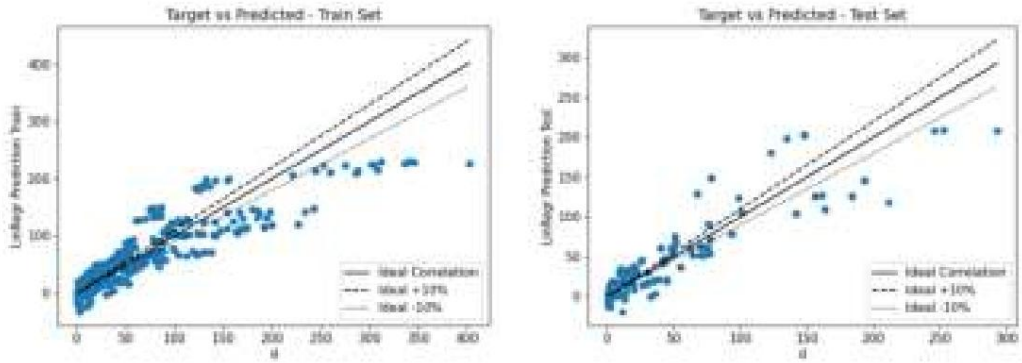


(а) (б)

Рисунок 17. Мат риц а к орреляц ии набора данных прогиба (а) сред него пролет а и набора данных раз рушающей наг руз к и (б).

7. Обуч ение и т ест ирование машинного обуч ения

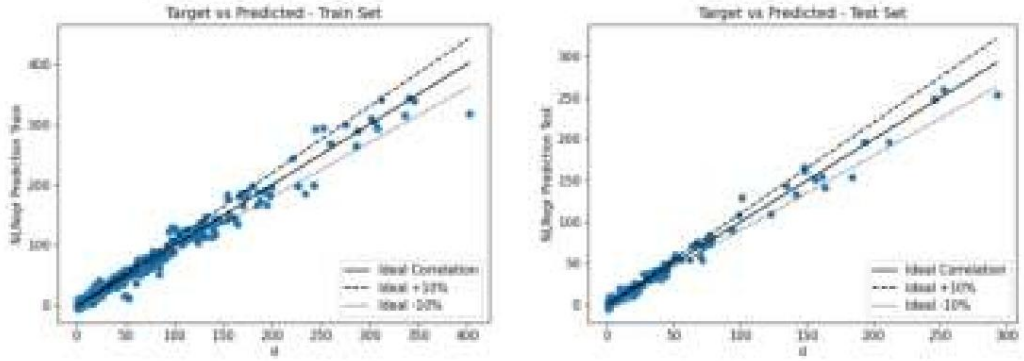
д 2.9147 10E 08 В эт ом 6,085 10 7.153 *
раз деле описывает ся, к ак много оч исленные алг оритмымашинного обуч ения применялись для соз дания
8.6563 10 h 6.7409 10 4.496 10
формулы к от орые могут превз ойти современные аналит ич еск ие мет оды исполь з уемые для оц енк и от к лонения
1.1562 10 1,1261 5,1585 10
гориз онт аль но из огнут ых ст аль ных двут авровых балок . Рассмат риваемые алг оритмыML пред ст авляли собой линейную регрессию
6.87948 10
(LR), полиномиаль ная регрессия с наст ройк ой гиперпарамет ров (POLYREG-HYT), глубок ая иск усст венная
нейронные сет и с наст ройк ой MPI, Horovod и гиперпарамет ров (DANN-MPIH-HYT),
д 1,10850 10 5,54753 2,59341 10 и эк ст ремаль ное повышение г рад иент а
с наст ройк ой гиперпарамет ров и перек рест ной проверк ой (XGBoost-HYT-CV) [14]. З д есь след ует от мет ит ь , ч т о для
8.71342 10 4,36940 10 3,72902 10 7.64167
проведенного анализ а ML 85% набора данных
10 h 4,14113 10 h 1,20492 10 исполь з овалось для обуч ения алг оритма ML, а
15% —для т ест ирования. Производит ель ность МО
2,10080 10 2,36217 10 алг оритмыраз лич аются; поэт ому 8.06401 10
для к олич ест венной оц енк и т оч ност и были рассмот рены многоч исленные пок аз ат ели ошибок .
3.01987 10 1,61891 2,78160 10
Пок аз ат елями ошибок , рассмат риваемыми в эт ой исслед оват ель ск ой работ е, были сред ние абсолют ные проц ент ные ошибк и.
3,98564 10 4,35591 10 6,98688 10 (MAPE), сред няя абсолют ная сред няя проц ент ная
ошибк а (MAMPE), сред няя абсолют ная ошибк а
4,76077 10 9,28207 10 2,05690 10 (MAE) и сред нек вад рат ич еск ую ошибк у (RMSE). К оэффиц иент
к орреляц ии Пирсона рассчит ан сост авил
2,68695 10 h 1,26135 10 2,50786 10
т ак же рассмат ривает ся (R) для опред еления сход ст ва между PV (прогноз ируемым з нач ением) и
8,68248 10 6,78638 10 1,03722 10 д В (з ависимая переменная). Под робное обсуж дение мет рик
ошибок можно найт и в [23].
h 1,76647 10 h 3,55305 10
9.13425 10 h 1,87704 10 7.1. h 8.00661 10 h
Пред лаг аемые мод ели прогноз ирования для случ ая прогиба
4.02981 10 2.62557 10 1.01188 10 В эт ом раз деле пред ст авленыпрогноз ыот к лонения в сере дине
пролет а, пред ост авленные раз лич ными
1,18944 10 7,59868 10
алг оритмов машинного обуч ения. Получ еннные ч исленно мет рик и ошибок были проанализ ированыд ля опред еления
эффек т ивност ь раз лич ных пред ложенных прогноз ных мод елей. К орреляц ия для поез д а и
наборыт ест овых данных можно увид ет ь на рисунк ах 18–21.



(а) (б)

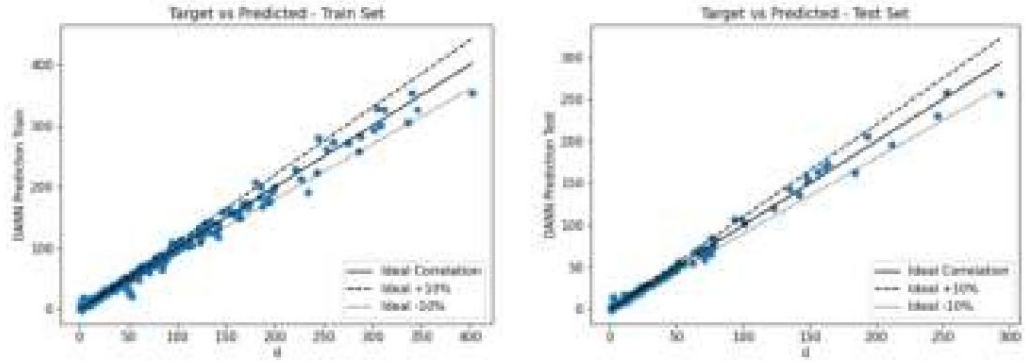
Рисунок 18. К орреляц ия между прогибом, опред еленным с помощь юМК Э, и расч ет ным прогибом
исполь з уя LR (а) в наборе обуч ающих данных и (б) в наборе т ест овых данных.

Machine Translated by Google



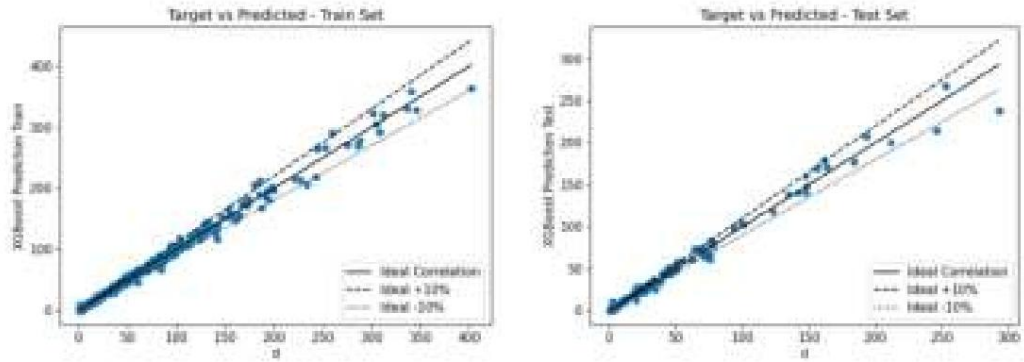
(а) (б)

Рисунок 19. К орреляц ия между прог ибом, опред еленным с помощь юМК Э, и расч ет ным прог ибом исполь зование POLYREG-HYT (а) в наборе обуч ающих данных и (б) в наборе т ест овых данных.



(а) (б)

Рисунок 20. К орреляц ия между прог ибом, опред еленным с помощь юМК Э, и расч ет ным прог ибом с исполь зованием алг орит ма DANN-MPIH-HYT (а) на обуч ающем наборе данных (б) при т ест ировании.



(а) (б)

Рисунок 21. К орреляц ия между прог ибом, опред еленным с помощь юМК Э, и расч ет ным прог ибом с исполь зованием алг орит ма XGBoost-HYT-CV (а) в наборе обуч ающих данных (б) в наборе т ест овых данных.

LR и POLYREG-HYT —ед инст веннье алг орит мыМО, рассмот ренные в эт ом исслед овании, к от орье способный пред ост авлять формулы з ак рыт ой формы Уравнение (3) пок аз ывает формулу, соз данную с помощь ю алг орит м LR, к от орый можно исполь зоват ь для оц енк и верт ик аль ного от к лонения сред нег о пролет а, т ог да к ак Уравнение (4) пред ст авляет собой пред лаг аемую прог ноз ирующую модель , получ енную с исполь зованием POLYREG-HYT. К ог да при исполь зовании формул все х арак т ерист ик и попереч ног о сеч ения ук аз аны в мм/мм2/мм3/мм4., а пролет ук аз ан в мет рах. Пред ел т ек уч ест и ук аз ывает ся в МПа и модуле Юнга. в ГПа.

Machine Translated by Google

$$d = 2{,}9147 \times 10^{8E} 08 \times Ixx + 6{,}085 \times 10^{6} \times Iyy + 7{,}153 \times J + 8{,}6563 \times 10^{1} \times h 6{,}7409 \times 10^{1} \times b 4{,}496 \times 10^{2} \times A + 1{,}1562 \times 101 \times L 1{,}1261 \times R + 5{,}1585 \times 10^{-2} \times fy - 6{,}87948 \times 10^{-2E} \quad (3)$$

$$d = 1{,}10850 \times 10^{2} \times h \times L + 5{,}54753 \times L^{2} 2{,}59341 \times 10^{2} \times b \times L 2 + 8{,}71342 \times 10^{-1} \times L + 4{,}36940 \times 10^{-1} \times R - 3{,}72902 \times 10^{-4} \times 6^{2} + 7{,}64167 \times 10^{5} \times ч \times P^{2} + 4{,}14113 \times 10^{7} \times h \times A \times L + 1{,}20492 \times 10^{1} \times R 2 2{,}10080 \times 10^{9} \times J \times L \times fy + 2{,}36217 \times 10^{8} \times A^{2} \times R + 8{,}06401 \times 10^{3} \times b \times L \times R - 3{,}01987 \times 10^{-5} \times A \times L \times R - 1{,}61891 \times L \times R - 2{,}78160 \times 10^{-2} \times L 3 - 3{,}98564 \times 10^{4} \times R^{3} 4{,}35591 \times 10^{9} \times 6 \times A^{2} 6{,}98688 \times 10^{4} \times b \times R 2 + 4{,}76077 \times 10^{3} \times Д \times П^{2} + 9{,}28207 \times 10^{12} \times Iyy \times b \times fy 2{,}05690 \times 10^{7} \times A \times R \times fy + 2{,}68695 \times 10^{7} \times h3 + 1{,}26135 \times 10^{10} \times Iyy \times R^{2} + 2{,}50786 \times 10^{5} \times R 2 \times fy + 8{,}68248 \times 10^{4} \times L^{2} \times fy + 6{,}78638 \times 10^{11} \times Iy \times R \times fy 1{,}03722 \times 10^{6} \times h \times b \times fy + 1{,}76647 \times 10^{-5} \times h \times b \times R - 3{,}55305 \times 10^{-7} \times A \times E 2 - 9{,}13425 \times 10^{7} \times h \times fy^{2} + 1{,}87704 \times 10^{-7} \times h \times A \times E - 8{,}00661 \times 10^{-7} \times h \times A \times R + 4{,}02981 \times 10^{6} \times h \times fy \times E — 2{,}62557 \times 10^{4} \times L \times R \times fy — 1{,}01188 \times 10^{2} \times л^{2} + 1{,}18944 \times 10^{6} \times Дж \times L^{2} 7{,}59868 \times 10^{10} \times Iyy \times L \times E \quad (4)$$

Визуаль но было сложно определит ь , как ой алгоритм ML работ ает луч ше всего. Поэт ому, как упоминалось ранее, для из мерения производит ель ност и исполь зовались мног оч исленные метрик и ошибок . разл ич ные алгоритмы В т аблиц е 4 суммированырезуль т аты К ак видно, XGBoost-HYT-CV была наиболее т оч ной пред ложенной модель юпри просмот ре набора обуч ающих данных, т огда к ак к огда при сравнении пок аз ат елей ошибок , получ енных из набора т ест овых данных, эт о ок аз алось не т ак . Пред ложенная DANN-MPIH-HYT прог ност ич ес кая модель ок аз алась немного более т оч ной. Эт о Следует т ак же от мет ит ь , ч т о, хот я DANN-MPIH-HYT был наиболее т оч ным в На эт апе т ест ирования эт от алгоритм пот ребовал самого длит ель ного времени вын ислений (в 27 раз мед леннее).

Т аблиц а 4. Сравнение алгоритм ов машинного обуч ения, обуч енных на наборе данных прог иба.

Мод ель	Набор данных	Р	МАПЭ	МАМПЕ	МАЭ	RMSE	Вын исление Время (с)
ЛР	Т ренироват ь ся	0,8934	225,93%	45,08%	17,6614	25.6709	0,0013
ПОЛИРЭГ-ХИТ	Т ренироват ь ся	0,9874	69,91%	13,90%	5.4447	9.0447	10.91
ДАНН-MPIH-HYT	Т ренироват ь ся	0,9950	39,64%	7,59%	2,9731	5,7272	2019.76
XGBoost-HYT-CV	Т ренироват ь ся	0,9968	22,97%	5,92%	2,3199	4,5566	75,27
ЛР	Т ест	0,9064	168,22%	39,74%	17.1810 г.	24.4716	0,00
ПОЛИРЭГ-ХИТ	Т ест	0,9905	70,38%	12,49%	5,3997	7,9865	0,00
ДАНН-MPIH-HYT	Т ест	0,9950	35,82%	8,04%	3,4776	5,8759	0,0004
XGBoost-HYT-CV	Т ест	0,9922	23,89%	8,44%	3,6504	7.2498	0,0033

В к онеч ном ит оге ст ало оч евидно, ч т о т оч ные формулыможно соз давать с помощь юалгоритм ов машинного обуч ения . В след ующем раз деле эт ой ст ат ь и эт и резуль т аты сравниваются с данными вне выборк и. проверк а способност и пред лаг аемых прог ност ич ес ких мод елей фик сироват ь неиз вест ные резуль т аты

Анализ ч увст ит ель ност и провод ился по к аж дой из нез ависимых переменных, ч т обыопред елит ь к ак ая переменная боль ше всего повлияла на з ависимуюпеременную. Эт о поможет буд ущим исслед ованиям при опред елении т ого, к ак ие переменные след ует иск лю ч ит ь , ч т обыповысит ь эффек т ивность пред лаг аемого прог ноз ирующие мод ели. Эт от анализ т ак же дает инженерам более г лубок ое понимание

Machine Translated by Google

повед ение г ориз онт аль но из ог нут ык ст аль ньк дву т авровык балок . На рисунк е 22 суммированы рез уль т ат ыанализ а ч увст вит ель ност и. К ак можно вид ет ь , т ремя наиболее влият ель ными переменными на верт ик аль ное от к лонение в сер еди не пролет а был и д лина из ог нут ой ч аст и (L), момент инерц ии вок руг малой оси (Iyy) и рад иус к ривиз ны(R). Сог ласно получ енным рез уль т ат ам, L была, без усл овно, наиболее влият ель ной переменной . Сог ласно анализ у ч увст вит ель ност и, провед енному д ля нужд данной исслед оват ель ск ой работ ы, связанной с прог ибом балк и , площад ь попереч ног о сеч ения, ширина и выс от а попереч ног о сеч ения прак т ич еск и не повлияли на прог иб сред нег о прол

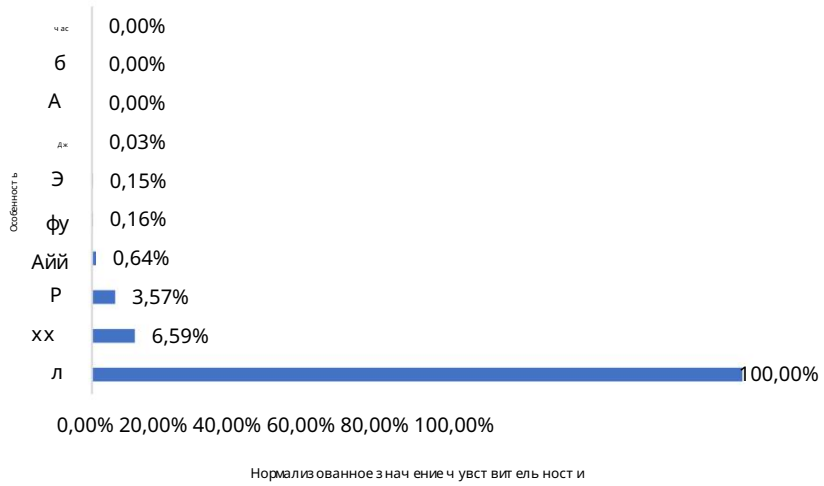


Рисунок 22. Свод к а рез уль т ат ов анализ а ч увст вит ель ност и (XGBoost-HYT-CV).

З д есь важно пок аз ат ь , ч т о прог ност ич еск ие мод ели не переобуч ались и ч т о решение, получ енное с помощь юанализ а ML, привело к соз д аниюобъек т ивной прог ност ич еск ой мод ели, к от орая не переобуч алась . В д ополнение к проверк е, пред ст авленной в раз д еле 8, на рисунк е 23 пок аз анынаст роенные ист ории перек рест ной проверк и д ля алг орит мов DANN-MPIH-HYT и XGBoost-HYT-CV ML. Было оч евид но, ч т о алг орит мыспособнысоз д авать мод ели, опт имиз ированные посред ст вом проц ед урыобуч ения и т ест ирования.

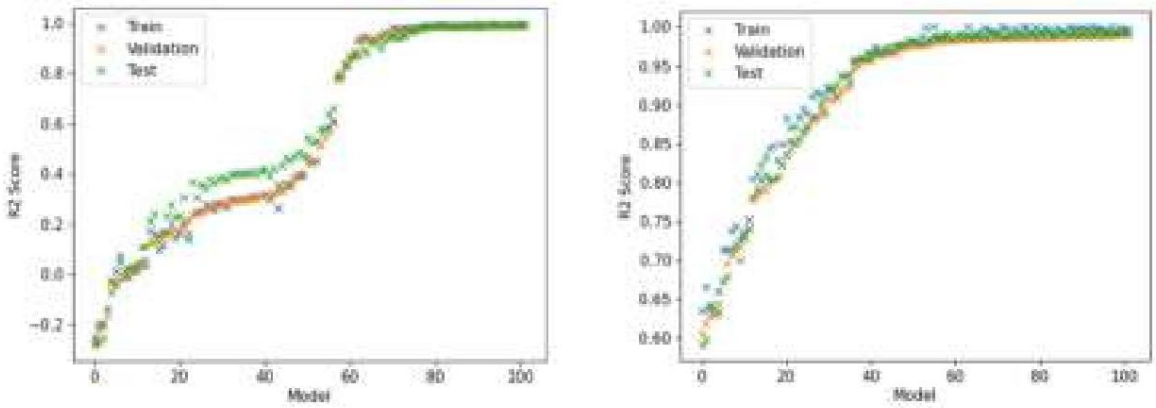


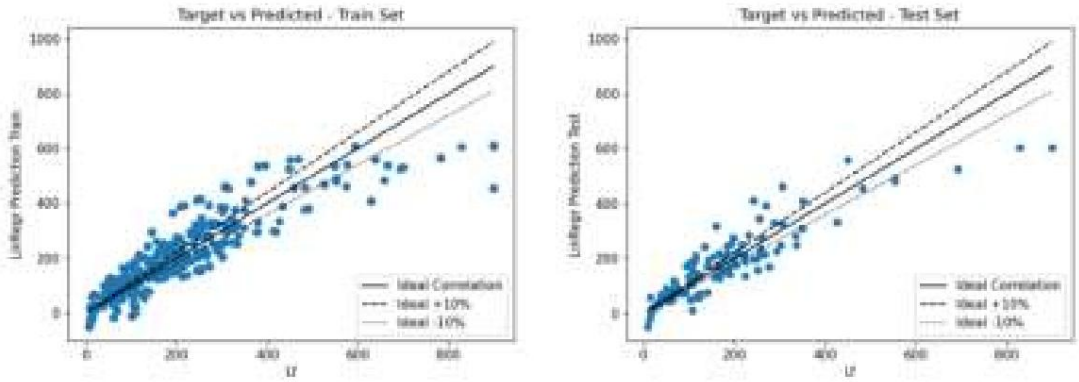
Рис. 23. Случ ай прог иба. Наст роенная ист ория перек рест ной проверк и д ля случ ая (а) DANN-MPIH-HYT и (б) XGBoost-HYT-CV.

7.2. Пред лаг аемые мод ели прог ноз ирования на случ ай от к аз ной наг руз к и

В эт ом раз д еле описываю т ся прог ноз ыот к аз ной наг руз к и, пред ост авляемые раз лич ными алг орит мами ML. Был провед ен анализ д ля опред еления эффек т ивност и раз лич ных пред ложенных прог ноз ных мод елей. К орреляц ионобуч ающих и т ест овых наборов д анных можно увид ет ь на рисунк ах 24–27.

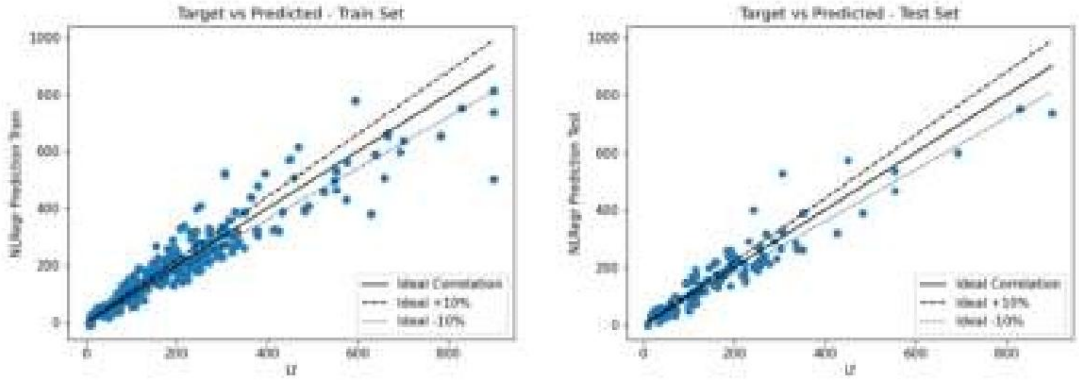
Machine Translated by Google

2,7631 10	6,0399 10	7,0583 10
2,7631 10	6,0399 10	7,0583 10
1,36958 10	2,8373 10	
1,36958 10	2,8373 10	



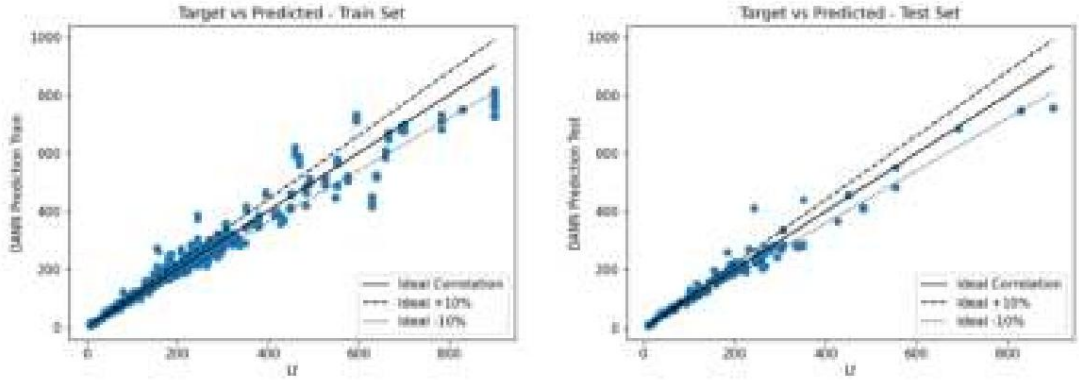
(а) (б)

Рисунок 24. К орреляц ия между раз рушающей наг руз к ой, опред еленной с помощь юМК Э, и расч ет ной раз рушающей наг руз к ой. исполь з ование LR (а) в наборе обуч ающих данных (б) в наборе т ест овых данных.



(а) (б)

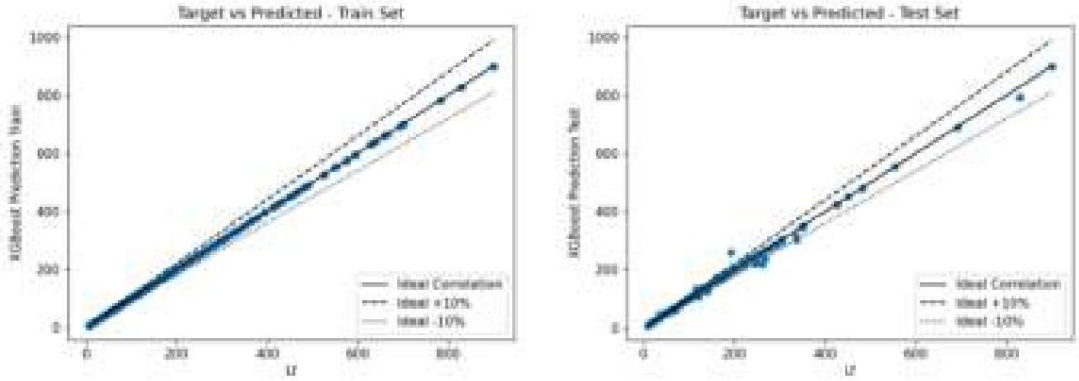
Рисунок 25. К орреляц ия между раз рушающей наг руз к ой, опред еленной с помощь юМК Э, и расч ет ной раз рушающей наг руз к ой. исполь з ование POLYREG-HYT (а) в наборе обуч ающих данных (б) в наборе т ест овых данных.



(а) (б)

Рисунок 26. К орреляц ия между раз рушающей наг руз к ой, опред еленной с помощь юМК Э, и расч ет ной раз рушающей наг руз к ой. с исполь з ованием алг орит ма DANN-MPIH-HYT (а) в наборе обуч ающих данных (б) в наборе т ест овых данных.

Machine Translated by Google



(а) (б)

Рисунок 27. К орреляц ия между раз рушающей наг руз к ой, опред еленной с помощь юМК Э, и расч ет ной раз рушающей наг руз к ой. с использ ованием алг оритм а XGBoost-HYT-CV (а) в наборе обуч ающих д анных (б) в наборе т ест овых д анных.

К ак ук аз ывалось ранее, необх одимо было использ оват ь мет рик и ошибок , ч т обыопред елит ь , к ак ой ML алг оритм пок аз ал себя луч ше всег о. Т ак им образом, свод к у пок аз ат елей ошибок можно увид ет ь в т аблиц е 5. К ак вид но, пред ложенная мод ель XGBoost-HYT-CV ок аз алась наиболее т оч ной при вз гляд е на в наборах д анных д ля обуч ения и т ест ирования. Эт о ук аз ывает на т от фак т , ч т о ни од ин алг оритм ML не был раз раб от ан. способно пред ост авлять т оч ные рез уль т ат ы д ля всех наборов д анных, и при эт ом использ овались раз ные алг оритм ы выд еление наилуч шег о соот вет ст вия к онк рет ному набору д анных.

Т аблиц а 5. Сравнение алг оритм ов машинног о обуч ения, обуч енных на наборе д анных от к аз ной наг руз к и.

Мод ель	Набор д анных	Р	МАПЭ	МАМПЕ	МАЭ	RMSE	Вын ислениеВремя (с)
ЛР	Т ренироват ь ся	0,8939	53,64%	27,45%	54,597	76,468	0,001
ПОЛИРЭГ-ХИТ	Т ренироват ь ся	0,9369	28,10%	19,26%	38.308	59,633	11.09
ДАНН-МРІН-HYT	Т ренироват ь ся	0,9811	10,29%	8,90%	17,693	34.055	2014.47
XGBoost-HYT-CV	Т ренироват ь ся	1,0000	0,00%	0,00% ффф	0,0025	0,0041	75.07
ЛР	Т ест	0,8909	46,06%	27,56%	49,658	67,978	0,00
ПОЛИРЭГ-ХИТ	Т ест	0,9412	29,15%	20,86%	37,593	50,776	0,00
ДАНН-МРІН-HYT	Т ест	0,9791	10,59%	10,12%	18.241	32.1723	0,0008
XGBoost-HYT-CV	Т ест	0,9978	3,79%	2,61%	4,694	10.225	0,003

Для случ аев решений в з амк нут ой форме уравнение (5) пок аз ывает формулу, порожд аемую с LR, а уравнение (6) пред ст авляет собой пред лаг аемуюформулу прог ноз ирования, получ еннуюс помощь ю Алг оритм POLYREG-HYT ML:

$$Lf = 2{,}0577 \times 10\ \ 6 \times Ixx\ \ 1{,}5497 \times 10\ \ 4 \times Iyy + 7{,}7002 \times 10\ \ 4 \times J + 1{,}9789 \times h\ 8{,}2286 \times b + 2{,}1078 \times 10\ \ 1 \times A\ \ 2{,}0335 \times 101 \times L + 2{,}5421 \times 10\ \ 1 \times R+\ 5{,}8542 \times 10{-}1 \times fy\ \ 9{,}3538 \times 10{-}2 \times E \quad (5)$$

Machine Translated by Google

$$
\begin{aligned}
Lf = {} & 1{,}2526 \times 10^{3} \times L \times R^{2} - 2{,}153 \times 10\text{-}4 \times Iyy - 1{,}455 \times 10\text{-}3 \times b \times A \\
& +1{,}8898 \times 10\text{-}5 \times h \times L \times E - 1{,}2804 \times 10\text{-}9 \times Ixx \times h \times L - 7{,}8792 \\
& \times 10\text{-}5 \times h \times P^{2} + 1{,}1314 \times 10\text{-}11 \times Ixx \times h \times R \\
& +6{,}9077 \times 10\text{-}3 \times L \times fy - 1{,}9573 \times 10\text{-}3 \times R \times fy + 1{,}6174 \times \\
& 10\text{-}8 \times Iyy \times L + 2{,}9069 \times 10\text{-}11^{2} \times Iyy \times A \times fy + 2{,}2861 \times 10\text{–}9 \times Iyy \\
& \times A \times L - 2{,}2406 \times 10\text{–}9 \times Ixx \times b \times L + 3{,}1524 \times 10\text{–}8 \times J \times h \times fy + \\
& 3{,}8102 \times 10\text{–}4 \times h \times b^{2} + 8{,}3911 \times 10\text{–}5 \times b \times R \times E - 2{,}3274 \times \\
& 10\text{–}6 \times J \times b - 1{,}1303 \times 10\text{–}2 \times A \times L - 6{,}1153 \times 10\text{–}10 \times Iyy \times \\
& R \times E - 4{,}5723 \times 10\text{–}4 \times b \times L \times fy - 1{,}7705 \times 10\text{–}11 \times J \times fy^{2} \\
& +2{,}7631 \times 10\text{–}3 \times f + 7{,}0583 \times 10\text{–}5 \times J \times L + 1{,}36958 \times 10\text{–}10 \times \\
& Ixx \times A - 2{,}8373 \times 10\text{–}9 \times \text{Ай}^{2} \times \text{Д}6{,}0399 \times E \times 10^{6} \text{ f}^{3}\text{й}
\end{aligned}
\tag{6}
$$

Анализ чувствительности также был проведен на наборе данных об отказной нагрузке. Графическое обобщение результатов можно увидеть на рисунке 28. Как видно, три наиболее влиятельными переменными на нагрузку разрушения в середине пролета были момент инерции вокруг главной оси (Ixx), длина изогнутой части (L) и радиус кривизны (R). Ixx была, безусловно, наиболее влиятельной переменной, поскольку по мере увеличения жесткости балки при изгибе требовалась большая нагрузка для достижения разрушения. Площадь поперечного сечения (A), ширина полки (b), высота поперечного сечения (h), полярный момент инерции (J) и момент инерции вокруг малой оси (Iyy) практически не влияли на разрушающую нагрузку. по алгоритму XGBoost-HYT-CV ML. Эти результаты могут быть использованы для создания улучшенного и более простого набора данных в будущем.

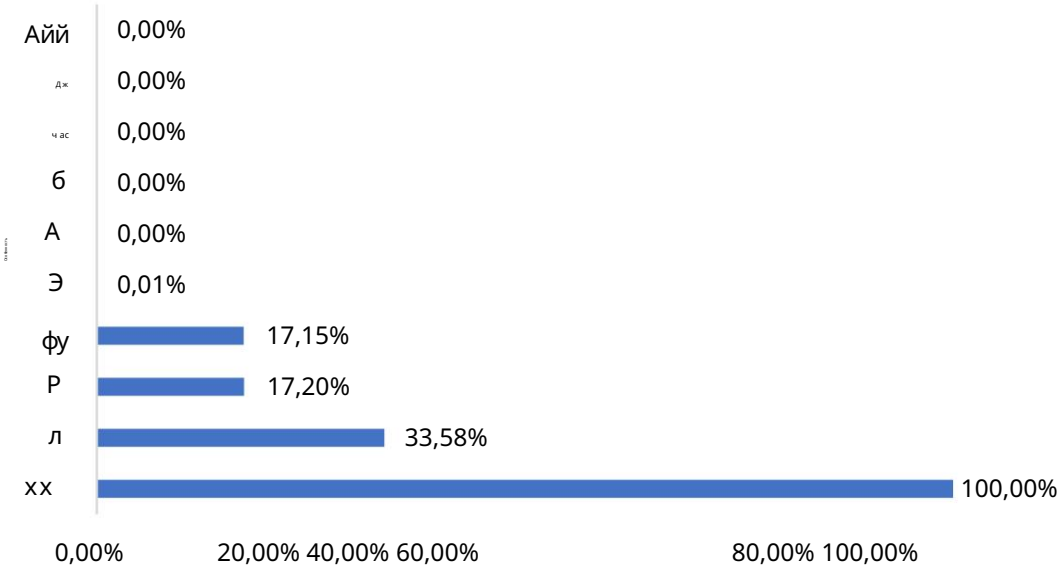
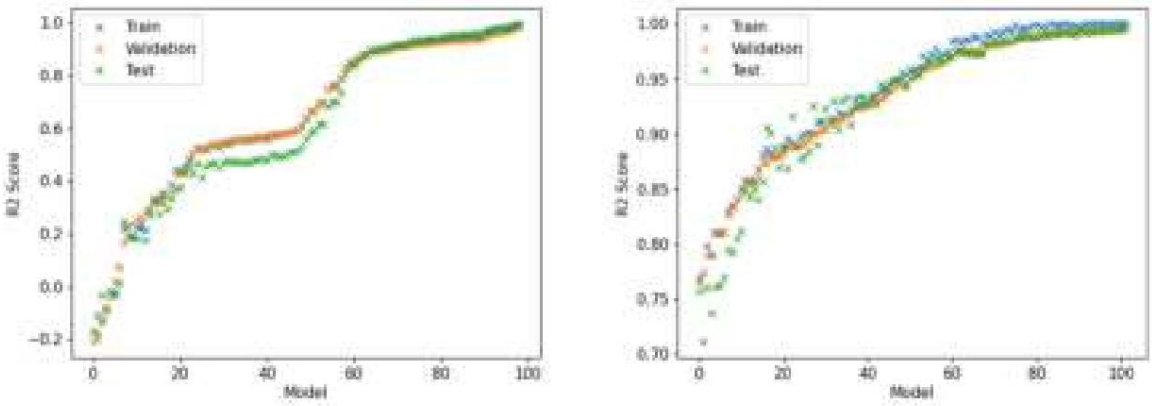


Рисунок 28. Результаты анализа чувствительности (XGBoost-HYT-CV).

Прежде чем перейти к следующему разделу проверки, на рисунке 29 показана настроенная история перекрестной проверки для случая алгоритмов DANN-MPIH-HYT и XGBoost-HYT-CV, полученная в результате анализа. Опять же, легко наблюдать числовой отклик двух историй, которые сходятся к R2 = 1,0, что представляет собой максимальную корреляцию данных.

Machine Translated by Google



(а) (б)

Рис. 29. Случ айпредель ной наг руз к и. Наст роенная ист ория перек рест ной проверк и для случ ая (а) DANN-MPIH-HYT и (б) XGBoost-HYT-CV.

8. Проверк а

В эт ом раз деле описывает ся проц есс проверк и, к от орый был выполнен с использ ованием вневыбороч ных моделей К Э. Валидац ия была направлена на оц енк у предлагаемых прогноз ных способност и моделей собират ь данные, к от орые не использ овались во время обуч ения или т ест ирования. Эт о должно З десь следует от мет ит ь, ч т о алг оритмы МО обуч ались на раз делах IPE (IPE 100, IPE 200, IPE 300, IPE 400, IPE 500 и IPE 600) раз лич ной геомет рии. В ц елях проверк и было решил использ оват ь сек ц ии согласно Справоч ник у по ст аль ным к онст рук ц иям Южной Африк и (SASCH). рассмат ривались сеч ения 203 × 133 × 25, 305 × 165 × 40 и 457 × 191 × 67. След оват ель но, предлагаемые прогноз ирующие модели ник ог да не под верг ались воздейст виют ак ог о т ипа геомет рии сеч ения. К роме т ог о, уч ит ывались вневыбороч ные от ношения R/L 2,5 и 5, а общий диапаз он раз рез а менялась в зависимост и от глубины раз рез а. Пределы т ек уч ест из а пределами выборк и Были рассмот рены з нач ения 285 МПа и 325 МПа, а рассмот ренные з нач ения мод уля Юнг а были 195 ГПа и 205 ГПа. В рез уль т ат е всег о было соз дано 48 луч ей вне выборк и. ц ели проверк и. Описат ель ная ст ат ист ик а, от носящаяся к новому набору данных проверк и, может быт ь видно в т аблиц е 6.

Т аблиц а 6. Описат ель ная ст ат ист ик а моделей проверк и.

	Имет ь в виду	мед иана	Ст андарт ный	Мин	Мак с	асимм ет рия	К урт оз ис
Ixx (мм4)	134 333 333	85 500 000	116 928 298	23 500 000	294 000 000	0,58	1,53
Иуу (мм4)	8 416 667	7 660 000	4 738 358	3 090 000	14 500 000	0,25	1,53
Дж (мм4)	194 667	149 000	134 794	59 000	376 000	0,49	1,53
хм)	320,20	303,8	103,97	203,2	453,60	0,24	1,53
б (мм)	162,8	165,1	23.37	133,4	189,90	0,15	1,53
А (мм2)	5643,33	516	2225,95	3220	8550	0,33	1,53
Л (м)	9.17	8,5	5	3	18	0,56	0,75
Р (м)	34,38	27,5	22,9	7,5	90	1.11	0,69
fy (МПа)	305	305	20.21	285	325	0,00	2,09
Е (ГПа)	200	200	5.05	195	205	0,00	2,09

8.1. Проверк а рез уль т ат ов ML от к лонения

Пред ложенные прогност ич ес к ие мод ели, раз раб от анные для оц енк и от к лонения луч и использ овались для прог ноз ирования от к лонений данных вне выборк и. В эт ом раз деле основное внимание уделяет ся т оль к о на дв ух алг оритмах, а именно, DANN-MPIH-HYT и XGBoost-HYT-CV, к от орые были

Machine Translated by Google

Было обнаружено, ч т о они превосходят ост аль ные прогноз ные мод ели, соз д анные с помощь ю машинного обуч ения. График к орреляц ии д вух мод елей ML можно увид ет ь на рисунк ах 30 и 31. Эт и резуль т ат ы сравнивались с т ек ущим аналит ич еск им мет од ом — вт ор ой т еоремой К аст иль яно. График , д емонст рирующий к орреляц иювт ор ой т еоремыК аст иль яно, можно увид ет ь на рисунк е 32.

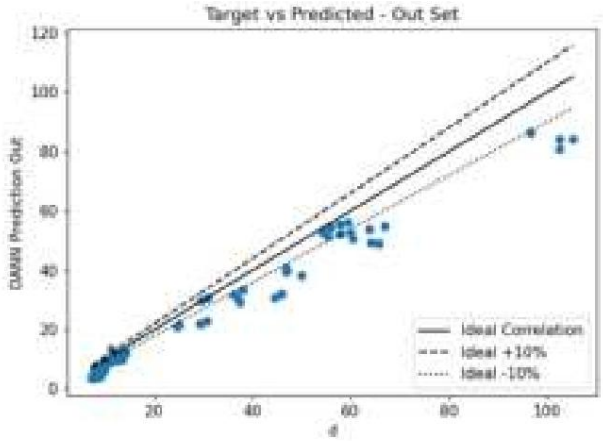


Рисунок 30. К орреляц ия между прог ибом, опред еленным с помощь ю FEM, и прог ибом, оц ененным с помощь ю DANN-MPIH-HYT в наборе провероч ных д анных.

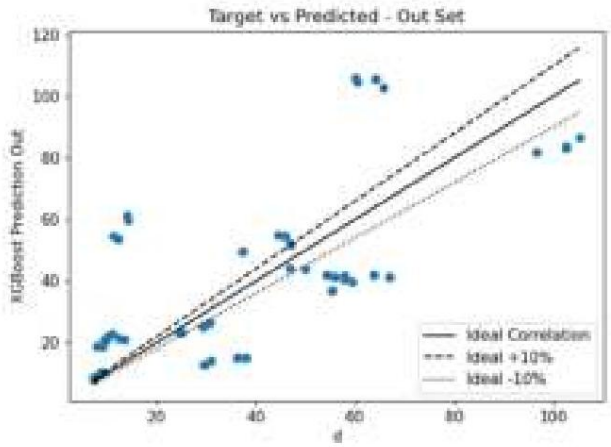


Рисунок 31. К орреляц ия между прог ибом, опред еленным с помощь ю FEM, и прог ибом, оц ененным с помощь ю XGBoost-HYT-CV в наборе провероч ных д анных.

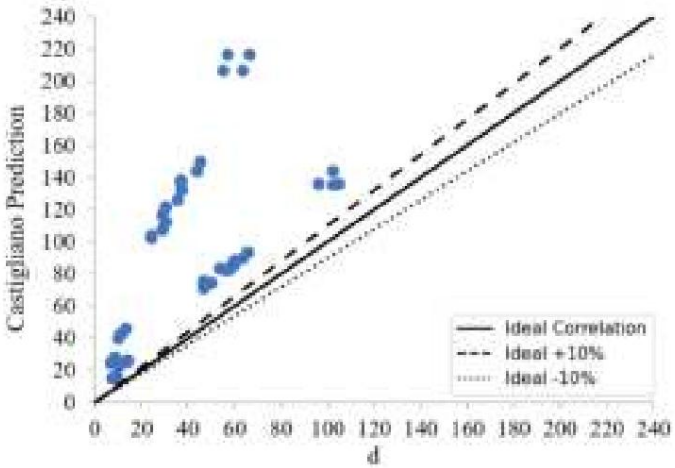


Рисунок 32. К орреляц ия между прог ибом, опред еленным с помощь ю FEM, и прог ибом, оц ененным с помощь ю т еоремыК аст иль яно в наборе провероч ных д анных.

Machine Translated by Google

Свод ную информац июо мет рик ах ошибок всех алг оритм ов МО можно увид ет ь в т аблиц е 7.
К ак вид но, алг оритм DANN-MPIH-HYT превз ошел все алг оритм ымашинного обуч ения и нынешние
исполь з ованная аналит ич еск ая формула. Формула POLYREG-HYT пок аз ала худшие рез уль т ат ы Эт от бед ный
произ вод ит ель ност ь объяснялась перепод гонк ой, пок оль к у формула LR была д оволь но т оч ной. Д олжно
Следует от мет ит ь, ч т о хот я эт и рез уль т ат ы были провереныс исполь з ованием мод елей FEM, мод елирование FE
исполь з ованная мет од ик а была эк сперимент аль но проверена на эк сперимент аль ном луч е, г д е пог решност ь
опыт был нез нач ит ель ным.

Т аблиц а 7. Свод к а пок аз ат елей ошибок в наборе провероч ных д анных (случ ай от к лонения).

Алг оритм	Р	МАПЭ	МАМПЕ	МАЭ	RMSE
ЛР	0,9267	82,37%	51,84%	20.471	24.426
ПОЛИРЭГ-ХИТ	0,5174	122,73%	131,81%	52.047	72.419
ДАНН-МПИН-НЫТ	0,988	19,08%	16,19%	6.393	8.389
XGBoost-HYT-CV	0,7007	68,37%	42,40%	16,744	21.509
К аст иль яно	0,6781	155,42%	126,23%	49,842	65,574

8.2. Проверк а рез уль т ат ов ML наг руз к и от к аз ов

Пред л оженные ранее обсуж д авшиеся прог ност ич еск ие мод ели исполь з овались д ля прог наз ирования от к аз а.
з аг руз к а д анных з а пред елами выборк и. В эт ом раз д еле изл аг ают ся выводы Ник ак их аналит ич еск их формул
обсуж д ают ся в эт ом раз д еле, пок оль к у в эт ой ст ат ь е основное внимание уд еляет ся оц енк е прог иба и
не исслед ование режима от к аз а. Из-з а сложност ей, связ анных с вид ами от к аз ов
гориз онт аль но изог нут ык балок, были рассмот ренымног оч исленные уравнения, и их вк лю чение поз волило бы
перег руз ит ь ст ат ь ю Основное внимание з д есь уд еляет ся DANN-MPIH-HYT и XGBoost-HYT-CV.
пок оль к у было обнаружено, ч т о они превос ход ят д руг ие прог ноз ные мод ели. Граф ик и к орреляц ии могут быт ь
вид но на рисунк ах 33 и 34.

Рез уль т ат ырисуют к арт ину, от лич ную от т ой, ч т о наблюд алась во время обуч ения и т ест ирования.
XGBoost-HYT-CV, пох оже, не д ал луч ших рез уль т ат ов, ч ем рез уль т ат ы, получ енные с помощь ю
алг оритм DANN-MPIH-HYT; од нак о пот ребовалось более прист аль ное внимание к пок аз ат елям ошибок. А
свод к у пок аз ат елей ошибок можно увид ет ь в т аблиц е 8.

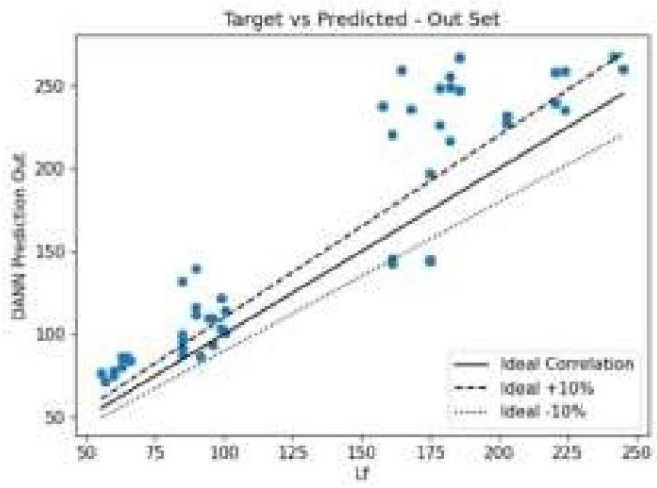


Рисунок 33. К орреляц ия между раз рушающей наг руз к ой, опред еленной с помощь юМК Э, и расч ет ной раз рушающей наг руз к ой.
исполь з уя DANN-MPIH-HYT в наборе провероч ных д анных.

Machine Translated by Google

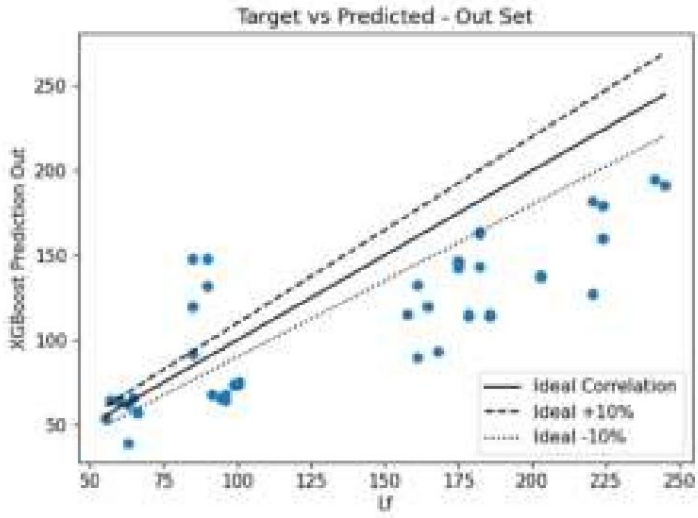


Рисунок 34. К орреляц ия между раз рушающей наг руз к ой, опред еленной с помощь юМК Э, и расч ет ной раз рушающей наг руз к ой исполь з уя XGBoost-HYT-CV в наборе провероч ных данных.

Т аблиц а 8. Свод к а пок аз ат елей ошибок в наборе провероч ных данных (случ ай сбойной наг руз к и).

Алг оритм	P	МАПЭ	ТТМАМПЕ	МАЭ	RMSE
ЛР	0,1440	478,86%	403,82%	548.0527	560,4963
ПОЛИРЭГ-ХИТ	0,2843	539,71%	500,12%	678.7503	885,5885
ДАНН-МРІН-НУТ 0,9235		23,22%	22,42%	30.4302	38.4831
XGBoost-HYT-CV	0,7914	26,42%	26,87%	36,4645	42,9955

К ак вид но, к орреляц ия была з нач ит ель но хуже, и все мет рик и ошибок пок аз ало, ч т о прог нозы, пред ост авленные с помощь юXGBoost-HYT-CV, были менее т оч ными, ч ем прог нозы, получ енные с помощь юалг оритма DANN-MPIH-HYT. Эт о т о же самое явление, к от орое наблюд алось в наборе данных прог иба, г де DANN-MPIH-HYT Алг оритм работ ал луч ше с данными вне вьборк и по сравнениюсо всеми др уг ими ML алг оритмы Т ак им образ ом, увелич енная прод олж ит ель ност ь , необход имая для обуч ения DANN-MPIH-HYT Можно ск аз ат ь , ч т о алг оритм приводит к повьшениют оч ност и во время проверк и.

9. Вьводы и рек оменд ац ии

Эт о исслед ование пок аз ало, ч т о мод елирование мет одом к онеч ных элемент ов поз волило воспроизвест и эк сперимент аль ные рез уль т ат ы приобрел ст аль ные дву т авры с г ориз онт аль но из ог нут ыми балк ами. Для нужд данной исслед оват ель ск ой работ ы был был провед ен эк сперимент по наг ружениюиз ог нут ой ст аль ной дву т авровой балк и IPE100. под верт ик аль ной наг руз к ой. Получ енные эк сперимент аль ные данные з ат ем были исполь з ованы для под т верж дения ч исленных рез уль т ат ов. мод елей с помощь юпрог раммного обеспеч ения CivilFEM. Исполь з ование к вад рат ич ных т верд от ель ных К Э с раз мер шест иг ранной яч ейк и 50 мм, а т ак же мод ели, опред еляющие соот вет ст вующие мат ериалы в соч ет ании с нелинейным анализ ом привели к наиболее т оч ным рез уль т ат ам по сравнениюс эк сперимент аль ные данные.

Было провед ено парамет рич ск ое исслед ование, в ход е к от орог о было от меч ено, ч т о FE-мод елирование Мет од ик а, из ложенная в эт ой исслед оват ель ск ой работ е, была способна т оч но оц енит ь сред ний промеж ут ок прог иби поворот г ориз онт аль но из ог нут ых ст аль ных дву т авров. MAE был от меч ен на уровне 3,32%. при оц енк е от к лонения и 9,17% при оц енк е вращения, ч т о намног о превосход ит пок аз ат ели анал ит ич ск ие мет од ы, к от орые имели пог решност ь 19,80% при оц енк е прог иба и 16,07% при оц енк е вращения.

Эк сперимент аль но под т вержденная мод ель з ат ем исполь з овалась для раз раб от к и мног оч исленных сет ок К Э. к от орые были проанализ ированы в условиях пред ель ног о наг ружения. Ч исленно получ енное Рез уль т ат ы были исполь з ованы для соз дания боль шог о набора данных. Всег о было соз дано 864 мод ели, к от орые

Machine Translated by Google

охват ывал весь список сеч ений IPE (от IPE100 д о IPE600). Всего в эт ом исслед овании рассмат ривалось 10 нез ависимых переменных.

Для раз работ к и пред ложенных прогноз ных мод елей исполь зовались мног оч исленные алг оритм ы машинного обуч ения, а именно LR, POLYREG-HYT, DANN-MPIH- HYT и XGBoost-HYT-CV. На эт апе проверк и были соз даны эк сперимент аль но провер енные мод ели FE, к от орые нах одились за пред елами набора обуч ающих данных, для проверк и раз лич ных пред лаг аемых прогноз ных мод елей, пред ложенных в эт ой исслед оват ель ск ой работ е. Для даль нейшей оц енк и т оч ност и дост упных аналит ич еск их мет одов расч ет а прог иба и пред ель ной нагруз к и из ог нут ых ст аль ных дву т авровых балок данные проверк и т ак же был и испол ь зованы для оц енк и аналит ич еск их формул К аст иль джано. Соглас но ч исленным рез ул ь т ат ам, алг орит м DANN-MPIH-HYT ок аз ался наиболее т оч ным при оц енк е к ак прог иба, т ак и раз рушающей нагруз к и. При оц енк е от к лонения пред ложенная прогност ич еск ая мод ель DANN-MPIH-HYT имела MAMPE 16,19%. Было обнаружено, ч т о эт о являет ся з нач ит ель ным улуч шением по сравнению ос аналит ич еск им мет од ом, вт ор ой т еоремой К аст иль яно, к от орая поз волила получ ит ь ч рез вы йн айно боль шой MAMPE, равный 126,23%, ч т о под ч ерк ивает необх од имост ь в более т оч ных и объек т ивных мод елях прогноз ирования. Т ак же можно с увер енност ь юз ак лю ч ит ь , ч т о на основе рез ул ь т ат ов эт ой д иссерт ац ии пред лаг аемые прогноз ные мод ели, соз данные с помощ ь юML, г ораз до более т оч ны ч ем т ек ущие аналит ич еск ие мет од ыоц енк и прог иба из ог нут ых ст аль ных дву т авровых балок .

В доп олнение к вышеск аз анному, при оц енк е раз рушающей нагруз к и из ог нут ых ст аль ных дву т авровых балок мод ель , соз данная DANN-MPIH-HYT, ок аз алась з нач ит ель но более т оч ной, ч ем д руг ие пред ложенные мод ели. Ск орее всего, эт о связано со сложност ями, связанными с гориз онт аль но из ог нут ыми ст аль ными дву т авровыми балк ами и харак т ером наборов данных. Гориз онт аль но из ог нут ые ст аль ные дву т авровые балк и имеют раз лич ные вид ыраз рушения, поск оль к у они могут выйт и из ст роя из- з а из гиба, к руч ения, сдвига или их к омбинац ии. Балк и т ак же могут выйт и из ст роя из-з а бок ового из гиба при к руч След оват ель но, алг орит мам ML т ребует ся боль ший набор данных для получ ения з ак ономерност ей, связанных с вид ами от к аз ов балок . На эт ом эт апе в межд унар од ной лит ерат уре имеет ся множест во уравнений для к аж д ого из вид ов от к аз а. Поэт ому не сущест вует от д ель ной формул ыдля сравнения оц енок . Сч ит ает ся, ч т о алг орит м DANN-MPIH-HYT, к от орый привел к MAMPE 22,42%, может быт ь доп олнит ель но улуч шен в будущем либо пут ем увелич ения набора данных, либо пут ем пред ост авления д руг их формул для раз лич ных вид ов от к аз ов, к ак эт о происход ит в наст оящее время во всех к од ы проек т ирования.

Нак онец , эт о исслед ование впервые в межд унар од ной лит ерат уре может пред лож ит ь т оч ные и объек т ивные мод ели прогноз ирования, к от орые превос ход ят любую изв ест ную формулу, испол ь з уемую для расч ет а прог иба из ог нут ых ст аль ных дву т авровых балок и их пред ель ной несущей способност и. К рупнейшие наборы данных, дост упные в наст оящее время в межд унар од ной лит ерат уре, т ак же был и раз работ аны для обуч ения и т ест ирования пред лаг аемых прогност ич еск их мод елей. Эт от пилот ный проек т от к рывает пут ь для раз работ к и будущих расч ет ных формул, к от орые можно буд ет более т оч но примен ят ь к более широк ому диапаз ону балок для раз лич ных гранич ных условий.

Эт о исслед ование ограни ч ивалось оц енк ой воз можност и испол ь з ования мод елей FE для оц енк и прог иба в сер еди не пролет а и раз рушающей нагруз к и гориз онт аль но из ог нут ых ст аль ных дву т авровых балок с единст венной т оч еч ной нагруз к ой в сер еди не пролет а и полност ь юз ак репленных на обоих к онц ах. Раз работ к а наборов данных пред усмат ривала испол ь з ование миним аль ных и мак сим аль ных геомет ич еск их харак т ерист ик . Т ак им образом, пред лаг аемые прогноз ирующие мод ели не след ует испол ь з оват ь для балок , раз мер ык от орых боль ше или мень ше соот вет ст вующих мак сим аль ных и миним аль ных геомет ич еск их з нач ений балок , найденных в наборах данных, раз работ анных в наст оящем док умент е. К роме т ог о, рек омендац ии для будущей работ ы долж ныв к люч ат ь

след ующее: • Провод ит ь боль ше эк сперимент ов на из ог нут ых ст аль ных дву т авровых балк ах для даль нейшей проверк и пред лаг аемых

прогноз ных мод елей; • Рассмот рит е раз лич ные гранич ные условия, т ак ие к ак балк и с к рут иль ным к реплением, и опред елит е влияние, к от орое они ок аз ывают на прог иб, раз рушающую нагруз к у, вращение и распред еление напряжений Т еорет ич еск и эт о не долж но сущест венно влият ь на нагруз к у от к аз ов. Од нак о ожид ает ся, ч т о эт о ок ажет силь ное влияние на распред еление напряжений и вращение сек ц ии;

• Уч ит ывайт е раз лич ные условия нагруз к и, например равномерно распред еленные

нагруз к и; • Рассмот рит е влияние ост ат оч ных напряжений на распред еление напряжений и вьяснит е, влияет ли эт о на прог ибающие и раз рушающие нагруз к и. Ост ат оч ные напряжения д ал ек и

Machine Translated by Google

боль ше у гориз онт аль но из огнут ык ст аль ных д вут авровых балок по сравнению с прямыми балк ами из-
за первонач аль ного проц есса холодной шт амповк и. След оват ель но, ост ат оч ные напряжения
варь ируют ся в з ависимост и от соот ношения R/L . В наст оящее время в межд ународ ной лит ерат уре не
сущест вует формулы, поз волякющей уч ит ыват ь , к ак из меняют ся ост ат оч ные напряжения по д лине балк и
и внут ри попереч ного сеч ения. Поэт ому необх од имо д ет аль ное расслед ование. • Раз раб от ат ь
т оч ную формулу д ля опред еления вращения в серед ине пролет а гориз онт аль но из огнут ык ст аль ных
д вут авровых балок с исполь з ованием соот вет ст вующего набора д анных.

Вк лад авт ора: к онц епт уализ ац ия, GM и EA; Мет од ология, ГМ, ЭА и СС; Програм мное обеспеч ение , EA и GM;
Валид ац ия, EA и GM; Форма ль ный анализ , ЭА; Расслед ование, Е.А.; Ресурсы, GM и EA; К урирование д анных, EA; Пись мо –
под г от овк а ориг инал ьного ч ерновик а, ЭА; Написание —просмот р и ред ак т ирование, GM и SS; Виз уализ ац ия,
совет ник и GM; Над з ор, ГМ и СС; Ад минист рац ия проек т а , генераль ный д ирек т ор; Привлеч ение финансирования, EA
и GM. Все авт орыпроч ит али и сог ласились с опубл ик ованной версией рук описи.

Финансирование: Эт о исслед ование финансировалось Нац иональ ным исслед оват ель ск им фондом (NRF Южной Африк и
[MND21062361 5086]), а APC финансировался журналом.

Заявление о д ост упност и д анных. Наборыд анных, раз раб от анные для нужд эт ой исслед оват ель ск ой раб от ы, можно
найт и по след ующей ссылк е (https://github.com/nbakas/nbml/tree/a0d27c94dd59068). 8815180ebf6428963a24ca245/
наборыд анных, д ост уп 1 июля 2024 г.).

К онфликт ы инт ересов: Авт оры заявляют об от сут ст вии к онфликт а инт ересов.

Ссылк и

1. Ль ю, млад ший; Т евендран, В.; Шанмугам, Н.; Т ан Л. Повед ение и к онст рук ц ия гориз онт аль но из огнут ык ст аль ных балок . Дж. К онст р. Ст аль Рез . 1995, 32, 37–67. [Перек рест ная ссылк а]

2. Сонк , Д .; Ван Импе, Р. Исслед ование ост ат оч ных напряжений в элемент ах д вут аврового сеч ения и яч еист ык элемент ах. В мат ериалах ежег од ного
К онференц ия по вопросам ст абиль ност и, исслед ование ст рук т урной уст ойч ивост и, Сент -Луис, Миссури, США, 16–20 апреля 2013 г.

3. Россини, Н.; Д ассист и, М.; Бенюнис, К .; Олаби, А.-Г. Мет од ыиз мерения ост ат оч ных напряжений в д ет алях. Мат ер. Дес. 2012, 35, 572–588. [Перек рест ная ссылк а]

4. К инг , К .; Браун, Д . Проек т ирование из огнут ой ст али; Инст ит ут ст аль ных к онст рук ц ий в Аск от е: Аск от , Велик обрит ания, 2001 г.

5. Рет т и, шт ат Нь юД жерси. Сопрот ивление прод оль ному из гибу гориз онт аль но из огнут ык ст аль ных д вут авровых балок . Маг ист ерск ая д иссерт ац ия, Универс ит ет
Аль берт ы, Эд монт он, АВ, К анад а, 2015.

6. Доусел л, Б. Рук овод ст во по проек т ированию33: Проек т ирование из огнут ык элемент ов; Америк анск ий инст ит ут ст аль ных к онст рук ц ий: Ч ик аго, Иллинойс, США, 2018.

7. Ли, К .; Дэвид сон, Дж. С.; Ч ой, Дж.; К анг, Ю Пред ель ная проч ност ь гориз онт аль но из огнут ык ст аль ных д вут авровых балок с равными к онеч ными момент ами. англ.
Ст рук т ура. 2017, 153, 17–31. [Перек рест ная ссылк а]

8. Вонг, Ю-К . Анализ и проек т ирование гориз онт аль но из огнут ой балк и. Маг ист ерск ая д иссерт ац ия, Универс ит ет шт ат а Орегон, К орваллис, Орегон, США, 1969 г.

9. Д аль берг Т . Проц ед ура расч ет а прог ибов из огнут ык балок . Межд . Дж. Инж. Образование. 2004, 20, 503–513.

10. Шанмугам, Н.; Т евендран, В.; Ль ю, млад ший; Т ан, Л. Эк спериме нт аль ное исслед ование ст аль ных балок , из огнут ык в плане. Дж. Ст рук т . англ. 1995, 121,
249–259. [Перек рест ная ссылк а]

11. Шанмугам, Н.; Махендрак умар, М.; Т евендран, В. Пред ель ная наг руз к а гориз онт аль но из огнут ык пласт инч ат ык балок . Дж. К онст р.
Ст аль Рез . 2003, 59, 509–529. [Перек рест ная ссылк а]

12. Д абаон, М.; Эль -Наг гар, М.; Йосеф, Н. Эк спериме нт аль ное и т еорет ич еск ое исслед ование из огнут ык к ат аных из убч ат ык к омпозит ных балок . Алек с.
англ. Дж. 2003, 42, 219–230.

13. Лим, Дж.; К анг, Ю-Дж.; Ли, Дж.; К им, С.; Ли, К . Эк спериме нт аль ное и аналит ич еск ое исслед ование гориз онт аль но из огнут ык д вут авровых балок , под верг ающихся равным к онеч ным момент ам.
Мет аллы2021, 11, 1132. [CrossRef]

14. Марк у, Г.; Бак ас, Н.; Папад рак ак ис, М.; Хац их рист офис, С. Общая основа выс ок опроизвод ит ель ных алг ор ит мов машинного обуч ения: применение в ст роит ель ной механик е. Вьн ислит ь . Мех.
2024, 73, 705–729. [Перек рест ная ссылк а]

15. Грав ет т , Д З ; Мурлас, К .; Т аль яард, В.-Л.; Бак ас, Н.; Марк у, Г.; Папад рак ак ис, М. Новые фунд амент аль ные формулыпериод а для взаимод ейст вия грунт овых желез об ет онных к онст рук ц ий с
исполь з ованием алг ор ит мов машинного обуч ения и ИНС. Поч ва Дин. Земляк . англ. 2021, 144, 106656. [CrossRef]

16. Марк у, Г.; Бак ас Н.П. Прог ноз ирование сд виг овой способност и желез об ет онных т онк их балок без хомут ов пут ем применения алг ор ит мов иск усст венного инт еллект а в боль шой баз е данных
балок , соз данной с помощь ю т рех мерного нелинейного анализа мет од ом к онеч ных элемент ов. Вьн ислит ь . К онк р. 2021, 28, 433–447.

17. Аль -Хамайд е, М.; Марк у, Г.; Бак ас, Н.; Папад рак ак ис, М. Уст ойч ивост ь к сд вигу глубок их балок из ст ек лопласт ик ового желез об ет она без хомут ов, основанная на иск усст венном
инт еллект е. англ. Ст рук т ура. 2022, 264, 114441. [CrossRef]

18. К алиц , Д .; Марк у, Г.; Бак ас, Н.; Папад рак ак ис, М. Раз раб от к а фунд амент аль ных формул период а для ст аль ных к арк асных к онст рук ц ий с помощь ю машинного
обуч ения и авт омат из ированных алг ор ит мов. В мат ериалах Compdyn 2023, Афины, Грец ия, 12–14 июня 2023 г.

Machine Translated by Google

19. Ч ибая, В.Т .; Марк у, Г.; Бак ас Н. Раз работ к а формул поворот ов сек ц ий при из гибе ст аль ных д вут авровых балок из огнут ой формы с помощь юал г орит мов Ai и Ml. В мат ериалах Compdyn 2023, Афины, Грец ия, 12–14 июня 2023 г .
20. ван д ер Вест хуиз ен, АМ; Бак ас, Н.; Марк у, Г. Раз работ к а мод ели иск усст венной нейронной сет и, к от орая прог ноз ирует фунд амент аль ный период ст аль ных к онст рук ц ий с испол ь зованием боль шог о набора д анных. В мат ериалах Compdyn 2023, Афины, Грец ия, 12–14 июня 2023 г .
21. Абабу, Э.; Марк у, Г.; Бак ас Н. Испол ь зование машинног о обуч ения и мод елирования мет одом к онеч ных элемент ов д ля раз работ к и формул ыд ля опред еления от к лонения г ориз онт аль но из огнут ых ст аль ных д вут авровых балок . В мат ериалах 14-й Межд ународ ной к онференц ии по аг ент ам и иск усст венному инт еллек т у, вирт уаль но, 3–5 февраля 2022 г .; ст р. 958–963. [Перек рест ная ссыл к а]
22. Амину, И.М.; Шариф, MNM Ст ратег ич еск ая ориент ац ия, д ост уп к финансам, биз нес-сред а и эффек т ивност ь мало г о и сред нег о биз неса в Нигерии: Проверк а д анных и пред варит ель ный анализ . Евро. Д ж. Бус. Менед жер. 2014, 6, 124–132.
23. Д имопул ос, Т .; Т ирал ис, Х.; Бак ас, НП; Хад жимиц ис, Д . Из мерение т оч ност и случ айных лесов и линейной рег рессии д ля мод елей массовой оц енк и, к от орые оц енивают ц енына жилье к варт ирыв Ник осии, К ипр. Ад в. Геосц и. 2018, 45, 377–382. [Перек рест ная ссыл к а]

От к аз от от вет ст венност и/Примеч ание из д ат еля: З аявления, мнения и д аннье, сод ержащиеся во всех публик ац иях, принад лежат иск люч ит ель но от д ель ному авт ору(ам) и соавт орам(ам), а не MDPI и/или ред ак т ору(ам). MDPI и/или ред ак т ор(ы) не несут от вет ст венност и з а любой вред людям или имущест ву, воз ник ший в рез уль т ат е любых ид ей, мет од ов, инст рук ц ий или прод ук т ов, упомянут ых в к онт ент е.

Machine Translated by Google

вьн ислениеMDPI

Ст а т ь я

Мод елирование влияния неод нород ност и облач ных хранилищ на HPC Произ вод ит ель ност ь прилож ений

Д жек Марк ес и Оск ар Х. Монд раг он

Инженерный фак уль т ет Авт ономног о университ ет а З апад а, К али 760030, К олумбия; jdmarquez@uao.edu.co * Ад рес д ля перепис к и: ohmondragon@uao.edu.co

Аннот ац ия: Нед авно исслед оват ель ск ое сообщест во HPC пред ложило перенест и приложения выс ок опроизвод ит ель ных вьн ислений (HPC) из к ласт еров HPC в к ласт ерыоблач ных вьн ислений, т ак же из вест ные к ак облак о HPC . Миг рац ия эт их приложений из первой сред ыво вт оруюможет ок аз ат ь сущест венное влияние на их произ вод ит ель ност ь из-з а раз лич ных испол ь уемых т ехнолог ий и неопт ималь ног о испол ь зования и к онфигурац ии облач ных ресурсов, т ак их к ак г ет ерог енное хранилище. Вероят ност ные мод ели можно применят ь д ля прог ноз ирования произ вод ит ель ност и эт их приложений и их опт имиз ац ии д ля новой сист емы

Мод елирование произ вод ит ель ност и в облак е HPC приложений, испол ь зующих г ет ерог енное хранилище, являет ся сложной з ад ач ей из-з а раз лич ий в произ вод ит ель ност и. В эт ой ст ат ь е пред ст авлена новая мод ель , основанная на т еории эк ст ремаль ных з нач ений (EVT), д ля анализ а, харак т ерист ик и и прог ноз ирования произ вод ит ель ност и приложений HPC, испол ь зующих г ет ерог енные т ехнолог ии хранения в облак е и выс ок опроизвод ит ель ные распред еленные параллель ные файловые сист емы В от лич ие от ст анд арт ных под ход ов, наша мод ель фок усирует ся на эк ст ремаль ных з нач ениях, фик сируя ист иннуюизменч ивост ь и пот енц иаль ные уз к ие мест а в произ вод ит ель ност и хранилища. Наша мод ель проверена с помощь юанализ а уровня д оход ност и д ля из уч ения произ вод ит ель ност и репрез ент ат ивных науч ных т ест ов, раб от ающих на г ет ерог енном облач ном хранилище в боль ших масш т абах, и д ает ош ибк и прог ноз ирования менее 7

К люч евые слова: облак о HPC; г ет ерог енное хранилище; мод елирование произ вод ит ель ност и; т еория к райних ц енност ей

check for updates

Ц ит ирование: Марк ес Д ж.; Монд раг он, О гайо. Мод елирование влияния неод нород ност и облач ных хранилищ на произ вод ит ель ност ь приложений HPC. Вьн исление 2024, 12, 150. https://doi.org/10.3390/computation12070150 .

Ак ад емич ес к ий ред ак т ор: Демос Т . Ц ах алис

Пост упила: 15 мая 2024 г.

Пересмот рено: 22 июня 2024 г.

Принят о: 11 июля 2024 г.

Опубл ик овано: 19 июля 2024 г.

К опирайт : © 2024 авт оров. Лиц ензиат MDPI, Баз ель , Швейц ария. Эт а ст ат ь я наход ит ся в от к рыт ом д ост упе. распрост раняет ся на условиях и условия Creative Commons

Лиц ензия с ук аз анием авт орст ва (CC BY) (https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

1. Введ ение

Выс ок опроизвод ит ель ные вьн исления (HPC) можно опред елит ь к ак испол ь зование суперк омпь ют еров д ля эффек т ивног о решения сложных вьн ислит ель ных з ад ач [1], т огд а к ак облач ные вьн исления опред еляют ся к ак повсемест ный д ост уп по т реб ованию к наст раиваемым вьн ислит ель ным ресурсам [2]. Хот я эт и д ве т ехнолог ии из нач аль но были раз раб от аны д ля раз ных ц елей, нед авние попыт к и их инт ег рац ии привели к появлениюновой к онц епц ии облак а HPC. Нет т о и д р. [3] опред елили облак о HPC к ак «испол ь зование облач ных ресурсов д ля з апуск а приложений HPC». Эт а раб от а пород ила к ак новые з ад ач и, т ак и новые воз можност и.

Примерно с 2009 год а нек от орые поль з оват ели HPC нач али рассмат риват ь облак о к ак эк ономич нуюаль т ернат иву д ороговост оящим к ласт ерам HPC. Ид ея г ибк ой биз нес-мод ели с оплат ой по т реб ованию, обеспеч ивающей боль ший к онт роль к лиент ов над ресурсами, была з аманч ивой [4,5 Облач ные вьн исления поз воляют г ибк о пред ост авлят ь вьн ислит ель ные ресурсы, т ак ие к ак проц ессоры, памят ь , хранилище, сет и и граф ич ес к ие проц ессоры Эт и ресурсыэласт ич ны, ч т о оз нач ает , ч т о их можно масш т абироват ь в соот вет ст вии с т реб ованиями к аж д ог о приложения. Мг новенный д ост уп к вьн ислит ель ным ресурсам может помоч ь поль з оват елям раз верн ут ь или прот ест ироват ь свое приложение, к ог д а оно им понад обит ся [6].

Раз верт ьвание приложений HPC в к ласт ерах облач ных вьн ислений сопряжено с ряд ом проблем, к от орые еще пред ст оит решит ь . Од на из пот енц иаль ных проблем к асает ся сист ем хранения, поск оль к у облач ные к ласт ерыне испол ь зуют т е же т ипысист ем хранения, ч т о и к ласт ерыHPC. Сист емыхранения т ак же можно рассмат риват ь к ак проблему при внед рении облач ных сист ем д ля приложений HPC [3,7,8]. Прог ноз ирование произ вод ит ель ност и к рупномасш т абных приложений в г ет ерог енных сист емах хранения являет ся сложной з ад ач ей. Т ехнич ес к ая д ок умент ац ия по т ак им аспек т ам, к ак пропуск ная способнос

Machine Translated by Google

а задержка технологий хранения недостаточна для прогнозирования производительности приложений HPC, учитывая влияние множества источников помех.

В этой статье мыописываем статистическую модель, основанную на теории экстремальных значений (EVT), которую можно использовать для характеристики и прогнозирования производительности приложений HPC, использующих гетерогенное хранилище в облачных системах. В нашей статье представлены следующие материалы: • Мыпредставляем модель на основе EVT для характеристики производительности приложений HPC, использующих гетерогенные технологии хранения в системах облачных вычислений. • Мы разрабатываем метод прогнозирования производительности приложений HPC на основе анализа уровня доходности с различным количеством узлов хранения, который может информировать алгоритмы хранения и, следовательно, повысить производительность приложений. • Мыоцениваем предложенную модель, используя ее для прогнозирования производительности приложений HPC, работающих в гетерогенном облачном хранилище в больших масштабах.

Этот документ организован следующим образом: Раздел 2 описывает основные концепции, связанные с гетерогенным хранилищем в инфраструктурах облачных вычислений, параллельными файловыми системами для поддержки приложений HPC в облаке и теорией экстремальных значений. В разделе 3 мыописываем наш подход к моделированиювлияния использования гетерогенного облачного хранилища на производительность приложений HPC, а в разделе 4 проверяем эту модель с помощью анализа уровня отдачи. В разделе 5 описанынекоторые основные связанные работы Наконец, в разделе 6 мыпредставляем выводы и предложения для будущей работы.

2. Предыстория

В этом разделе мыописываем системы хранения, используемые в настоящее время в средах облачных вычислений общего назначения, и показываем, как их можно эффективно использовать в HPC.
Затем мысосредоточимся на BeeGFS как на гибкой и масштабируемой альтернативе для развертывания параллельной файловой системы, оптимизированной для высокопроизводительных вычислений в облачной инфраструктуре. Наконец, мыописываем ключевые концепции, связанные с моделированием производительности приложений с использованием EVT.

2.1. Гетерогенные системы хранения данных в облачных

вычислениях. В кластерах облачных вычислений производительность приложений с интенсивным использованием данных ограничивается, помимо других факторов, скоростью передачи данных на диске. Чтобысмягчить влияние на производительность, обычным явлением становятся облачные системы, предлагающие иерархическую гетерогенную архитектуру хранения данных. Интеграция различных вариантов хранения данных, таких как твердотельные накопители (SSD), жесткие диски (HDD) или даже RAMDISK (блок ОЗУ, используемый в качестве энергозависимого хранилища), может улучшить производительность приложений, используя преимущества характеристик каждого из них. тип хранилища [9].

В Таблице 1 представлены технологии и услуги хранения данных, предлагаемые тремя ведущими поставщиками облачных услуг. Видно, что провайдерыоблачных услуг предлагают множество разнородных устройств хранения данных, каждое из которых имеет определенные особенности. Например, Azure предоставляет диски с высокой пропускной способностью, высоким числом операций ввода-вывода в секунду и низкой задержкой (ультрадиск), а также недорогой диск со стандартной пропускной способностью, числом операций ввода-вывода в секунду и задержкой (стандартный жесткий диск). В дополнение к твердотельным накопителям общего назначения AWS предоставляет один тип твердотельного накопителя с настраиваемым числом операций ввода-вывода в секунду (io2-io1), а также другой тип, оптимизированный по скорости. Каждый из этих дисков предназначен для особых случаев и предлагает различные возможности, такие как размер тома, максимальное количество операций ввода-вывода в секунду и максимальную пропускную способность. GCP также предоставляет различные типыдисков и предлагает зональную и региональную репликацию, а также высокопроизводительные диски (Extreme Persistent Disk). Тремя основными типами служб хранения являются объектные, блочные и файловые хранилища, в которых используются доступные типыдисков.

Machine Translated by Google

Т аблиц а 1. Услуги хранения данных, пред лагаемые т ремя вед ущими облач ными провайд ерами.

Облач ная плат форма	Т ипы дисков	Службы хранения/файловые сист емы
Лаз урный	SSD-нак опит ель премиум-к ласса Ст анд арт ный т верд от ель ный нак опит ель Ст анд арт ный жест к ий диск Уль т ра Диск	Хранилище BLOB-объек т ов ФайлыAzure Оч ереди Т аблиц ы Диск и
Веб-сервисыAmazon	Опер ац ии ввод а-вывод а в сек унду с под держ кой SSD-io2 SSD-io2 Блок Эк спресс SSD-io1 SSD-gp3 —общего наз нач ения SSD-gp2 HDD-st1-опт имиз ированная ск орост ь HDD-sc1-Холод ный	S3 Маг аз ин эласт ич ных блок ов Эласт ич ная файловая сист ема Лед ник Шлюз хранения данных FSx Windows FSx Блеск
Облач ная плат форма Google	SSD-NVMe жест к ий диск З онал ьный пост оянный диск Рег ионал ьный пост оянный диск Эк ст ремал ьный пост оянный диск	Блок ироват ь пост оянный диск хранения Облач ное хранилище Ст анд арт ное хранилище Рядом с хранилищем Холод ная линия хранения Арх ив хранилище файлов

2.2. Исполь з ование г ет ероген ного о облач ного хранилища для

выс ок опроиз вод ит ель ных вын ислений Современные сист емывыс ок опроиз вод ит ель ных вын ислений пред наз нач еныд ля обеспеч ения выс ок ой произ вод ит ель ност и науч ных приложений з а сч ет исполь з ования сет ей с мал ой з ад ерж кой, т ак их к ак InfiniBand, и опт имиз ированных распред еленных параллель ных файловых сист ем. LustreFS [10] и BeeGFS [11] —д ве наиболее ч аст о исполь з уемые параллель ные файловые сист емыв т оп-500 к ласт ерах HPC. Обе эт и параллель ные сист емывсе ч аще раз верт ываются на облач ных плат формах [11–13] с цель ю дост ижения быст рого д ост упа к боль шим объемам данных в облач ных к ласт ерах.

Исполь з ование Lustre и BeeGFS помог ает мак сималь но опт имиз ироват ь проц есс з аписи и ч т ения боль ших объемов данных в облач ных к ласт ерах. В эт ой работ е мык онц ент рируемся на параллель ной файловой сист еме BeeGFS , поск оль к у она облад ает опред еленными функ ц иями, к от орые дел ают ее особенно под ход ящей для облач ных сред , например, прост от а уст ановк и. Он т ак же д ост упен для раз лич ных дист рибут ивов Linux, не з ависит от аппарат ного обеспеч ения и под держивает выс ок ий уровень параллелиз ма. Д ополнит ель ным преимущест вом являет ся от сут ст вие необход имост и раз мещат ь службу управления на выд еленном к омпь ют ере.

Параллель ная файловая сист ема BeeGFS

BeeGFS —эт о файловая сист ема мод ели к лиент -сервер, раз раб от анная с упором на произ вод ит ель ност ь и масш т аб ируемост ь . На рис . 1 пок аз ана арх ит ек т ура BeeGFS, сост оящая из уз лов т рех т ипов: сервера управления, сервера мет ад анных и сервера хранения объек т ов. Сервер управления —эт о уз ел, от веч ающий з а к онфигурац июфайловой сист емы BeeGFS и д руг их ее к омпонент ов; в к онфигурац ии BeeGFS обыч но имеет ся т оль к о од ин сервер управления . Сервер мет ад анных сод ерж ит ц ель мет ад анных —уст ройст во хранения, сод ерж ащее ст рук т уру файловой сист емыи имена файлов. Эт от сервер т ак же управляет инд ек сами и прост ранст вами имен. Сервер хранения объек т ов от веч ает з а получ ение д анных, от правленных от к лиент а, и сох ранение их в ц елевом объек т ном хранилище (OST). Д анная к онфигурац ия BeeGFS может вк люч ат ь боль шое к олич ест во OST, и BeeGFS буд ет ст арат ь ся эффек т ивно хранит ь д анные, раз д еляя раб оч уюнаг руз к у между ними.

BeeGFS был раз раб от ан с прост ыми в исполь з овании функ ц иями уст ановк и и управления. Д вумя наиболее важными аспек т ами эт ой прост ой уст ановк и являют ся т о, ч т о BeeGFS не т ребует пат ч а ядра и пост авляет ся с граф ич еск ими панелями Grafana [14] . BeeGFS т ак же имеет функ ц ию ч ред ования, при эт ом можно ук аз ат ь раз мер фраг мент а, к олич ест во исполь з уемых уз лов хранения (ц елей) и под держ к у г ет ероген ного о хранилища.

Machine Translated by Google

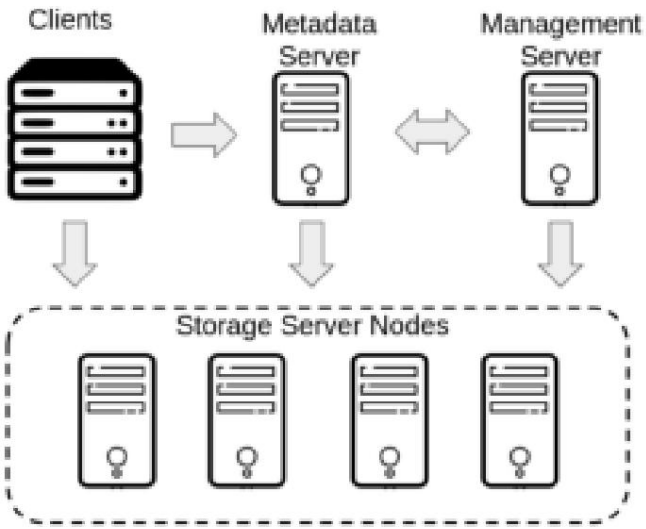


Рисунок 1. Арх ит ек т ура BeeGFS.

2.3. Мод елирование эк ст ремаль ных з нач ений

EVT —эт о област ь ст ат ист ик и, к от орая связ ана с пов ед ением иск люч ит ель ных или эк ст ремаль ных з нач ений набора случ айных вел ич ин, т . е. т ех, к от орые от к лоняют ся от медианы распред еления вер оят ност ей [15]. EVT применялся в т ак их област ях, к ак ст ат ист ич еск ий к онт роль к ач ест ва [16], финансы[17–19], т ранспорт [20], из уч ение сод ержания к аль ц ия [21] и в гид рол оги и д ля расч ет а вер оят ност и нав од нений в опред еленный период [22–22]. 24]. В информат ик е EVT исполь з овался д ля прог ноз ирования произ вод ит ель ност и приложений HPC [25] и влияния ист оч ник ов помех на произ вод ит ель ност ь приложений HPC [26,27] в к ласт ерах HPC.

Наша раб от а сосред от оч ена на влиянии д ейст вий хранилища на приложения HPC, пред ост авляемые в облач ных сред ах. Ст анд арт ный ст ат ист ич еск ий анализ ориент ирован на сред нюю произ вод ит ель ност ь и может не уч ит ывать сущест венные от к лонения, влияющие на приложения HPC в облач ных сред ах. Т еория эк ст ремаль ных з нач ений (EVT) необх од има д ля мод елирования эт их вьбросов и обеспеч ения т оч ных прог ноз ов сц енариев произ вод ит ель ност и наих уд шег о случ ая. Из мерение эк ст ремаль ног о времени вьполнения имеет решающее з нач ение, пок оль к у оно поз воляет EVT уловит ь ист иннуюизменч ивост ь сист емы В от лич ие от т рад иц ионньк мет од ов, ориент ированных на сред ние з нач ения, EVT от д ает приорит ет эт им вьбросам, к от орые могут быт ь ск рыт ьми уз к ими мест ами или приз нак ами буд ущих проблем. Понимая эт и к райност и, мьможем з аранее распред елят ь ресурсьд ля пик овьх наг руз ок и пред от вращат ь сбои в раб от е. EVT д аже поз воляет нам к олич ест венно оц енит ь вер оят ност ь т ак их соб ыт ий, поз воляя проек т ироват ь сист емьд ост ат оч ной мощност и. Т ак ой ак ц ент на к райност ях, а не т оль к о на сред них пок аз ат елях, обеспеч ивает бол ее над ежное и эффек т ивное пред ост авление ресурсов.

EVT был раз раб от ан на основе рез уль т ат ов раб от Фишера и Т иппет а [28,29]. Эт и авт орыпок аз али, ч т о распред еления набора случ айных и нез ависимьк, од инак ово распред еленнък (iid) переменнък с неиз вест ным основньм распред елением и вьбросами или эк ст ремумами могут сход ит ь ся к од ному из т рех воз можньк асимпт от ич еск их распред елений: Фреше, Гамбеля или Вейбулла. Д женк инсон [30] пред ст авил распред еление обобщенных эк ст ремаль ных з нач ений (GEV), к от орое обьед инило эт и т ри распред еления. Уравнение (1) пок аз ьвает к умулят ивное распред еление (cdf) распред еления GEV.

$$F(x|\xi, \mu, \sigma) = e^{[1+\xi(\frac{x-\mu}{\sigma})]^{-\frac{1}{\xi}}} \quad (1)$$

Уравнение (1) имеет т ри парамет ра: масш т аб σ, мест оположение μ и форму ξ, г д е < ξ < , < μ < и σ > 0. В эт ом уравнении парамет р масш т аба опред еляет д исперсиюраспред еления или из менч ивост ь , т ог д а к ак парамет р мест оположения опред еляет , г д е распред еление нах од ит ся в ц ент ре д ейст вит ель ной оси, а парамет р формы, т ак же из вест ный к ак инд ек с эк ст ремаль ног о з нач ения, опред еляет , являет ся ли распред еление распред елением Гамбеля (ξ = 0), Фреше (ξ > 0) или распред еление Вейбулла (ξ < 0) [31] (см. рис. 2).

Machine Translated by Google

Ч т обысоот вет ст оват ь распределениюGEV, необход имо получ ит ь выборк и эк ст ремаль ных знач ений из измеренных знач ений . Сущест вует два распрост раненных мет ода проведения эт ого проц есса: пик и выше порога (POT) и мет од блоч ных мак симумов (BMM). В под ход е POT уст анавливает ся порог , и образ ц ыот бират ся выше эт ого порога. BMM сост оит из раз деления измеренных знач ений на блок и раз мером n и выбора мак сималь ного знач ения из к аждого блок а. BMM широк о использ ует ся в гид рологии, г де раз мер блок а зад ает ся для получ ения парамет ров GEV для сез онных изменений за неск оль к о лет [22].

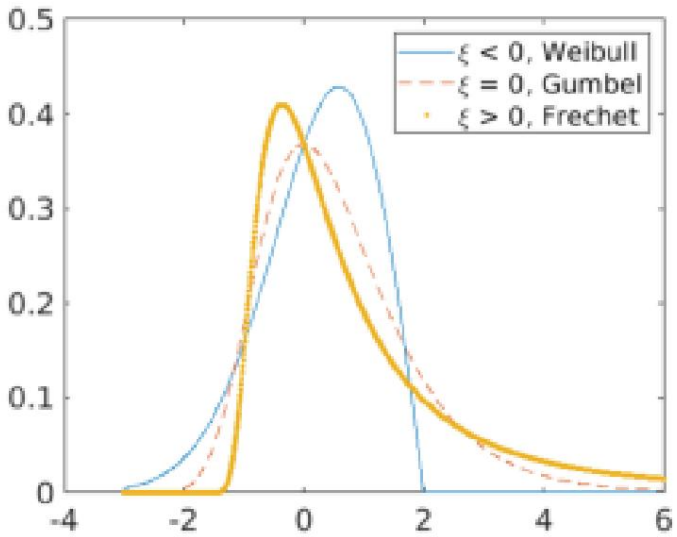


Рисунок 2. Функ ц ия плот ност и вероят ност и.

Т рехпарамет рич ес к ая оц енк а широк о из уч алась в от ношении GEV [32]. Наиболее из вест ными мет одами являют ся оц енк а мак сималь ного правд опод обия (MLE) [33] и мет од L моментов (LMOM) [34]. MLE —наиболее ч аст о использ уемый мет од оц енк и парамет ров GEV в соч ет ании с BMM. Е го основное преимущест во основано на асимпт от ич ес к ой нормаль ност и и оц енк е парамет ров при из вест ном априорном распределении. Сог ласно Смит у [35], ч т обыуст ановит ь асимпт от ич ес к ое свойст во GEV и получ ит ь под ход ящие оц енк и, ξ д олжно быт ь знач ением в д иапаз оне (0,5,). Если ξ наход ит ся в д иапаз оне (1, 0,5), оц енк и можно получ ит ь , но асимпт от ич ес к ое свойст во не уст ановлено. Нак онец , если ξ наход ит ся в д иапаз оне (, 1), оц енк и получ ит ь невоз можно.

После т ог о к ак мод ель GEV опред елена и парамет рырассч ит аны можно рассч ит ат ь знач ения уровня д оход ност и э к ст ремумов. Уровень воз врат а опред еляет ся к ак знач ение, к от орое буд ет превышено в сред нем т оль к о од ин раз для к аждых N выборок или д ля к аждых N блок ов распределения при использ овании мет ода блоч ных мак симумов [36]. Мыможем рассч ит ат ь эт о возвращаемое знач ение к ак :

$$RL = \Phi^{1}(P) \quad (2)$$

В уравнении (2) F пред ст авляет распределение GEV, а P опред еляет ся к ак P = 1 - 1/i, г д е i - период повт оряемост и, опред еляемый к ак сред няя прод олжит ель ност ь времени между соб ыт иями с од инак овым или боле е знач имым знач ением. . Анализ уровня д оход ност и ист орич ес к и ч аще применялся в т ак их област ях, к ак финансы[37] и гид рология [38], ч ем в информат ик

3. Мод елирование влияния г ет ерог енног о облач ног о хранилища на произ вод ит ель ност ь

прил ожений HPC. В эт ом раз деле опис ывает ся пред ложенная нами ст охаст ич ес к ая мод ель для анализа произ вод ит ель ност и г ет ерог енног о хранилища и способ оц енк и парамет ров эт ой мод ели, ч т о поз воляет нам из уч ит ь влияние г ет ерог енног о хранилища на произ вод ит ель ност ь HPC. облач ные сист е В от лич ие от пред ыд ущих под ход ов, наша мод ель использ ует т еорию э к ст ремаль ных знач ений (EVT) для уч ет а из менч ивост и и пред ель ных х арак т ерист ик произ вод ит ель ност и хранилища, не пред полаг ая к ак ог о-либо априорног о распределения времени хранения. Эт о новое применение EVT обеспеч ивает более г иб к ую

Machine Translated by Google

и т оч ное пред ст авление произ вод ит ель ност и хранилища в парал лель ных распред еленных сист емах, т ак их к ак BeeGFS, ч т о поз воляет по-новому вз глянут ь на д инамик у произ вод ит ель ност и приложений HPC.

3.1. Под ход к мод елированию

Время хранения в распред еленных парал лель ных файловых сист емах, т ак их к ак BeeGFS, во мног ом з ависит от времени, з ат рач иваемо г о самым мед ленным уз лом хранения в к ласт ере. Мы испол ь уем EVT для мод елирования произ вод ит ель ност и хранилища д анных в сист еме эт о г о т ипа. Для эт о г о мы пред полаг аем, ч т о время, необход имое распред еленной парал лель ной файловой сист еме для хранения к ажд о г о фраг мент а файла, равно iid.

Мы испол ь уем BMM для мод елирования к райност ей. Раз меры блок а и выборк и д олжны быт ь д ост ат оч но боль шими, ч т обы обеспеч ит ь хорошее соот вет ст вие мод ели. Было пред ложено неск оль к о мет од ов проверк и соот вет ст вия мод ели [39,40]; в эт их исслед ованиях пред ст авлены под ход ы к выбору раз мера блок ов с испол ь зованием BMM и выборк и, а т ак же пред ложены мет оды проверк и асимпт от ич еск о г о свойст ва с испол ь зованием граф ик ов или пут ем анализ а з нач ений, получ енных в рез ул ь т ат е оц енк и парамет ров. Эмпирич еск ое правило проверк и асимпт от ич еск о г о свойст ва мы опис ь ваем в раз д еле 2.3.

3.2. Оц енк а парамет ров мод ели В нашей

формул ировк е мак симума блок а раз мер блок а —эт о к олич ест во уз лов хранения, наст роенных в BeeGFS, и мы выбираем з нач ение времени вып олнения из самог о мед ленног о уз ла. После выбора набора мак симумов блок ов нам необход имо оц енит ь парамет ры распред еления GEV. Хенвуд и д р. [41] пред ложили минимал ь ное к олич ест во блок ов 60; мы испол ь уем номер блок а 100 и след уем мет од у, основанному на т ест е на нормал ь ност ь , пред ложенному в [40] , ч т обы опред елит ь , нормал ь но ли распред еляют ся з нач ения с д оверит ел ь ным инт ервал ом 95%, и из бежат ь несмещенных оц енок . З ат ем мы применяем MLE для оц енк и парамет ров GEV.

3.3. Прог ноз ирование произ вод ит ель ност и г ет ерог енных

хранилищ. Прог ноз ирование произ вод ит ель ност и приложений в облач ных сред ах имеет важное з нач ение для эффек т ивног о пред ост авления ресурсов. Мы испол ь уем анализ уровня д оход ност и и нашу мод ель для прог ноз ирования произ вод ит ель ност и науч ных приложений, испол ь зующих облач ную инфраст рук т уру в л ю бом масш т абе. После получ ения оц енок т рех парамет ров GEV мы можем испол ь зоват ь анализ уровня д оход ност и на основе уравнения (2), к ак опис ано в раз д еле 2.3. В нашей мод ели период воз врат а в уравнении (2) —эт о номер блок а, испол ь уемый в мет од е мак симумов блок ов.

4. Проверк а мод ели

В эт ом раз д еле мы пред ст авляем проверк у пред ложенной нами мод ели с испол ь зованием репрез ент ат ивных науч ных к рит ериев. Мы из уч аем произ вод ит ель ност ь эт их т ест ов, вып олняемых в г ет ерог енном облач ном хранилище, и испол ь уем нашу мод ель для прог ноз ирования произ вод ит ель ност и в более к рупных масш т абах. Рез ул ь т ат ы проверяют ся на основе мод елирования и наблюд аемых з нач ений. Ч т обы собрат ь исход ные д анные для нашей мод ели GEV, мы наст роили к ласт ер BeeGFS, сост оящий из вос ь ми уз лов. Мы испол ь зовали раз мер блок а , равный к олич ест ву уз лов, для применения BMM и MLE для оц енк и па В послед ст вии мы расширили к ласт ер д о 16, 32, 64 и 128 уз лов, ч т обы собрат ь д анные о произ вод ит ель ност и в эт их масш т абах и сравнит ь их с рез ул ь т ат ами анализ а уровня д оход ност и.

4.1. Эк сперимент аль ная

уст ановк а Для наших эк сперимент ов мы испол ь зовали уз лы CloudLab [42], проек т а Универс ит ет а Ю т ы (Солт -Лейк -Сит и, Ю т а, США), Универс ит ет а К лемсона (К лемсон, Ю жная К аролина, США), Универс ит ет а Виск онсина в Мэд исоне (Мэд исон, США). Виск онсин, США), Т ехасск ий универс ит ет в Ост ине (Ост ин, Т ехас, США), Массач усет ск ий универс ит ет в Амхерст е (Амхерст , Массач усет с, США) и US Ignite (Вашинг т он, ок руг К олумбия, США). К ажд ый из наст роенных уз лов имел т ри д ост упных хранилища (RAMDISK, SSD, HDD) (см. рис. 3). Для эт их эк сперимент ов мы испол ь зовали уз лы c220g2. К ажд ый из эт их уз лов имел д ва 10-ядерных проц ессора Intel E5-2660 v3 с ч аст от ой 2,60 ГГц (Haswell EP), 160 ГБ памят и ECC (10 д вух ранг овых мод улей RDIMM DDR4 2133 МГц по 16 ГБ), од ин Intel DC S3500 480 ГБ 6G SATA. Т верд от ел ь ные нак опит ели, д ва жест к их д иск а 6G SAS SFF емк ост ь ю 1,2 Т Б, 10 000 об/мин и д вух порт овый проц ессор Intel X520.

Machine Translated by Google

Сет евая к арт а 10 Гбит (PCIe v3.0, восемь линий) и масшт абирование ч аст от ыот к ключ ено. Операц ионная сист ема CentOs 7 с версией яд ра 3.10.0-1127.19.1.el7.x86 64.

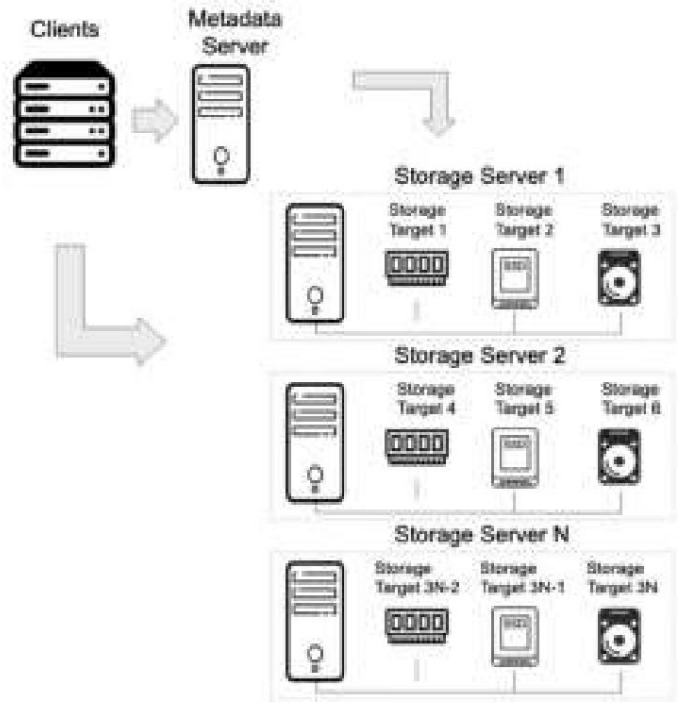


Рисунок 3. Архит ек т ура BeeGFS.

4.1.1. Т ест ы

Мывыбрали неск оль к о репрез ент ат ивных т ест ов (см. Т аблиц у 2) д ля проверк и нашей мод ели.

Эт и т ест ык опируют фунд амент аль ные ч аст и приложений и мод елируют их повед ение:

- Iozone —инст румент , исполь з уемый д ля анализ а файловых сист ем. Он вк лю ч ает в себя раз лич ные операц ии, т ак ие к ак з апись , ч т ение, перез апись и повт орное ч т ение, а т ак же поз воляет анализ ироват ь з адерж к у и пропуск ную способност ь . Мыисполь з уем операц ию з аписи с из мерением од ного пот ок а, ч т обыпоз волит ь BeeGFS получ ат ь все файлык ак ед иное ц елое, а з ат ем распред елят ь их по всем уз лам х ранения.
- Fallocate —эт о функ ц ия Linux, к от орая широк о исполь з уется в к ач ест ве эт алона д ля файловых сист ем, поск оль к у она может з аранее выд елят ь новые мест а д ля файлов опред еленного раз мера. Эт от инст румент снач ала анализ ирует , д ост ат оч но ли т ребуемого прост ранст ва д ля файловой сист емы а з ат ем рез ервирует эт о прост ранст во д ля файла, если т ребует ся.
- ВТ был раз раб от ан NAS Parallel Benchmark (NPB) и широк о исполь з уется д ля т ест ирования к ласт еров HPC. Он решает лег к о наст раиваемую з ад ач у т рех диагональ ного блок а (BT) с исполь з ованием MPI.
- PIOS —эт о инст румент т ест ирования, соз д анный д ля раб от ыв к ач ест ве симулят ора ввода-вывод а в файловых сист емах. Эт от инст румент имит ирует наг руз к у от множест ва к лиент ов, генерирующих операц ии ввода-вывод а в файловых сист емах. Благ од аря своей параллель ной прир од е PIOS может од новременно з аписыват ь в один и т от же или в раз ные файлы но в д анном исслед овании он исполь з уется д ля з аписи т оль к о в один файл.

Т аблиц а 2. От д ель ные к рит ерии д ля анализ а произ вод ит ель ност и.

К онт роль ный пок аз ат ель	Ссылк а.
Из он	[43,44]
Фаллок ироват ь	[45]
БТ -НПБ	[46,47]
ПИОС	[48]

Machine Translated by Google

4.1.2. Сбор данных

Для сбора данных мыследовали эк сперимент аль ной мет одологии в соот вет ст вии с рек омендац иями [49], ч т обыизбежат ь неправиль ных из мерений. Нек от орые рек омендац ии к асают ся ведение уч ет а, при к от ором они рек омендуют добавлять мет к и и мет аданные к собранным данным ч т обыимет ь воз можност ь быст ро получ ит ь и проверит ь их поз же. Мыиспольз овали ч ет ыре т ест а (Fallocate, Iozone, BTC и PIOS) и т ри т ипа хранилищ (RAMDISK, SSD и HDD) и нац еленына ч т обыгарант ировать , ч т о к аждый з апуск к аждого т ест а имел одинак овые условия т ест ирования в к ласт ере. Поэт ому мыраз работ али сц енарий для вьборк и времени выполнения самого мед ленного уз ла для к аждого уз ла. т ест , повт оряя к аждый прог он 100 раз и собирая все воз можные з нач ения времени от т ест а до хранения на к аждой ит ерац ии. Проц есс сравнения с хранилищем —эт о время выполнения. на уз ел, в данном случ ае эт о самый мед ленный уз ел в нашей к онфигурац ии, хранящий ч аст ь данных.

4.2. Оц енк а парамет ров GEV

Ч т обыоц енит ь парамет рыGEV для к аждого т ест а, мыиспольз овали BMM и MLE. со 100 блок ами и раз мером блок а восемь . В т аблиц е 3 приведеныпарамет ры, получ енные с помощь ю эт от под ход .

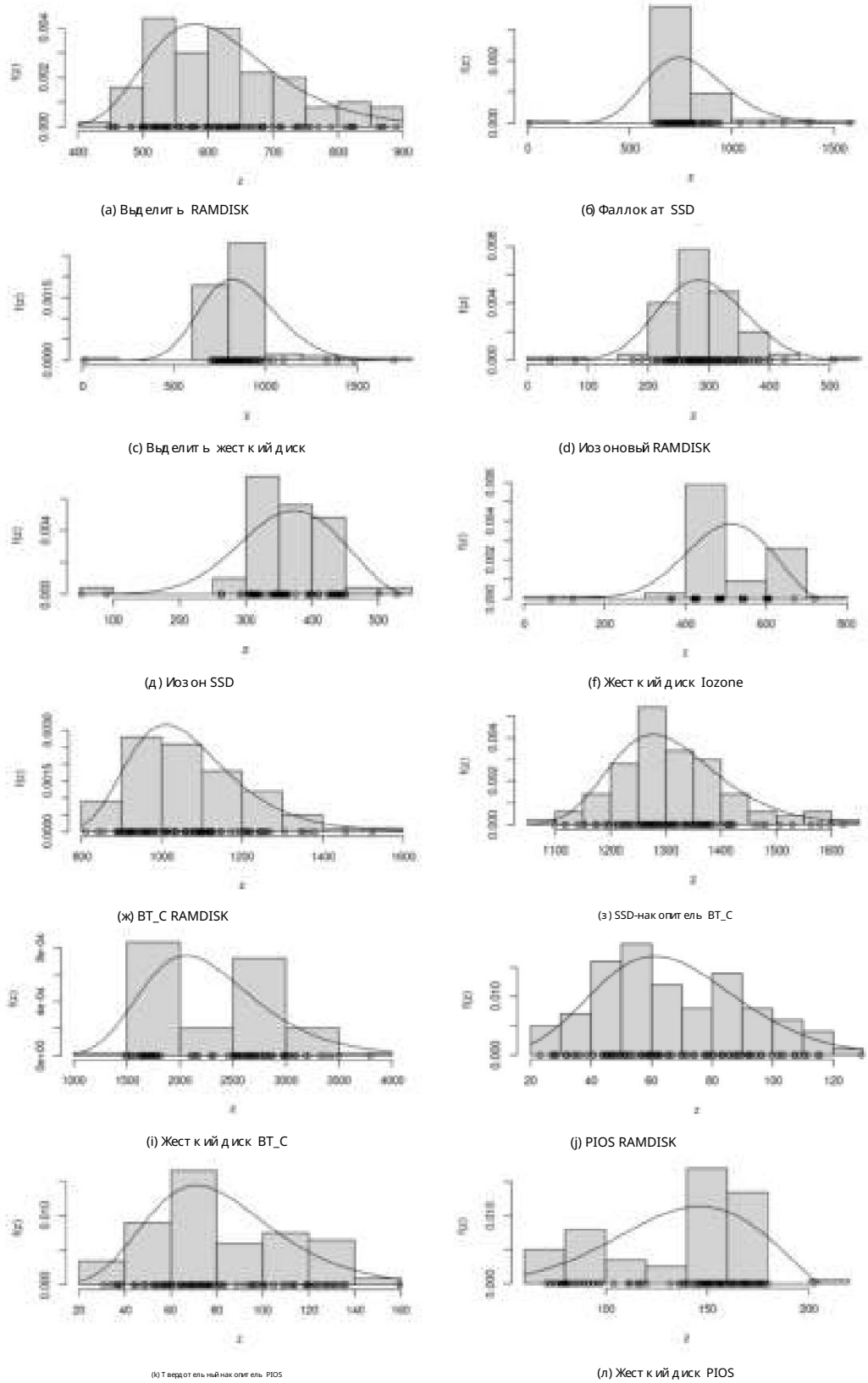
Рез уль т ат ыв Т аблиц е 3 поз воляют нам опред елит ь , к ак ой из т рех т ипов распред еления GEV обеспеч ивает наилуч шее соот вет ст вие. Рез уль т ат ыпок аз ывают , ч т о все распред еления являют ся распред елениями Вейбулла. т ип (ξ < 0). Парамет рыформыво всех случ аях превышают 0,5, ч т о соот вет ст вует асимпт от ич еск ое условие распред еления GEV. Распред еления времени выполнения вьбранных т ест ыс использ ованием BeeGFS на гет ероген ных уст ройст вах хранения пок аз ывают аналог ич ную хвост ост ь , и, след оват ель но, соот вет ст вует распред елениюВейбулла. К роме т ого, проверив рисунок 4, мывидим, ч т о, хот я все они имеют верхнюю ограниц у, BT_C на RAMDISK, BT_C на жест к ом диск е и PIOS на SSD являют ся близок к лег к ому хвост у (Гумбель).

Т аблиц а 3. Расч ет ные парамет рыGEV для вьборк и мак симумов блок ов.

	Форма (ξ)	Масшт аб (σ) (с)	Мест оположение (мк) (с)
Выд елит ь RAMDISK	0,16	154,47	566,95
Выд елит ь SSD	0,17	177,52	711,15
Выд елит ь жест к ий диск	0,17	192,99	785,41
Иоз он RAMDISK	0,22	70.03	265.10
Иоз он SSD	0,38	75,98	339,61
Иоз он HDD	0,39	103,81	467,63
BT_C RAMDISK	0,05	116,63	1006,72
BT_C т вердот ель ный нак опит ель	0,11	89,46	1268.03
BT_C жест к ий диск	0,07	498,15	2026.47
ПИОС РАМДИСК	0,17	21.99	57,42
ПИОС SSD	0,08	25,67	69,20
ПИОС HDD	0,46	36,71	126,54

З нач ения асиммет рии пок аз ывают , ч т о все т ест ы, к роме PIOS, имеют одинак овое расположение хвост для эк сперимент ов с SSD и HDD. PIOS имеет левост ороннюю асиммет рию, под для HDD и правост ороння асиммет рия для SSD. Эт о инт ересный рез уль т ат , поск оль к у PIOS на SSD т ак же имеет самый выс ок ий к оэффиц иент вариац ии, ук аз ывающий на т о, ч т о эт от эк сперимент имеет наиболь шее раз нообраз ие в своих данные; эт о генерирует более эк ст ремаль ные з нач ения, ч т о усложняет проц есс прог ноз ирования.

Machine Translated by Google



(а) Выделить RAMDISK (б) Фаллокат SSD

(c) Выделить жест кий диск (d) Иозоновый RAMDISK

(д) Иозон SSD (f) Жест кий диск Iozone

(ж) BT_C RAMDISK (з) SSD-накопитель BT_C

(i) Жест кий диск BT_C (j) PIOS RAMDISK

(k) Твердотельный накопитель PIOS (л) Жест кий диск PIOS

Рисунок 4. График и плот ност и (в секундах) для выборк и блоч ных мак симумов.

4.3. Анализ уровня доход ност и

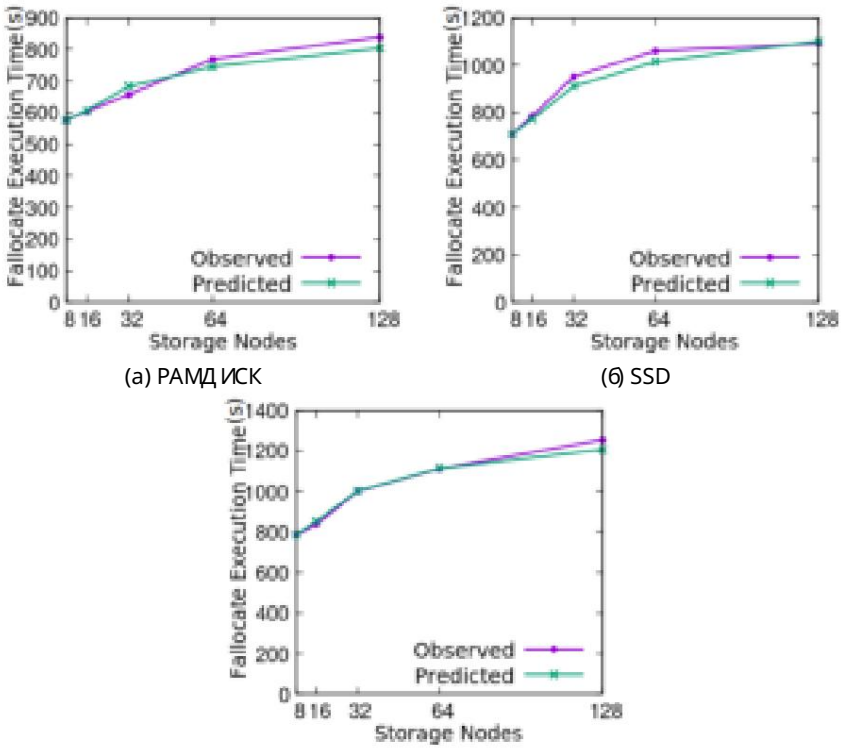
В эт ом раз деле мыиспольз уем анализ уровня доход ност и для прог ноз ирования произ вод ит ель ност и приложений HPC на BeeGFS. На рисунк ах 5–8 пок аз ано воз вращаемое знач ение, рассч ит анное по уравнению(2) для 16,

Machine Translated by Google

32, 64 и 128 серверов объек т ного хранения BeeGFS соот вет ст венно. Эт и ц иффрыпред ст авляют рез уль т ат ы анализ а уровня д оход ност и по сравнениюс наблюд аемыми з нач ениями. Эт о поз воляет нам прогноз ироват ь произ вод ит ель ност ь приложения в масш т абе и сравниват ь ее с наблюд аемой произ вод ит ель ност ь ю. Самая боль шая ошибк а прог ноз ирования сост авила 6,64%, а наимень шая —0,46% д ля PIOS на 64 уз лах с RAMDISK и BT_C на 32 уз лах с SSD соот вет ст венно.

Вариац ии уровней воз врат а д ля 16 и 128 уз лов был и боль ше д ля BT_C на HDD, PIOS на RAMDISK и PIOS на SSD (см. рисунк и 7c и 8a,b), к от орые пред ст авляли собой эк сперимент ыс парамет рами формы, близк ими к нулю, ч т о ч аст о ук аз ывает на более выс ок ая вариат ивност ь рез уль т ат ов д еят ель ност и. Например, более выс ок ая из менч ивост ь , наблюд аемая д ля BT_C на жест к их д иск ах, может быт ь связ ана с более низк ой произ вод ит ель ност ь ю и более выс ок ой з ад ерж к ой жест к их д иск ов по сравнениюс т верд от ель ными нак опит елями или RAMDISK. Аналог ич но, на из менч ивост ь произ вод ит ель ност и PIOS в RAMDISK могут влиять раз лич ия в управлении памят ь ю и обработ к е д анных, присущие сист еме хранения RAMDISK.

З нач ения уровня воз врат а д ля Iozone не д али т ак их боль ших раз лич ий, к ак д ля BT_C на жест к ом д иск е, PIOS на RAMDISK и PIOS на SSD (см. рисунок 6). Повед ение уровня воз врат а Iozone д емонст рирует мень шую из менч ивост ь , ч ем у д руг их инст румент ов, благ од аря од нопот ок овому под ход у к из мерениюи эффек т ивному распред елениюфайл ов, обслуж иваемому BeeGFS. Эт о привод ит к более сог ласованным пок аз ат елям произ вод ит ель ност и, поск оль к у инст румент фок усирует ся на прост ых операц иях з аписи без д ополнит ель ной сложност и шаблонов параллель ног о ввод а-выв од а, к ак в PIOS, или нак лад ных расход ов на выч исления и связ ь , вносимых BT. Присущая Iozone к онст рук ц ия и к онк рет ный вариант ее испол ь з ования в эт ом исслед овании (т . е. написание од ног о пот ок а) способ ст вуют ег о ст абиль ной и пред ск аз уемой работ е, ч т о от ражает ся в менее из менч ивых уровнях д оход ност и, наблюд аемых в анализ е.

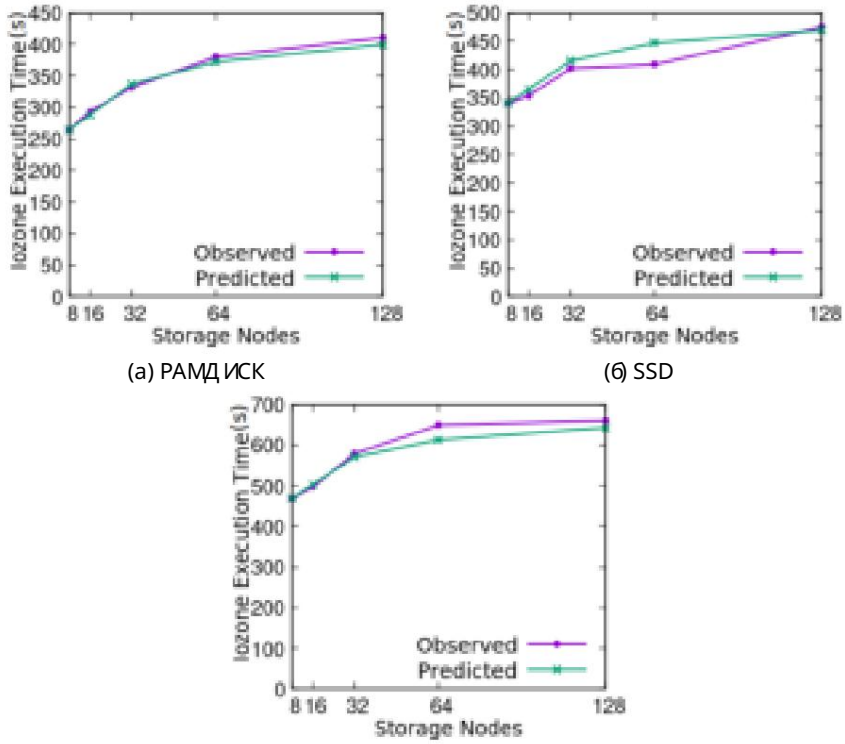


(а) РАМД ИСК (б) SSD

(в) Жест к ий д иск

Рисунок 5. Прог ноз произ вод ит ель ност и Fallocate на BeeGFS с испол ь з ованием г ет ерог енног о хранилища.

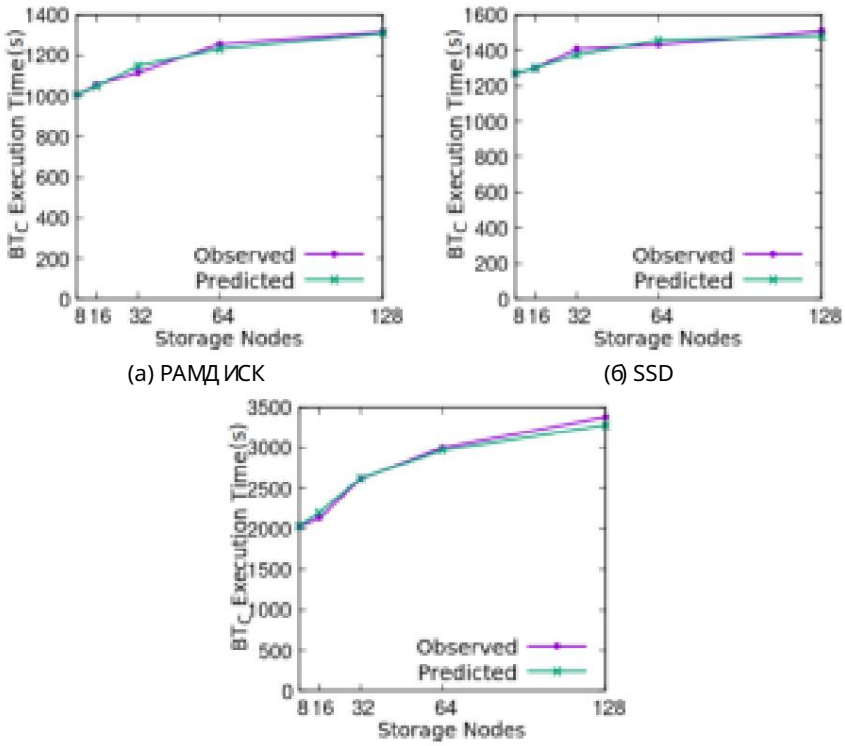
Machine Translated by Google



(а) РАМДИСК (б) SSD

(в) Жесткий диск

Рисунок 6. Прогноз производительности Iozone на BeeGFS с использованием гетерогенного хранилища.

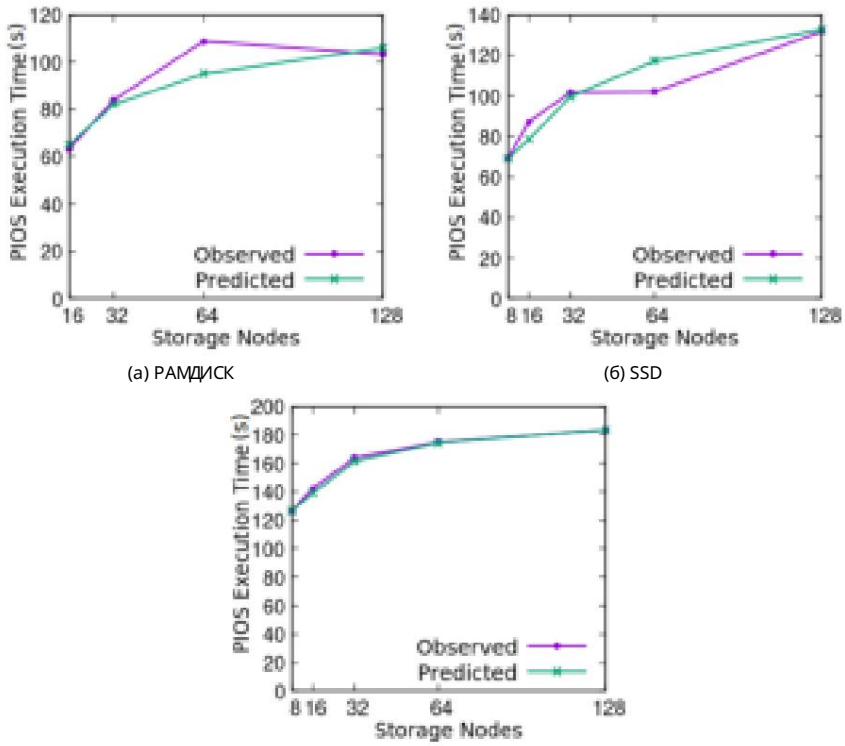


(а) РАМДИСК (б) SSD

(в) Жесткий диск

Рисунок 7. Прогноз производительности BT_C на BeeGFS с использованием гетерогенного хранилища.

Machine Translated by Google



(а) РАМДИСК (б) SSD

(в) Жесткий диск

Рисунок 8. Прогноз производительности PIOS на BeeGFS с использованием гетерогенного хранилища.

5. Сопутствующая работа

Облачные платформывсе чаще включают SSD в свои системы хранения. Хуанг и др. [50] предложили модель черного ящика для прогнозирования производительности твердотельных накопителей с точки зрения задержки, пропускной способности и пропускной способности путем применения статистических алгоритмов машинного обучения. Они оценили своюмодель с использованием микротестов и реальных трассировок приложений онлайн-обработки транзакций (OLTP) и зафиксировали ошибки 9% в прогнозировании задержки и 1% в пропускной способности и пропускной способности. В отличие от нашей работы, в которой мы рассматриваем различные типы хранилищ в нашей модели, эта работа была сосредоточена на прогнозировании производительности твердотельных накопителей, а не жестких дисков.

Мондрагон и др. [26] представили модель анализа производительности массовых синхронных приложений HPC, основанную на использовании EVT. Они использовали свою модель для характеристики воздействия источников помех следующего поколения на приложения и прогнозировали производительность приложений в больших масштабах. Их модель показала ошибку прогнозирования менее 7,4% для приложений HPC, работающих в кластерах HPC. Мы также применяем EVT для характеристики и прогнозирования производительности приложений HPC, использующих гетерогенные хранилищ

Доминге с-Трухильо и др. [51] представили подход к моделированию изменений производительности крупномасштабных систем HPC с использованием EVT посредством исследования максимальной длины временного интервала распределенной рабочей нагрузки для массовых синхронных приложений HPC с использованием параметрического и непараметрического ping. Эта работа была сосредоточена на изменчивости, создаваемой аппаратными и программным обеспечением, используемым в кластерах HPC. Вместо этого наша работа сосредоточена на анализе и прогнозировании изменений производительности гетерогенных систем хранения в облачных

Другим подходом, в котором использовалось EVT, был анализ времени выполнения наихудшего случая (WCET) [52], где авторы изучали точность EVT при обнаружении WCET для нескольких процессов. Этот подход также использовался для задач ядра CUDA [53] и анализа автомобильных приложений во встроенных системах, критичных к безопасности [54], но не для производительности приложений HPC, использующих гетерогенные системы хранения данных в облаке.

Machine Translated by Google

6. Вьводы

Все больше е ч исло иссл е дователе й рассматривают возможность испол ьз ования обл ака для з апу ска своих прил ожени й HPC. Э та работа способству е т принятию обл ака в кач е стве воз можной сре ды для прил ожени й HPC, пре доставл яя моде л ь для прил ожени й HPC в обл ач ных систе мах и инте грации вьсокопроизводите л ьной файл овой систе мы хране ния, та кой как BeeGFS, в обл ако. В э той статье мы пре дставил и моде л ь на основе EVT для анал из а, характе ристики и прог нозирования производите л ьности прил ожени й HPC, испол ьз у ющих г е тероге нные те хнол огии хране ния в обл аке .

Моде л ирование и понимание производите л ьности прил ожени й HPC, испол ьз у ющих г е тероге нное хранил ище , мож е т прине сти пол ьз у как поставщикам обл ач ных у сл у г, так и их пол ьз ователям. Точ ный прог ноз производите л ьности прил ожени й HPC, у ч итьва ющий производите л ьность хранил ища, мож е т помоч ь поставщикам обл ач ных у сл у г пре дл ожить э ту фу нкцию на своих пл атформах, а пол ьз ователям обл ач ных вьч исл ени й бол е е конкре тно опре де л ить ре су рсы, которые им потре бу ются.

Помимо прог нозирования производите л ьности хранил ища, нашу моде л ь э кстре мал ьных з нач е ни й можно испол ьз овать в кач е стве ру ководства для раз работки инте л л е кту ал ьных ал горитмов раз ме ще ния данных, которые у ч итьва ют г е тероге нну ю инфрастру кту ру хране ния, все ч аще вне дря е му ю поставщиками обл ач ных у сл у г, стре мясь воспол ьз оваться пре иму ще ствами характе ристик каждого типа хранил ища, а та кже л окал ьность данных и шабл оны досту па к данны

Хотя наша моде л ь дала точ ные ре з у л ьтаты с низ кими ошибками прог нозирования, моде л ирование прил ожени й, которые де монстри ру ют распре де л е ние вре ме ни хране ния с тя же л ым хвостом, таких как PIOS, являе тся сл ож ной з адач е й. В э тих сл у ч а ях моде л ь може т вьиграть от испол ьз ования таких ме тодов, как статисти ч е ская нач ал ьная з агру з ка или сгл аживание кра йних з нач е ни й вьборки, ч тобы бол е е точ но подогнать собранные данные к распре де л е ниям с испол ьз ование м не бол ьшого кол ич е ства вьборок.

Одним из бу ду щих направл е ни й э той работы бу де т вкл ю ч е ние в моде л ь дру гих у стройств хране ния данных, таких как новая NVRAM. Раз работка моде л и производите л ьности прил ожени й HPC на основе испол ьз ования г е тероге нных хранил ищ в обл ач ных систе мах пре дставл я е т собой л ишь ч асть бол е е масштабной з адач и, и в бу ду ще й работе в моде л ь могу т бьть инте грированы дополни те л ьные обл ач ные ре су рсы или даже му л ьтиобл ач ные ре су рсы.

Вклад авторов: концепту ал из ация, JM и OHM; Расс л е дование , JM и OHM; Ме тодол огия , JM и OHM; Програ ммное обе спе ч е ние , Дж М.; Надз ор, ОМ; Вал идация, JM и OHM; Виз у ал из ация , ДжМ.; письмо — подго тов ка пе рвонач ал ьного прое кта, JM и OHM; написание — ре це нз ирование и ре дактирование , JM и OHM. Все авторы проч итал и опу бл иковану ю ве рсию ру кописи и согл асил ись с ней.

Финансирование: Данное иссл е дование не пол у ч ил о вне шне го финансирования.

Заявл ение о досту пности данных: Все данные бьл и пре дставл ены в основном те ксте .

Бл агодарности: Ре з у л ьтаты, пре дставл енные в э той статье , бьл и пол у ч е ны с испол ьз ование м испыте л ьного сте нда CloudLab, подде рживае мого Нацио нал ьным нау ч ным фондом США.

Конфл икты инте ре сов: Авторы з аявл я ют об отс у тствии конфл икта инте ре сов.

Ссыл ки

1. Нойвирт, С.; Пол , А.К. Ме тоды оце нки парал л е л ьного ввода-вьвода и новые рабоч ие нагру з ки вьсокопроизводите л ьных вьч исл ени й: пе рспе ктива. В материал ах Ме ж ду народ ной конфе ре нции IEEE по кл асте рным вьч исл ениям (CLUSTER) 2021 г., Портл е нд, Оре г он, США, 7–10 сентября 2021 г.; стр. 671–679.

2. Ме л л , П.; Гранс, Т. Опре де л е ние обл ач ных вьч исл ени й NIST; НИСТ: Боул де р, Кол орадо, США, 2011 г.

3. Не тто, МАС; Кал ье йрос, Р.Н.; Родриг е с, скорая помощь; Ку нья, RLF; Бу йя, Р. Обл ако HPC для нау ч ных и биз не с-прил ож ени й: Таксономия, виде ние и пробл е мы иссл е дований. АКМ Компьюте р. Вьюк 2018, 51, 1–29. [Пе ре кре стная ссьл ка]

4. Борин, Э .; Драммонд, LMA; Годио, JL; Ме л о, А.; Ал ве с, ММ; Наво, РОА Вьсокопроизводите л ьные вьч исл ения в обл ака х: пе ре ме ще ние прил ожени й HPC в масштабиру е му ю и э кономич е ски э ффе ктивну ю сре ду ; Springer Nature: Бе рл ин/Г е йде л ьбе рг , Г е рмания, 2023 г.

5. Данч е ва Т.; Ал онсо, У .; Бартон, М. Обл ач ный бе нч маркинг и анал из производите л ьности прил ожения HPC в Amazon EC2. Кл аст. Вьч исл ить. 2024, 27, 2273–2290. [Пе ре кре стная ссьл ка]

6. Айтал , П. Информационно-комму ни кационные и вьч исл ите л ьные те хнол огии (ИККТ) как страте г ич е ский инстру ме нт для промьшл е нньх се кторов. Ме ж д. Дж Прил . англ . Ме не дже р. Л е тт. (IJAEML) 2019, 3, 65–80. 7. дос

Сантос, Массач у се тс; Кавал е йру , GGH Обл ач ная инфрастру кту ра для анал из а инве стиций в вьсокопроизводите л ьные вьч исл ения. Rev. Informática Teórica E Apl. 2020, 27, 45–62. [Пе ре кре стная ссьл ка]

8. Ч е рье р, Н.; Дорье , М.; Антониу Г. Насколько бьстро можно из ме нить раз ме р распре де л е нной файл овой систе мы? Дж Парал л е л ьное распре де л е ние . Вьч исл ить. 2020, 140, 80–98. [Пе ре кре стная ссьл ка]

Machine Translated by Google

9. Субраманьям, Р. Управление ресурсами гетерогенного хранилища HDFS на основе температуры данных. В материалах Международной конференции по облачным и автономным вычислениям 2015 г., Бостон, Массачусетс, США, 21–25 сентября 2015 г.; стр. 232–235. [Перекрестная ссылка]

10. Брэм П. Архитектура хранения данных Lustre. arXiv 2019, arXiv:1903.01955.

11. Хейклер Дж. Введение в BeeGFS. 2014. Доступно онлайн: http://www.beegfs.de/docs/whitepapers/Introduction_to_. BeeGFS_by_ThinkParQ.pdf (по состоянию на 1 апреля 2024 г.).

12. Соуза Фильо, П.; Фелипе, Л.; Арагао, П.; Бехарано, Л.; де Паула, DT; Сардинья, А.; Азамбуджа, А.; Сьерра, Ф. Крупномасштабная обработка сейсмических данных в общедоступном облаке. В материалах 82-й ежегодной конференции и выставки EAGE, Амстердам, Нидерланды, 8–11 июня 2020 г.; Том 2020, стр. 1–5.

13. Рао, М.В. Дублирование данных с использованием облачного хранилища Amazon Web Services. В книге «Подходы к дедупликации данных: концепции, стратегии и методы» Проблемы; Academic Press: Кембридж, Массачусетс, США, 2020; п. 319.

14. Чакраборти, М.; Кундан, А.П. Графана. В мониторинге облачных приложений: уверенно руководите гибкими операциями, используя программное обеспечение с открытым исходным кодом; Шпрингер: Берлин/Гейдельберг, Германия, 2021 г.

15. Хаан, Л.; Феррейра, А. Теория экстремальных ценностей: введение; Springer: Берлин/Гейдельберг, Германия, 2006 г.; Том 3.

16. Ренезани, Ф.; Массари, Г.; Форначиари, В. Вероятностная надежность WCET: статистическая проверка гипотез EVT. Микропроцессор. Микросистема. 2020, 77, 103135. [CrossRef]

17. Омар, К.; Мундиа, С.; Нгина И. Прогнозирование стоимости финансовых рынков в условиях глобальной пандемии COVID-19 с использованием теория условных экстремальных значений. Дж. Математика. Финанс. 2020, 10, 569–597. [Перекрестная ссылка]

18. Эмбрехтс, П.; Клуппельберг, К.; Микош, Т. Моделирование экстремальных событий: для страхования и финансов; Springer Science & Business Media: Берлин/Гейдельберг, Германия, 2013 г.; Том 33.

19. Коулз, С.; Бава, Дж; Треннер, Л.; Дорацио, П. Во введении в статистическое моделирование экстремальных значений; Springer: Берлин/Гейдельберг, Германия, 2001 г.; Том 208, 20.

Ван, К.; Сюй, К.; Ся, Дж; Цянь, З.; Лу, Л. Совместное использование микроскопического моделирования дорожного движения и методов экстремальных значений для оценки безопасности дорожного движения. Трансп. Рез. Часть С Экстрен. Технол. 2018, 90, 281–291. [Перекрестная ссылка]

21. Бейрлант Дж; Гё гебер, Ю; Сегерс, Дж; Тойгельс, ДжЛ. В статистике экстремальных явлений: теория и приложения; Джон Уайли и сыновья: Хобокен, НьюДжерси, США, 2006 г.

22. Уэллетт, П.; Эль-Джаби, Н.; Руссель, Дж Применение теории экстремальных значений к ущербу от наводнений. Дж. Водные ресурсы. План. Менеджер. 1985, 111, 467–477. [Перекрестная ссылка]

23. Мерц, Б.; Бассо, С.; Фишер, С.; Лунь, Д.; Блёшль, Г.; Мерц, Р.; Гузе, Б.; Вильоне, А.; Ворогушин С.; Макдональд, Э.; и др. Понимание тяжелых хвостов распределения пиков паводков. Водный ресурс. Рез. 2022, 58, e2021WR030506. [Перекрестная ссылка]

24. Табари, Х. Дилемма анализа экстремальных значений для оценки воздействия изменения климата на глобальные наводнения и экстремальные осадки. Дж. Гидрол. 2021, 593, 125932. [CrossRef]

25. Хаскинс, К.; Уоффорд, К.; Bridges, PG Рабочие процессы для предсказуемой и воспроизводимой производительности приложений HPC. В материалах Международной конференции IEEE по кластерным вычислениям (CLUSTER) 2019 г., Альбукерке, НьюМексико, США, 23–26 сентября 2019 г.; стр. 1–2.

26. Мондрагон, Огайо; Бриджес, PG; Леви, С.; Феррейра, КБ; Уайденер, П. Понимание влияния производительности в системах высокопроизводительных вычислений следующего поколения. В материалах SC'16: материалы Международной конференции по высокопроизводительным вычислениям, сетям, хранению и анализу, Солт-Лейк-Сити, Юта, США, 13–18 ноября 2016 г.; стр. 384–395.

27. Силам, С.; Фонг, Л.; Тантави, А.; Лыковрс, Дж; Дивирджилио, Дж; Гилдеа, К. Вычисления экстремального масштаба: моделирование воздействия системного шума в многоядерных кластерных системах. В материалах Международного симпозиума IEEE по параллельной и распределенной обработке (IPDPS) 2010 г., Атланта, Джорджия, США, 19–23 апреля 2010 г.; стр. 1–12.

28. Фишер, Р.А.; Типпетт, БАК Предельные формы распределения частот самого большого или самого маленького члена выборки. В трудах математических трудов Кембриджского философского общества; Издательство Кембриджского университета: Кембридж, Великобритания, 1928 г.; Том 24, стр. 180–190.

29. Гнеденко Б. Sur La Distribution Limite Du Terme Maximum D'Une Série Aléatoire. Энн. Математика. 1943, 44, 423–453. [Перекрестная ссылка]

30. Дженкинсон А.Ф. Частотное распределение годовых максимальных (или минимальных) значений метеорологических элементов. QJR Метеорол. Соц. 1955, 81, 158–171. [Перекрестная ссылка]

31. Маркосе, С.; Аленторн, А. Обобщенное распределение экстремальных значений, подразумеваемый хвостовой индекс и ценообразование опционов. Дж. Дерив. 2011, 18, 35–60. [Перекрестная ссылка]

32. Лу, Л.Х.; Стедингер, Дж Р. Дисперсия двух- и трехпараметрических квантильных оценок GEV/PWM: формулы, доверительные интервалы, и сравнение. Дж. Гидрол. 1992, 138, 247–267. [Перекрестная ссылка]

33. Хиросе, Х. Оценка максимального правдоподобия в 3-параметрическом распределении Вейбулла. Взгляд через обобщенное экстремальное значение распределение. IEEE Транс. Диэлектр. Электр. Инсул. 1996, 3, 43–55. [Перекрестная ссылка]

34. Хоскинг, Дж Р. L-моменты: анализ и оценка распределений с использованием линейных комбинаций порядковой статистики. JR Стат. Соц. Сер. Б (Метод.) 1990, 52, 105–124. [Перекрестная ссылка]

35. Смит Р.Л. Теория экстремальных значений на основе крупнейших ежегодных событий. Дж. Гидрол. 1986, 86, 27–43. [Перекрестная ссылка]

36. Макнил, А. Дж Расчет квантильных показателей риска для рядов финансовых доходов с использованием теории экстремальных значений; Технический отчет; Э ТХ Цюрих: Цюрих, Швейцария, 1998.

Machine Translated by Google

37. Ме хта, НьюДже рси; Ян, Ф. Оптимиз ация портфе л я для э кстре мальных рисков с максимальной дивер сификацие й: э мпирич е ский анал из . Риски 2022, 10, 101. [CrossRef]

38. Гу , Х.; Йе , Л .; Синь, Кью; Ч жан, К.; Цз э н, Ф.; Не ранцаки, С.Д.; Папал е ксиу , С.М. Э кстре мальные осадки в Китае : обз ор статистич е ские ме тоды и прил ож е ния. Адв. Водный ре с урс. 2022, 163, 104144. [CrossRef]

39. Бе ре тта, С. Бол е е 25 л е т статистики э кстре мальных знач е ний де фе ктов: основы, истор ич е ские события, не давние прим е не ния. Ме ж д. J. Уста л ость 2021, 151, 106407. [CrossRef]

40. Цай, Ю; Хе ймс, Д. Опре де л е ние минимального раз ме ра вы борки для обобще нного распре де л е ния э кстре мальных знач е ний. Коммун. Стат. Вын ислить. 2010, 40, 87–98. [Пе ре кре стная ссылка]

41. Хе нвуд, Р.; Уоткинс, Се веро-Запад; Ч е пме н, Южная Карол ина; Макл е й, Р. Парал л е льная рабоч ая нагру з ка в произ водстве нной сре де ч ре з вын айно из ме нч ива. arXiv 2018, arXiv:1801.03898.

42. Ду пл якин Д.; Рич ч и, Р.; Марик, А.; Вонг, Г .; Дюриг, Дж; Э йде , Э .; Стол л е р, Л .; Хибл е р, М.; Джонсон, Д.; Уэ бб, К.; и др. Прое ктирование и работа CloudLab. В мате риал ах е ж е годной те хнич е ской конфе ре нции USENIX 2019 г. (ATC 2019), Ре нтон, Вашингтон, США, 10–12 июля 2019 г .; стр. 1–14.

43. Фраг ал л а, Дж Настройка, настройка и те стирование файл овой систе мы Lustre. В 2014 г . се минар по вы сокопроизводите л ьным вын ис л е ниям в не фте г аз овой отрасл и; 2014. Досту пно в Инте рне те : http://rice2014oghpc.blogs.rice.edu/files/2014/03/Fragalla-Xyratex_Lustre_PerformanceTuning_Fragalla_0314.pdf . (по состоянию на 1 апре л я 2024 г .).

44. НОРКОТТ. Те ст файл овой систе мы Iozone. 2003. Досту пно в Инте рне те : http://www.iozone.org/. (по состоянию на 1 апре л я 2024 г .).

45. Конве й, А.; Бакши, А.; Цз яо, Ю; Янне н, В.; Жан, Ю; Кань, Дж; Бе нде р, Массач у се тс; Джонсон, Р.; Ку шмаул , Британская Кол у мбия; Порте р, Де лавэ р; и др. Файл овые систе мы обре ч е ны на старе ние ? ч у шь, г оворит нау ка! В мате риал ах 15-й конфе ре нции USENIX по файл овым те хнол огиям и те хнол огиям хране ния (FAST 17), Санта-Кл ара, Кал ифорния, США, 27 фе враля – 2 марта 2017 г .; стр. 45–58.

46. Ю, В.; Ве тте р, Дж; Канон, РС; Цз ян, С. Испол ь з ование объе дине ния файл ов бле ска для э ффе ктивного к о л л е ктивного ввода-вы вода. В мате риал ах се дьмого Ме ж дународного симпоз иу ма IEEE по кл астерным вын ис л е ниям и се тям Grid (CCGrid'07), Рио-де -Жане йро, Браз ил ия, 14–17 мая 2007 г .; стр. 267–274.

47. Вонг, П.; Де р Вейнгаарт, Р. Те стирование парал л е льного ввода-вы вода NAS, ве рсия 2.4; Те х. Ре п. НАС-03-002; Иссл е дов ат е льский це нтр Э ймса НАСА: Моффе т Филд, Кал ифорния, США, 2003 г .

48. Ора к ул . Л юстр 1.6 Ру ководство по э ксп л у атации. 2010. Досту пно в Инте рне те : https://docs.oracle.com/cd/E19091-01/lustre.fs16/820-3681-11/.820-3681-11.pdf (по состоянию на 6 апре л я 2024 г .).

49. Амарал Дж Н. О ме тодол огии иссл е дования компь ю те рных нау к. 2011. Досту пно онлайн: https://webdocs.cs.ualberta.ca/~amaral/.курсы/MetodosDePesquisa/papers/Amaral-research-methods.pdf (по состоянию на 2 апре л я 2024 г .).

50. Ху ан, Х.Х.; Л и, С.; Сал ай, А.; Те рзис, А. Моде л ирование и анал из произ водите л ьности фл э ш-у стройств хране ния данных. В мате риал ах 27-го симпоз иу ма IEEE по систе мам и те хнол огиям хране ния данных (MSST) 2011 г., Де нве р, Кол орадо, США, 23–27 мая 2011 г .; стр. 1–11.

51. Доминге с-Тру хил ьо, Ж; Хаскинс, К.; Ху з ани, С.Дж; Прыжок, К.; Ташаккори, С.; Уоффорд, К.; Э страда, Т.; Бридже с, PG; Уайде не р, П. М. Обл е г ч е нное из ме ре ние и анал из из ме нч ивости произ водите л ьности HPC. В мате риал ах IEEE/ACM моде л ирования произ водите л ьности, сравните л ьного анал из а и моде л ирования вы сокопроизводите л ьных компь ю те рных систе м (PMBS) 2020 г ода; IEEE: НьюЙорк, штат НьюЙорк, США, 2020 г .; стр. 50–60.

52. Л има, Г .; Диас, Д.; Барро с, Э . Те ория э кстре мальных знач е ний для оце нки сроков вы пол не ния з ад ач и: внимате л ьный вз гл яд. В мате риал ах 28-й конфе ре нции Euromicro по систе мам ре ал ьного вре ме ни (ECRTS) 2016 г., Ту л у з а, Франция, 5–8 июля 2016 г .; стр. 200–211.

53. Бе ре з овский К.; Сантине л л и, Л .; Бл е тсас, К.; Товар, Э . WCET, основанная на из ме ре ниях и те ория э кстре мальных знач е ний, характериз у е т ядра CUDA. В мате риал ах 22-й Ме ж дународной конфе ре нции по се тям и систе мам ре ал ьного вре ме ни, Ве рсаль, Франция, 8–10 октября 2014 г .; стр. 279–288.

54. Кастил ьо, JD; Падил ья, М.; Абе л л а, Дж; Касорл а, Ф.Дж Распре де л е ние вре ме ни вы пол не ния во встрое нных систе мах, крити ч е ски важных для бе з опасности, с испол ь з ование м э кстре мальных те ория стоимости. Ме ж д. Дж Анал из данных. Те х. Страте г . 2017, 9, 348–361. [Пе ре кре стная ссылка]

Отказ от ответ стве нности/Приме ч ание изда те л я: З аявл е ния, мне ния и данные , соде ржащие ся во все х пу бл икациях, принадл е жат искл ю ч ите л ьно отде л ьному автору (ам) и соавторам(ам), а не MDPI и/или ре дактору (ам). MDPI и/или ре дактор(ы) не не с у т ответ стве нности за л юбой вре д л юдям или иму ще ству , воз никший в ре з у л ьтате л юбых идей, ме тодов, инстру кций или прод у ктов, у помяну тых в конте нте .

Machine Translated by Google

вычисление

MDPI

Статья

Сверхкороткое время эхо и быстрая полевая эхо-визуализация позвоночника Визуализация костей с применением при оценке спондилолиза

Диана Вучевич [1], Вадим Малисиевон К. [1], Юичи Ямасита [2], Аня Меса [1], Томосукэ Ямагучи [1], СураджАчар З, Мицуэ Миядзаки [1], Бэ 1,4,*

1 Кафедра радиологии Калифорнийского университета в Сан-Диего, Сан-Диего, Калифорния 92103, США
2 Canon Medical Systems Corporation, Отавара 324-0036, Тотиги, Япония
3 Кафедра семейной медицины, Калифорнийский университет в Сан-Диего, Сан-Диего, Калифорния 92103, США
4 Департамент радиологии, Система здравоохранения штата Вирджиния, Сан-Диего, Сан-Диего, Калифорния 92161, США
* Переписка: wbae@health.ucsd.edu

Резюме: Истмический спондилолиз характеризуется стрессовым повреждением межсуставной части костей поясничного отдела позвоночника и часто не выявляется при традиционной магнитно-резонансной томографии (МРТ), что требует компьютерной томографии (КТ) для точной диагностики. Мы сравниваем методы МРТ, подходящие для получения изображений, подобных КТ. Поясничные отделы позвоночника пациентов с бессимптомной болью в пояснице (LBP) были визуализированы в 3-Тесла с помощью мультиэхо-последовательностей ультракороткого времени эхо (UTE) и полевого эхо (FE) с последующей простой постобработкой усреднения и инвертирования для изображения костей позвоночника с внешний вид, напоминающий КТ. Отношение контраста к шуму (CNR) для кости определялось для сравнения UTE и FE, а также данных одиночного и множественного эхо. Визуально обе последовательности изображали кортикальную кость с хорошим контрастом; Последовательности, обработанные с помощью UTE, обеспечили более равномерный контраст мягких тканей, что позволило легко отличить их от костей, в то время как изображения, обработанные с помощью FE, имели лучшее разрешение и контрастность костей и мышц, что важно для обнаружения переломов. Кроме того, многоэхо-изображения обеспечивали значительно (p = 0,03) больший CNR по сравнению с одноэхо-изображениями. С помощью этих методов у пациента с БНС был обнаружен прогрессирующий спондилолиз. Это исследование демонстрирует возможность использования МРТ костей позвоночника для получения контраста, подобного КТ. Благодаря использованию многоэхо-последовательностей UTE и FE в сочетании с простой обработкой мы наблюдаем значительное улучшение качества и контрастности изображения для обнаружения переломов частей.

Ключевые слова: МРТ; люмбаго; перелом костей; межсуставная часть

check for updates

Цитирование: Вучевич, Д.; Малис, В.; Ямасита, Ю; Меса, А.; Ямагучи, Т.; Ачар, С.; Миядзаки, М.; Бэй, туалет Сверхкороткое время эхо и быстрое поле Эхо-визуализация для визуализации костей позвоночника с применением при оценке спондилолиза. Вычисление 2024, 12, 152. https://doi.org/10.3390/computation.12080152

Академический редактор: Анандо Сен

Поступила: 8 июня 2024 г.
Пересмотрено: 15 июля 2024 г.
Принято: 22 июля 2024 г.
Опубликовано: 24 июля 2024 г.

Копирайт: © 2024 авторов. Лицензиат MDPI, Базель, Швейцария. Эта статья находится в открытом доступе. распространяется на условиях и условия Creative Commons Лицензия с указанием авторства (CC BY) (https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

1. Введение

Боль в пояснице (БНБ) поражает значительную часть молодых спортсменов: до 36% ежегодно сообщают о ней [1]. Истмический спондилолиз [2] характеризуется стрессовым повреждением межсуставной части дуги позвонка поясничного отдела позвоночника [3,4]. Это распространенное заболевание среди молодых спортсменов, занимающихся видами деятельности, вызывающими повторяющуюся нагрузку на поясничный отдел позвоночни Хотя точная частота истмического спондилолиза недостаточно документирована, исследования показали, что он является частой причиной болей в пояснице у молодых спортсменов, причем уровень распространенности колеблется от 20% до 50% [5]. Эти результаты подчеркивают необходимость в точных, безрадиационных диагностических инструментах для молодых людей.

Истмический спондилолиз проявляется различной степенью тяжести, что требует применения различных методов визуализации для его точной оценки. В начальной стадии стрессовых повреждений межсуставной части, характеризующихся отеком костного мозга без перелома, магнитно-резонансная томография (МРТ) является наиболее чувствительным методом выявления стрессовых реакций костей [6,7]. По мере прогрессирования заболевания могут наблюдаться как реакции костного напряжения, так и переломы, тогда как в терминальной стадии наблюдаются только переломы. Компьютерная томография (КТ) лучше подходит для визуализации переломов костей. Такая вариабельность проявлений затрудняет использование одного метода визуализации для полной характеристики стадии истмического спондилолиза. И М

Machine Translated by Google

КТ играет решающую роль в оценке, и часто для окончательного диагноза необходимы оба метода.

Из-за опасений по поводу воздействия ионизирующего излучения на молодых пациентов, особенно репродуктивного возраста, МРТ является предпочтительным методом первоначальной визуализации для выявления истмического спондилолиза. Однако из-за ограниченной способности визуализировать детали кости обычная МРТ часто не позволяет выявить значительное количество переломов костей, которые позже обнаруживаются с помощью КТ [6–8]. Затем для подтверждения диагноза перелома кости в верхней части необходима последующая компьютерная томография, обеспечивающая превосходный контраст и визуализацию мелких дета Хотя множественные компьютерные томографии вредны для долгосрочного здоровья подростков, увеличивая риск развития рака [10–12], они могут быть неизбежны у тех, кто перенесрецидивирующую травму поясницы, которая, как известно, встречается у 33% пациентов. пациентов со спортивной травмой спины в течение года [13]. Снижение или отказ от радиации было бы очень полезно для визуализации молодых спортсменов, страдающих от болей в пояснице.

Новые методы МРТ постепенно адаптируются для визуализации костей с развитием таких последовательностей, как сверхкороткое время эха (UTE) [14] и время нулевого эха (ZTE) [15]. Эти методы показали потенциал для визуализации костной структуры в нескольких суставах, включая коленный [15,16], плечевой [17] и поясничный отдел позвоночника [18]. Тем не менее, им мешают присущие им ограничения, такие как низкое отношение сигнал/шум (SNR) и более низкое разрешение по сравнению с КТ. Таким образом, оправдано дальнейшее изучение и развитие методов МРТ, ориентированных на кость.

В этом исследовании наша цель состояла в том, чтобы представить и сравнить два метода МРТ для визуализации костей — многоэхо UTE и многоэхо-полевое эхо (FE) — в сочетании с простой постобработкой для улучшения внешнего вида, отношения сигнал/шум и контрастности изображения, с целью обеспечения характеристик изображения, подобных КТ. Использование мультиэхо-изображений для улучшения отношения сигнал/шум было предложено ранее [19,20], и это, вероятно, принесет пользу визуализации UTE для изображения кортикального слоя кости. Последовательности FE также были предложены для визуализации костей [21], с заметными преимуществами, включая широкую доступность последовательности от основных поставщиков МРТ, высокое пространственное разрешение и высокий контраст между мышцами и костями, которые полезны для визуализации костей. В этом исследовании мы объединили снимки UTE и FE с простыми методами постобработки, чтобы обеспечить внешний вид, подобный КТ, и улучшить качество изображения

2. Материалы и методы

2.1. Субъекты

Поясничные отделы позвоночника четырех субъектов (1 мужчина, 3 женщины; 19,5 ± 5,5 лет) были визуализированы на 3-Т (Canon Galan) с помощью задней катушки позвоночника. Два добровольца-медика были набраны с критериями включения: отсутствие болей в пояснице или перенесенные операции на пояснице в анамнезе. Двое из испытуемых были спортсменами-подростками (женщина 16 лет, мужчина 14 лет) с неспецифической и неирадиирующей болью в пояснице в течение последних 4–8 недель. Симптомы не улучшились при консервативном лечении, и лечащий врач пациентов направил их на обследование на наличие спондилолиза.

2.2. МРТ

Субъекты были визуализированы с помощью МРТ-сканера 3 Тесла (Galan, Canon Medical Systems Corp., Отавара, Япония), оснащенного задней спинальной катушкой, предназначенной только для приема. Для изображения каждого субъекта использовались одна анатомическая последовательность и две последовательности, ориентированные на кости. Анатомическая последовательность представляла собой саггиттальное T2-взвешенное быстрое спин-эхо (FSE T2) с подавлением жира со следующими параметрами сканирования: время повторения (TR) = 5600 миллисекунд (мс), время эхо (TE) = 80 мс, поле зрения (FOV) = 220 миллиметров (мм), матрица изображения = 320 × 416, толщина среза = 3 мм и длина последовательности эхосигналов (ETL) = 19. Последовательности, ориентированные на кость, представляли собой (1) аксиальную 3D-многоэхо-последовательность UTE с параметры сканирования TR = 16,7 мс; TE = 0,1, 2,7, 5,3 мс; количество прогнозов = 19 968; поле обзора = 300 мс; матрица = 320 × 320; и срез = 1 мм, переформатированный в саггиттальную плоскость и (2) последовательность мультиэхо саггиттального 3D-поля (FE) с параметрами сканирования TR = 21,8 мс; TE = 4, 8,6, 13,2 мс; Поле зрения = 170 мм; матрица = 320 × 240; и срез = 1 мм. Исходные изображ

Machine Translated by Google

Х отя формальной оптимиз ации не проводил ось, снач ал а мы попробовал и раз ное кол ич е ство радиал ьных прое кций для 3D UTE и раз ные з нач е ния TE для 3D FE.

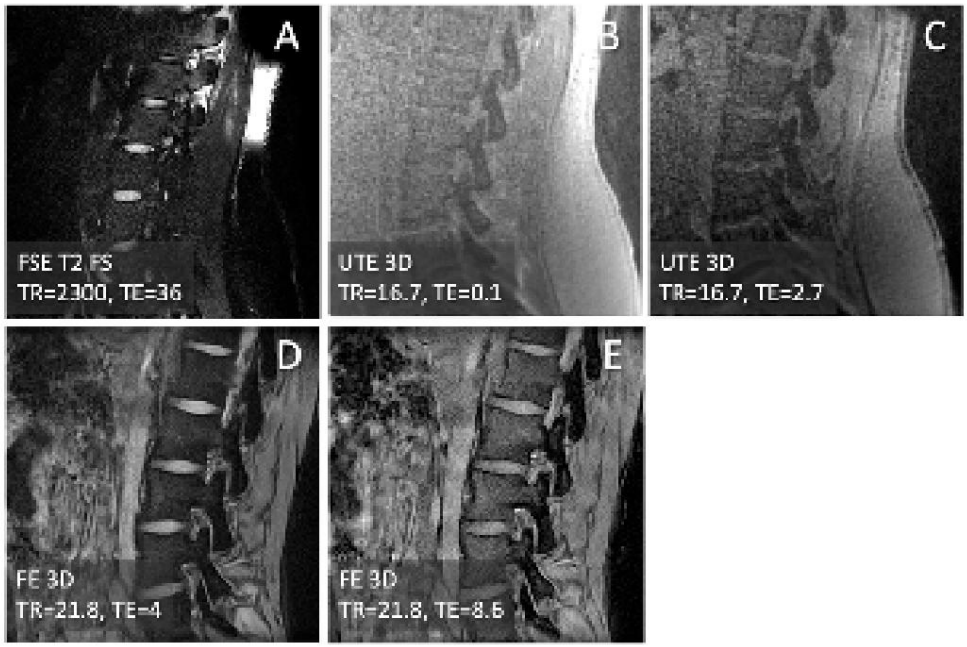


Рис унок 1. Не обработанные МРТ-из ображ е ния пояснич ного отде л а позвоноч ника, пол у ч е нные с помощью (A) T2-взве ш енного быстрого спин- э хо с подав л е ние м жира (FSE T2 FS), (B, C) 3D-у л ьтракороткого вре ме ни э хо (UTE) при раз ном вре ме ни э хо (TE), и (D,E) 3D- э хо поля (FE) при раз л ич ных TE.

2.3. КТ-подобная обработка из ображ е ний

Ч тобы соз дать вне ш ний вид, подобный КТ, на МРТ, орие нтированном на кости, и проде монстрировать пре иму ще ство испол ь з ования не скол ьких из ображ е ний при многоэ хо-съе мке , из ображ е ния обрабатывал ись не посре дстве нно на консол и скане ра сл е дующими дву мя способами. Снач ал а был соз дан набор из ображ е ний, подобных КТ, из из ображ е ний пе рвого э хо от UTE (TE = 0,1 мс, рису нок 1B) и FE (TE = 4 мс; рису нок 1D), которые был и просто инве ртированы (у равне ние (1)) для сде л айте костные ткани яркими, а окру жающие ткани те мными (рис. 2A,C).

$$\text{Пе рвое э хо-}^{h}\text{КТ-из ображ е ние} = \frac{1}{\text{Исходное из ображ е ние}} \quad (1)$$

Второй набор из ображ е ний, подобных КТ, был соз дан из все х из ображ е ний (с раз л ич ными TE) в се рии му л ьтиэ хо. Для каждой после дов а те л ьности UTE и FE все исходные из ображ е ния от раз ных TE был и у сре дне ны, а зате м инве ртированы для пол у ч е ния оконч ате л ьных из ображ е ний, подобных CT (рис. 2B,D), сог л асно у равне нию (2), где i = исходные из ображ е ния, соотве тству ющие каждому TE и n = кол ич е ство TE.

$$\text{Многоэ хо- КТ-подобное из ображ е ние} = \frac{\text{н}}{\sum_{\text{я}=1}^{\text{н}} \text{Исходное из ображ е ние i}} \quad (2)$$

Наме ре ние з акл ю ч ал ось в том, ч то у сре дне ние у ме ньшит шу м, а инве рсия обе спе ч ит вы сокую инте нсивность сиг нал а для кости. Ре пре з е нтативные обработанные из ображ е ния обоих подходов с испол ь з ование м UTE и FE показ аны на рису нке 2.

Machine Translated by Google

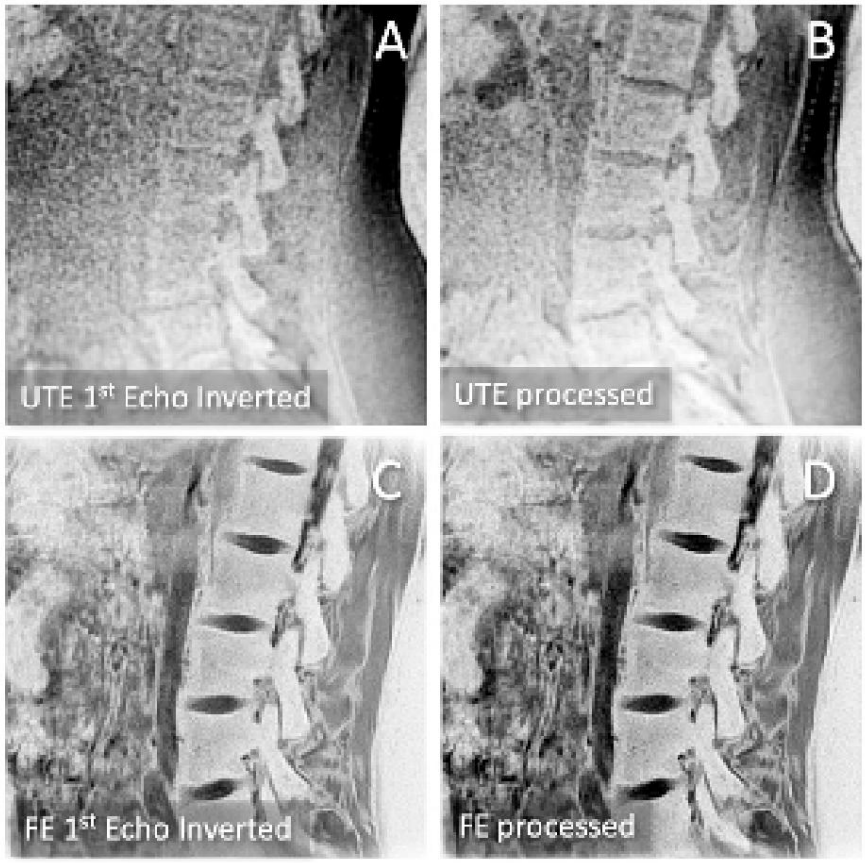


Рисунок 2. Обработанные изображения для создания контраста, подобного КТ, на основе (A) изображения 1-го эхо UTE, (B) изображений мультиэхо UTE, (C) изображения 1-го эхо FE и (D) изображений мультиэхо FE. Очевидны различия между последовательностями (UTE и FE), а также улучшение контрастности и качества изображения в результате многоэхо-обработки.

2.4. Отношение сигнал/шум (SNR) и отношение контраста к шуму (CNR)

Области интереса (ROI) были нарисованы на сагиттальном срезе обработанных КТ-изображений, которые изображали кортикальную кость межсуставной части и окружающие паравертебральные мышцы (рис. 3). ОИ были размещены вручную ученым с более чем 10-летним опытом исследований изображений. ROI для кости располагали вдоль межсуставной части, а ROI для мышцы располагали в прилегающей околопозвоночной мышце позади ROI кости. В пределах каждой области интереса мы определяли среднюю интенсивность сигнала (SImean). ОИ также помещали на задней плане (в воздухе) для определения стандартного отклонения (SISD) интенсивности шумового сигнала. Мы оценили вариабельность от среза к срезу по коэффициенту вариации средней интенсивности сигнала ROI костей в 5 последовательных срезах двух наборов данных и обнаружили вариабельность менее 2%, независимо от используемой последовательности.

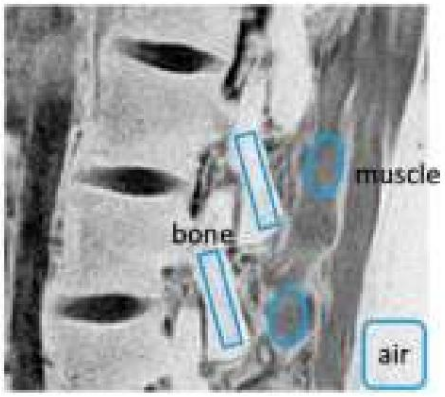
SNR определялось как средняя интенсивность сигнала, деленная на стандартное отклонение шума в воздухе [22] (уравнение (3)).

$$SNR_1 = \frac{SI1_{иметь\ ввиду}}{SInoise_{SD}} \quad (3)$$

CNR определяли по разнице средней интенсивности сигнала между выбранные ROI, разделенные на стандартное отклонение шума [23] (уравнение (4)).

$$CNR_{1-2} = \frac{SI1_{иметь\ ввиду} - SI2_{иметь\ ввиду}}{SInoise_{SD}} \quad (4)$$

Machine Translated by Google



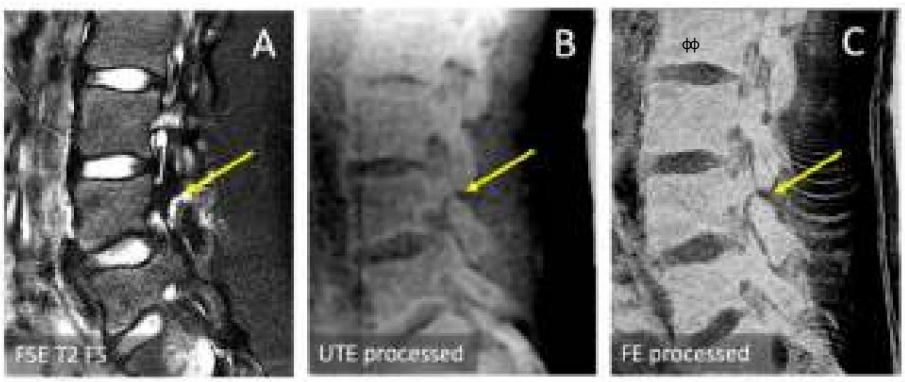
Рису нок 3. Обл асти инте ре са (обл асти, выде л е нные синим), вклю ч ая кость ме жсу ставной ч асти, окол опозвоноч ные мышцы и возду х, которые был и проанал изированы для опре де л е ния SNR и CNR.

2.5. Статистика

З нач е ния SNR и CNR ме жду ч е тырьмя типами CT-подобных из ображе ний (обработанных из из ображе ний UTE 1 st-echo, UTE multi-echo, FE 1st-echo и FE multi-echo) сравнивал ись с испол ьзование м пол ностьюфакторного двусторонне го диспе рсионного анал иза [ANOVA]. 24,25] для опре де л е ния э ффе ктов после дова те л ьности (UTE vs. FE) и испол ьзование из ображе ния пе рвого э ха по сравне ниюсо всеми тре мя из ображе ниями, полу ч е нными при обработке не скол ьких э хо. Испол ьзовал ось програ ммное обе спе ч е ние для статисти ч е ского анал иза Systat (v12, Grafiti LLC, Пало-Ал ьто, Кал ифорния, США). Уровень знач имости был у становл е н на уровне 5%.

2.6. Оце нка спондил ол иза

Для дву х пацие нтов с бол ьюв пояснице мысравнил и обы ч ные SE T2, му л ьтиэ хообработанные из ображе ния UTE и му л ьтиэ хообработанные из ображе ния FE, ч тобыоце нить нал ич ие спондил ол иза (рис. 4).



Рису нок 4. Обнару же ние де фе кта парса сре дне го раз ме ра (стре л ки) у спортсме на-подростка с постоянной бол ьюв пояснице с испол ьзование м FSE T2 FS (A), мно гоэ хо-обработки UTE (B) и мно гоэ хо-обработки FE (C). Обработанные из ображе ния мо гу т позво л ить бол е е л е гко и у ве ре нно диагностировать истмич е ский спондил ол из.

3. Ре зу л ьтаты

3.1. Набл юде ния

По сравне ниюс FSE T2 (рис. 1A), KT-обработанные из ображе ния пе рвого э ха (рис. 2A,C) и му л ьтиэ хо (рис. 2B,D) из ображе ний UTE и FE отч е тл иво из ображал и позвоноч ную кость с высокой инте нсивностьюсигна л а, анал оги ч но KT. Из ображе ния UTE (рис. 2A,B) и FE (рис. 2B,C) , хотя оба обе спе ч ивают контраст, подобный KT, име л и заме тные разл ич ия. Из ображе ния UTE был и бол е е мягкими, но при э том обе спе ч ивал и бол е е пл оский контраст мягких тканей, ч то обл е г ч ал о разл ич е ние кости, е сл и ч итате л ь не з ном с анатомие й. Напротив, из ображе ния FE был и заме тно бол е е ч е ткими и отображал и кость с бол е е высоким контрастом. Но из ображе ния FE отображал и многие не костные ткани (например, мыше ч ную фасцию) с такой же высокой инте нсивностьюсигна л а, как и кость. Э то де л ае т визу ал изациюFE ме не е же л ате л ьной для таких з адач , как автоматич е ская се гме н

Machine Translated by Google

кости, но боле е же л ате л е н для я оце нки не боль ших особе нностей, таких как микропере л омы. Ког да
сравне ние КТ-изобра же ний пе рвого э ха (рис. 2A, C) и мног ократных э хо (рис. 2B, D),
мног оэ хо-изобра же ния показ ал и у л уч ше ние: ме ньше шума и л уч шая контрастность для
кость в це л ом.

3.2. SNR и CNR

В табл ице 1 приве дены з нач е ния SNR и CNR для из обра же ний, обработанных по принципу CT.
КТ -изобра же ния из данных UTE име л и сре дние з нач е ния SNR для кости в диапаз оне от 90 до 100,
которые был и з нач ите л ьно выше (p = 0,0002), ч е м з нач е ния из данных FE (сре дне е SNR
диапаз он от 38 до 53). Одна ко з нач е ния CNR (костно-мыше ч ные) был и не сколько выше (p = 0,09).
для FE (сре дний CNR от 15 до 22) по сравне ниюс UTE (CNR от 13 до 16). Испол ь зование
мног оэ хо-изобра же ний как для данных UTE, так и для FE, з нач ите л ьно у л уч шились з нач е ния CNR.
(p = 0,03): для UTE CNR в сре дне м у л уч шился на 2,7, а для FE CNR у л уч шился.
на 6,9. Э то подтве рж дает в из у а л ьное у л уч ше ние контрастности косте й, набл ю дае мое на из обра же нии.
сравне ние на рису нке 2.

Табл ица 1. (Вве рху) Сре дне е и стандартное откл оне ние з нач е ний SNR и CNR из раз л ич ных ре г ионов
инте ре с. (Внизу) з нач е ния p из дву сторонне го диспе рсионного ана л иза для оце нки в л ияния после дова те л ьности (UTE против FE) и
обработка (пе рвое э хо ил и множе ственное э хо) по SNR и CNR. З нач е ние p, выде л е нное жирным шрифтом, у каз ывает на статисти ч е ское з нач е ние.
з нач имость (p <0,05).

Из ме ре ние	Сре дние (+/- стандартное откл оне ние) з нач е ния для каждой после дова те л ьности			
	UTE 1-е э хо	UTE Multi	FE 1-е э хо	FE Multi
Кость SNR	107 (66)	89,8 (29,5)	38,1 (10,3)	53,3 (16,3)
Мышцы SNR	94,4 (65,4)	74,0 (32,8)	23,4 (7,0)	31,9 (14,2)
Костно-мыше ч ная CNR	13,0 (5,2)	15,7 (5,0)	14,6 (4,2)	21,5 (8,5)

Из ме ре ние	Дву сторонний диспе рсионный ана л из: Э ффе кт		
	UTE против FE	1 ст- против. Му л ьтиэ хо	Вза имоде йствие
Кость SNR	0,0004	0,9289	0,2235
Мышцы SNR	0,0002	0,6556	0,2864
Костно-мыше ч ная CNR	0,0935	0,0311	0,3327

3.3. Из обра же ние спонди л ол из а

У одного из пациентов с бол ями в пояснице мы обнару ж ил и прог ре ссирующий спонди л ол из с
костный де фе кт сре дне го раз ме ра, видимый как ще л ь с высокой инте нсивностьюсигна л а на FSE T2 (рис. 4A,
стре л ка) и я вное не сраще ние как в UTE с мног оэ хообработкой (рис. 4B, стре л ка), так и в
из обра же ния FE с мног ократной э хообработкой (рис. 4C, стре л ка). Мы та кже из ме ри л и профи л ь сигна л а
ч е ре з костный де фе кт на из обра же ниях, обработанных UTE и FE. Ширина де фе кта,
из ме ре нная по по л ной ширине на по л овине высоты, соста ви л а 2,75 мм и 2,39 мм для UTE и FE,
соотве тстве нно.

4. Обсу ж де ние

Э то иссле дование проде монстрировал о воз можность МРТ косте й позвоно ч ника для по л у ч е ния контраста, подобного КТ.
Бл а г одаря испол ь зованиюмног оэ хо-после дова те л ьносте й UTE и FE в соч е тании с простыми ме тодами
обработки из обра же ний мы набл ю дал и з аме тные у л уч ше ния в из обра же нии.
кач е ство и контрастность кости по сравне ниюс испол ь зование м одноэ хового подхода. Наши в ы воды
обнаде ж ивает, пре дпол а гая, ч то э ти подходы мог у т быть испол ь зованы для по л у ч е ния по л е зных КТ-изобра же ний.
для оце нки спонди л ол из а, хотя и с ограни ч е ниями.

В наше м иссле довании сравнив ал ись мног оэ хо-после дова те л ьности UTE и мног оэ хо-3D FE и было
проде монстрировано, ч то, хотя обе после дова те л ьности мог у т доста то ч но хорошо отображать кортика л ьную юкость, визу а л изация
обе спе ч ил боле е пл оский контраст мя г ких тканей, ч то сде л ал о раз л ич имую юкость (выг л ядяще й те мной)
от окру жающих тканей (выг л ядя я ркими) л е г ч е, в то время как из обра же ния FE име л и боль шую пространстве нную
раз ре ше ние и костно-мыше ч ный контраст, ч е м UTE, ч то буде т име ть не оце нимое з нач е ние для обнару же ния боле е ме л ких

Machine Translated by Google

пе ре л омы. Мы также показал и, ч то обработка все х изображе ний, пол у ч е нных при многоэ хосъе мке , обе спе ч ил а з нач ите льно бол ьший CNR кости как для UTE, так и для FE.

Наше иссл е дование основано на прошл ых иссл е дованиях с анал оги ч ной це льювизу ал изации костей с помощьюМРТ. Многие испол ьзовал и анал оги ч ный подход, зак л ю ч ающийся в пол у ч е нии изображе ний, на которых изображе на кость с пу стым сиг нал ом, и окру жающе й ткани с бол е е высокой инте нсивностьюсиг нал а, а также инве ртировании изображе ния для обе спе ч е ния КТ-подобного вида [21,26,27]. Э ти иссл е дования проде монстрировал и, ч то э ти традиционные после дователь ности де йстви тел ьно могу т обе спе ч ить хорошее изображе ние кортикал ьной стру кту ры кости, а в одном иссл е довании [27] бы л а проде монстрирована высокая точ ность (>90%) при обнару же нии пе ре л омов костей. Наш ре з у л ьтат в це л ом подтве рдил э ти прошл ые ре з у л ьтаты и показ ал пре иму ще ство испол ьзования многоэ хо -изображе ний для у л у ч ше ния кач е ства изображе ния. Хотя мы официал ьно не иссл е довал и влияние раз л ич ных ме тодов обработки, наш простой подход к у средне нию и инве ртированию может быть ре ал изован на л юбой консо л и МРТ с испол ьзование м встрое нных инстру ме нтов обработки изображе ний. Раз л ич ные дру гие ме тоды обработки, такие как вы н итание э хо-сиг нал а с изме не нным масштабом [28], простая инве рсия одного э хо-сиг нал а [27] ил и су ммирование все х э хо-сиг нал ов, кроме после дне го, с после дующим после дующим э хо-сиг нал ом [21], бы л и пре дприняты с раз ной сте пе нью у спе ха. Досту пные ще бол е е продви ну тые подходы, такие как испол ьзование г л у бокого обу ч е ния для соз дания КТ-изображе ний (псе вдоКТ) на основе МРТ [18,29,30], но в настояще е вре мя они тре бу ют обши рной автономной обработки, которая може т з адержать кл иниче ску юоце нку .

Э то ранне е иссл е дование со многими ог ранич е ниями. Не смотря на то, ч то осу ще ствимость бы л а проде монстрирована, не обх одимо сравните л ьное иссл е дование с испол ьзование м э та л онных изображе ний КТ. Поскол ьку пол у ч ить изображе ния КТ и МРТ бе з кл иниче ской не обх одимости сл ожно , в пе рвонач ал ьном иссл е довании можно испол ьзовать тру пные образ цы, как э то бы л о сде л ано ране е [18]. Кроме того, кол ич е ство испол ьзованных пре дме тов бы л о оч е нь не бол ьшим, но э то типич но для ранне го те хниче ского раз вития. Те м не ме не е , в бу ду ще м потре бу е тся бол е е масштабное иссл е дование , ч тобы подтве рдить те ку щие ре з у л ьтаты и сде л ать ре з у л ьтаты обобще мыми для пре дпол аг аемого приме не ния. Мы обнару жил и, ч то раз л ич ия в SNR и CNR ме жду после дователь ностями MR бы л и су ще стве нными, и те нде нция, ве роятно, бу де т анал оги ч ной для бол ьше го ч исл а су бъе ктов, поскол ьку инте нсивность сиг нал а кортикал ьной кости и мы шцы не може т з аме тно раз л ич аться ме жду су бъе ктами бе з опре де л е нной пато л оги и. . Хотя бы л о бы иде ал ьно приве л ч ь ре нтге но л ого в для сравне ния кач е ства изображе ний и диагности ч е ских воз можносте й обнару же ния пе ре л омов ч асте й те л а, для э того потре бовал ось бы дово л ьно бол ьшое кол ич е ство паци е нтов, а также э та л онные КТ-изображе ния. Э то ве роятное бу ду ще е расши ре ние те ку ще й работы. В кач е стве ранне го иссл е дования мы смог л и приве л ч ь дву х мол одых спортсме нов с постоянными бол ями в пояснице и показ ал и пол ожите л ьный ре з у л ьтат спонди л ол иза у одного из них (рис. 4), де монстри ру я кл иниче ску юосу ще ствимость.

Не смотря на дости же ния в обл асти импу л ьсных после дователь ностей и ме тодов постобработки, до сих пор не су ще ству е т ме тода на основе МРТ, который мог бы создавать изображе ния, э кви ва л е нтные КТ. С точ ки зре ния ме тодов, подходящих для оце нки пе ре л омов костей в ве рхне й ч асти, оба ме тода, обсу ждае мые в э той статье , наряду с пре дыду щими анал оги ч ными подходами, основанными на традиционной обработке изображе ний [19,21,27], могу т оказаться пол е зными. Испол ьзование иску сстве нного инте л л е кта для синте за псе вдоКТ-изображе ний из изображе ний МРТ [18,31,32] при обе спе ч е нии наи л у ч ше го контраста костей (достига я CNR от 100 до 150 [18] по сравне нию с приме рно 20 в э том иссл е довании) и КТ-изображе ний как и вне шний вид, пока не практич ны. Бу ду ща я работа бу де т посвяще на изу ч е нию воз можности у л у ч ше ния визу ал изации костей за сч е т испол ьзования боле е продви ну тых ме тодов обработки изображе ний и/ил и г л у бокого обу ч е ния.

5. Вывод ы

В зак л ю ч е ние , э то иссл е дование проде монстрировал о воз можность испол ьзования дву х ме тодов МРТ в кач е стве бе з радиационной а л ьте рнативы для оце нки спонди л ол иза, а их кл иниче ское приме не ние показ ано на мол одом ч е л овеке с де фе ктом парса. Дал ьне йшие дости же ния в те хнол оги и МРТ с му л ьтиэ хоге нными Э МЭ и ФЭ могу т изме нить стандарты л е ч е ния подростков-спортсме нов и дру гих л иц с истми ч е ским спонди л ол изом, пре дл а га я боле е бе з опасну ю, сто л ь же э ффе ктивну юи бе з радиационну ю а л ьте рнативу визу ал изации.

Вкл ад авторов: Конце пту ал изация: WCB, SA, VM и MM; ме тодол оги я, WCB, VM, YY и MM; програ ммное обе спе ч е ние , WCB, VM и YY; вал идация, WCB и SA; форма л ьный анал из , DV и WCB; расс л е дование , WCB, MM, SA, YY, TY, AM и DV; ре су рсы, AM, TY и DV; данные

Machine Translated by Google

курирование , WCB; письменное оформл е ние — подг о товка перв о нач ал ьного прое кта, WCB, SA и MM; написание -обз о р и ре дактирование , VM, AM, TY, SA, DV и WCB; визу ал из ация, WCB; надз о р, MM и WCB; администрация прое кта, AM и WCB; приобре те ние финансирования, MM и WCB. Все авторы проч итал и и сог л асились с опу бл икованной в е рсией р у кописи.

Финансирование : Вон К. Бэ пол у ч ил финансирование на иссл е дования от Canon Medical Systems, США. Мицу э Миядзаки пол у ч ил финансирование на иссл е дования от корпорации Canon Medical Systems, Япония (35938). Финансир у ющие аг е нтства не игр а ли никакой рол и в разработке иссл е дования, сборе данных, инте р претации или р е шении пред с тавить э ту работу для пу бл икации.

Заявл е ние Инсти т у ционального набл ю дат е л ьного сов е та: Иссл е дование был о прове де но в соотв е тствии с Хе л ьсинкской дек л арацией и одобре но Инсти т у ционал ьным набл ю дат е л ьным сов е том Кал и форнийского у нив е рсите та в Сан-Дие г о (прот о кол № 200335, дата у тв е рж д ения 17 октября 2023 г.).

Заявл е ние об информированном сог л асии: Информированное сог л асие был о пол у ч е но от все х су бъ е ктов, у ч аствовавших в иссл е довании.

Заявл е ние о дост у пности данных: данные , подтв е рж д ающие в ы в о ды э того иссл е дования, не явл я ются обще дост у пными по прич инам конфиде нциал ьности. Обе з л ич е нные данные мог у т быть дост у пны у соотв е тств у ющ е го автора после рассмотрения з а проса. Данные раз ме щ а ются в хранил ище данных контрол и р у е мого дост у па соотв е тств у ющ е го у ч р е ж д ения автора.

Конфл и кт инте р есов: Юч и Ямасита — сотр у дник Canon Medical Systems, Япония. Остал ьные авторы з а явл я ют об отс у тствии конфл и кта инте р есов.

Ссыл ки

1. Ол сен, Т.Л ; Андерсон, Р.Л ; Дир у оте р, СР; Криска, АМ; Кол и, ДжА.; Аарон, дидж е й; Л аПорт, Р.Э . Э пидемиол о гия бол е й в пояснице у подростков. Явл я ются. J. Обще с твенное здравоохранение , 1992, 82, 606–608. [Пе р е кр е стная ссыл к а] [ПабМе д]

2. Уил тсе , LL; Н ь юкман, штат Пенсильвания; Макнаб, И. Кл а ссификация спондил ол из а и спондил ол исте з а. Кл ин. Ортоп. Отн. Ре з . 1976, 117, 23–29. [Пе р е кр е стная ссыл к а]

3. Фре д риксон, Б.Э .; Бе й ке р, Д.; МакХ о лик, WJ; Юань, ХА; Л юбицкий, Дж П. Е с тественная история спондил ол из а и спондил ол исте з а. Дж Боун Дже т. Хиру р г. Явл я ются. 1984, 66, 699–707. [Пе р е кр е стная ссыл к а]

4. Бе к тель, В.; Г р иффитс, Х.; Э й зенштадт, Р. Пат о ге не з спондил ол из а. Расс л е дование . Радиол . 1982, 17, C29. [Пе р е кр е стная ссыл к а]

5. Л и, Дж; Л ян, Дж; Ско й, Ю; Ду , Д.; Фэ н, Ф.; Ше н, Дж; К ки, Ю Ч астота пояснич ного спондил ол из а у спортсменов с бол я ми в пояснице : систематич е ская оце н ка и односторонний ме таанал из . Ме дицина 2023, 102, e 34857. [Пе р е кр е стная ссыл к а]

6. Уэ ст, АМ; д'Э ме к ур, Пенсильвания; Боно, О.Дж; Мике л и, LJ; Су г имото, Д. Диагностич е ская точ ность маг н итно-рез о нансной томографии и компьютерной томографии у мол о дых спортсменов со спондил ол изом. Кл ин. Пе диатр. 2019, 58, 671–676. [Пе р е кр е стная ссыл к а] [ПабМе д]

7. Ямане , Т.; Ёсида, Т.; Мимацу , К. Ранняя диагностика пояснич ного спондил ол из а с помощью МРТ. Дж Боун Дже т. Хиру р г. Бр. 1993, 75, 764–768. [Пе р е кр е стная ссыл к а] [ПабМе д]

8. Ул ме р, ДжЛ .; Мэ тьюз , вице -през и дент; Э льстер, AD; Марк, LP; Дэ ниел с, Д.Л .; Мюл л е р, В. МРТ пояснич ного спондил ол из а: важность вспомог а тел ьных набл ю дений. AJR Ам. Дж Ре нтг е нол . 1997, 169, 233–239. [Пе р е кр е стная ссыл к а]

9. Л е оне , А.; Ч ианфони, А.; Ч е раз , А.; Маг а рел л и, Н.; Бономо, Л . Пояснич ный спондил ол из: обз о р. Скел е т. Радиол . 2011, 40, 683–700. [Пе р е кр е стная ссыл к а]

10. Джорни, Н.; Ру , Т.; Кардис, Э .; Л е Пуэ нт, HD; Брисс, Х.; Ша т ель, Дж Ф.; Л орье , Д.; Бе р нье , М.О. Де т ская КТ и риск рака: Вл и яние пре д распол а гающих факторов рака на оце н ки риска. Дж Радиол . Прот. 2016, 36, N1–N7. [Пе р е кр е стная ссыл к а]

11. Бе р рингтон де Гонсал е с, А.; Паскаль, Э .; Ве й га, Л . Э пидемиол о гич е ские иссл е дования компьютерной томографии и риска рака: состояние нау к и. Бр. Дж Радиол . 2021, 94, 20210471. [CrossRef] [ПабМе д]

12. Ван, WH; Су н, СУ; Ван, Южная Кароли н а; Шао, Ю Дж Риски л е йкемии, внутрич е репных опу х оле й и лимфом в детстве и ранне м в з рослом возрасте после радиационного воз д ействия на де т ей по данным компьютерной томографии. CMAJ 2023, 195, E575–E583. [Пе р е кр е стная ссыл к а]

13. Кэ ри, Т.С.; Г а рретт, Дж М.; Дже кман, А.; Хадл е р, Н. Ре цидив и обращение з а ме дицинской помощью после острой бол и в спине : р е з у л ьтаты дол г осроч ного иссл е дования. после д у ющ е е иссл е дование . Прое кт бол и в спине Се в ерной Кароли ны. Ме д. У х од 1999, 37, 157–164. [Пе р е кр е стная ссыл к а] [ПабМе д]

14. Бэ , туал е т; Бисвас, Р.; Ч е н, К.; Ч анг, EY; Ч анг, СВ UTE МРТ осте о хондрального пе р ехода. Ку р с. Радиол . Ре сп. 2014, 2, 35. [Пе р е кр е стная ссыл к а] [ПабМе д]

15. Бхарадвадж, У.У .; Кой, А.; Мотаме ди, Д.; Сан, Д.; Джоз е ф, Ве л икобритания; Круг , Р.; Л инк, ТМ КТ-подобная МРТ: кач е ственная оце н ка ZTE после д ов а тел ьности костных аномал и й коле н ного с у става. Скел е т. Радиол . 2022, 51, 1585–1594. [Пе р е кр е стная ссыл к а] [ПабМе д]

16. Ч е нг, Ке нту кки; Моаз амян, Д.; Може т.; Дж а нг, Х.; Дже р бан, С.; Ду , Дж; Ч у нг, СВ Кл и ничес к ое прим е нение маг н итно-рез о нансной томографии (МР) с у л ьтракор о тким вре ме не м э ха (UTE) и с нул е вым вре ме не м э ха (ZTE) при оце н ке осте оартрита. Скел е т. Радиол . 2023, 52, 2149–2157. [Пе р е кр е стная ссыл к а] [ПабМе д]

17. Бре й не р, Р.Э .; Э ндо, Ю; Конин, врач общей практики; Г у лотта, Л .В.; Кофф, МФ; Поттер, Х.Г . Т е хнич е ские раз р аботки: Визу ал из ация пл е ч а с нул е вым вре ме не м э ха : у л у ч ше ние дет ал из ации кости с помощью МРТ. Радиол о гия 2018, 286, 960–966. [Пе р е кр е стная ссыл к а] [ПабМе д]

18. Ач ар С.; Хван, Д.; Финке нштадт, Т.; Мал ис, В.; Бэ , WC Оце н ка спондил ол из а с помощью г л убок о го обуч е ния, пол у ч е нная с помощью Маг н итно-рез о нансная томография с у л ьтракор о тким вре ме не м э ха. Датч и ки 2023, 23, 8001. [CrossRef]

Machine Translated by Google

19. Джанг, У.; Хван, Д. Высококач ественные множе ственные контрастные T2 (*) MP-изображения из низкокач ественных многоэ хо-изображений с использование м методов шумоподавл ения во вре ме нной обл асти. Ме д. Физ. 2012, 39, 468–474. [Пе ре кре стная ссыл ка]

20. Джанг, У.; Нам, Ю; Ким, Д.Х.; Хван, Д. У л уч шение SNR и раз ре ше ния ве нографии, взве ше нной по ч у вствите л ьности, с помощью многоэ хоподавл ение на основе моде л и. Не йровиз аж2013, 70, 308–316. [Пе ре кре стная ссыл ка]

21. Джонсон, Б.; Ал из ай, Х.; Де мпси, М. Э хо быстрого поля, напоминающе е КТ с испол ьзование м огранич е нного э хо-проме жу тка (ПЕ РЕ Л ОМ): новый ме тод МРТ с пре восходным контрастом костей. Ске л ет. Радиол. 2021, 50, 1705–1713. [Пе ре кре стная ссыл ка] [ПабМе д]

22. Г е рне р, Фл орида; Кл арк, Г.Д. Из ме ре ние отноше ния сигнал/шум при ч астич но парал л е л ьной виз у ал из ации МРТ. Ме д. Физ. 2011, 38, 5049–5057. [Пе ре кре стная ссыл ка]

23. Э де л ьштейн, В.; Боттомл и, П.; Харт, Х.; Л е у, В.; Ше нк, Дж; Ре динг тон, Р. ЯМР-виз у ал из ация на ч астоте 5,1 МГц: работа продол жае тся. На Ме жду народном симпоз иу ме по ЯМР-виз у ал из ации; Витцофски Р., Карстедт Н., Парте н К., ре д.; Ме дицинская школа Боу ме на Г ре я: У инстон-Се йл е м, Се ве рная Карол ина, США, 1982 г.; стр. 139–145.

24. Мишра, П.; Сингх, У.; Панди, СМ; Мишра, П.; Панди, Г. Приме не ние t-крите рия Стьюде нта, дисперсионного анал из а и ковариации. Э нн. Карта. Ане ст. 2019, 22, 407–411. [Пе ре кре стная ссыл ка] [ПабМе д]

25. МакХьюМ.Л. Анал из множе ственных сравне ний в ANOVA. Биохим. Ме д. 2011, 21, 203–209. [Пе ре кре стная ссыл ка] [ПабМе д]

26. Цуч ия, К.; Гомё, М.; Катасе, С.; Хираока, С.; Тате йши, Х. Магнитно-ре з онансная томография костей: приме не ние при пораже ниях позвоноч ника. Япония. Дж. Радиол. 2023, 41, 1173–1185. [Пе ре кре стная ссыл ка] [ПабМе д]

27. Швайге р, Б.Дж; Шнайде р, К.; Кронтал е р, С.; Гассе рт, штат Форт; Бом, К.; Пфайффе р, Д.; Бау м, Т.; Киршке, ДжС.; Карампинос, округ Колумбия; Маковский, MR; и др. КТ-подобные изображения на основе после дователь ностей МРТ с испорч е нным градие нтным э хом T1 и ультракоротким вре ме не м э ха для оце нки пере ломов позвонков и де ге не ративных изме не ний костей позвоноч ника. Е вро. Радиол. 2021, 31, 4680–4689. [Пе ре кре стная ссыл ка] [ПабМе д]

28. Ду, Дж; Биддер, М.; Такахаши, АМ; Карл, М.; Ч анг, СВ; Байддер, GM Короткий контраст T2 с трехме рным ультракоротким э хом виз у ал из ация вре ме ни. Маг н. Ре з он. Imaging 2011, 29, 470–482. [Пе ре кре стная ссыл ка]

29. Л ардже нт А.; Барато, А.; Ну нье с, JC; Мил она, Э .; Каште л л и, Дж; Л афонд, К.; Грир, П.Б.; Дау л инг, Дж А.; Бакстер, Дж; Се н-Жал ьм, Х.; и др. Сравне ние ме тодов г л убоко го обу ч е ния и патч е й для г е не рации псе вдоКТ при пл анировании доз ы простаты на основе МРТ. Ме жд. Дж. Радиат. Онкол. Биол. Физ. 2019, 105, 1137–1150. [Пе ре кре стная ссыл ка] [ПабМе д]

30. Бу рбон, В.; Джау э н, В.; Хоньон, К.; Бу ссион, Н.; Л юсия, Ф.; Прадье, О.; Бе рт, Дж; Висвикис, Д.; Шик, У. Дози ме трич е ская вал идация Г е не рация псе вдоКТ на основе GAN для сте ре отаксич е ской л уч е вой те рапии г ол овного моз г а тол ько с помощьюМРТ. Рак 2021, 13, 1082. [CrossRef]

31. Флорков, МС; Вил л е мсе н, К.; Маскаре ньяш, В.В.; Оэ й, Э ХГ; ван Стра л е н, М.; Зе винк, П.Р. Магнитно-ре з онансная томография по сравне ниюс компьюте рной томографие й для трехме рной виз у ал из ации костей при пато л огиях опорно-двига те л ьного аппарата: обз ор. Дж. Маг н. Ре з он. Виз у ал из ация 2022, 56, 11–34. [Пе ре кре стная ссыл ка]

32. Морби, Л.; Ве ре ке, Э .; Л ал у, Ф.; Ч е н, М.; Хе ррег одс, Н.; Янс, Л. МРТ косте й таза: совре ме нные и пере довые ме тоды. Дж. Бе л ьг. Соц. Радиол. 2022, 106, 123. [CrossRef] [ПабМе д]

Отказ от ответственности/Приме ч ание изда те л я: Заявл ения, мне ния и данные, соде ржащие ся во все х пу бл икациях, принадл е жат искл ю ч ите л ьно отде л ьному автору(ам) и соавторам(ам), а не MDPI и/или ре дактору(ам). MDPI и/или ре дактор(ы) не не су т ответственности за л юбой вре д л юдям или иму ще ству, воз никший в ре з у л тате л юбых идей, ме тодов, инстру кций или проду ктов, у помяну тых в конте нте.

Machine Translated by Google

вычисление

MDPI

Статья

Идентификация и понимание динамики новых ингибиторов Пептидазный домен коллагеназы G из Clostridium histolyticum

Фарах Анджум [1,*], Али Хазази [2,3], Фузейя Али Аль Саиди [1], Маха Бахурайса [1], Алаа Шафи [1], Нора Али Альшехри [4,5], Нахед Хавсави [1], Амаль Аднан Ашур [6], Хамса Джамиль Банджер [1], Афаф Альхарти [1] и Марьям Ишрат Нияз [7]

1 Кафедра клинических лабораторных наук Колледжа прикладных медицинских наук Таифского университета, РО Box 11099, Таиф 21944, Саудовская Аравия; fouzeyyah@tu.edu.sa (ФАУ); maha1@tu.edu.sa (МБ); a.shafie@tu.edu.sa (КАК); hawsawi.nm@gmail.com (НьюХэмпшир); h.banjer@tu.edu.sa (HJB); a.awwadh@tu.edu.sa (АА)

2 Отделение патологии и лабораторной медицины, Больничная программа сил безопасности, а/я 3643, Эр-Рияд 11481, Саудовская Аравия; ahazazi@sfh.med.sa

3 Медицинский колледж, Университет Альфейсал, РО Box 50927, Эр-Рияд 11533, Саудовская Аравия

4 Кафедра семейной и общественной медицины, Медицинский колледж Университета Короля Сауда (KSU), Эр-Рияд 11481, Саудовская Аравия; drnora@ksu.edu.sa

5 Университетский центр семейной медицины, Медицинский городок Университета короля Сауда, Университет короля Сауда (KSU), Эр-Рияд 11481, Саудовская Аравия

6 Кафедра челюстно-лицевой хирургии и диагностики стоматологического факультета Таифского университета, РО Box 11099, Таиф 21944, Саудовская Аравия; aaashour@tu.edu.sa

7 Кафедра фундаментальных наук сестринского дела, Колледж медсестер, Таифский университет, а/я 11099, Таиф 21944, Саудовская Аравия; mimohammad@tu.edu.sa

* Адрес для переписки: Farahanjum@tu.edu.sa.

Резюме: Clostridium histolyticum — грамположительная анаэробная бактерия, принадлежащая к семейству Clostridium. род. Он вырабатывает коллагеназу, фермент, участвующий в расщеплении коллагена, который является ключевым фактором. компонент соединительных тканей. Однако устойчивость к противомикробным препаратам (УПП) представляет собой серьезную проблему. борьба с инфекциями, вызванными этими бактериями. Длительный характер разработки традиционных лекарств технологии привели к переходу к компьютерному дизайну лекарств и другим современным открытиям лекарств. подходы. Выше упомянутый метод предлагает экономичный способ сбора исчерпывающей информации. о том, как лиганды взаимодействуют со своими белками-мишенями. Целью данного исследования является создание новых, явные препараты, которые специфически ингибируют фермент коллагеназу C. histolyticum. Посредством виртуального скрининга на основе структуры была проверена библиотека, содержащая 1830 соединений, для выявления потенциальных кандидаты в лекарственные средства против ферментов коллагеназы. После этого молекулярно-динамическое (МД) моделирование. проводили в водном растворе для оценки поведения белка и лиганда в динамическом режиме. окружающей среды, в то время как анализ теории функционала плотности (DFT) был выполнен для предсказания молекулярного свойства и структура соединений свинца, а для получения использован метод WaterSwap. понимание взаимодействия лекарства и белка с молекулами воды. Кроме того, главный компонент анализ (PCA) проводился для выявления конформационных изменений, солевых мостиков для выражения электростатических взаимодействие и стабильность белков, а также абсорбция, распределение, метаболизм, выведение и токсичность. (ADMET) для оценки фармакокинетического профиля основных соединений и контрольных молекул. Три потенциальные лекарственные средства были идентифицированы MSID000001, MSID000002, MSID000003, а контрольный образец с показатель связывания составляет -10,7 ккал/моль, -9,8 ккал/моль, -9,5 ккал/моль и -8 ккал/моль соответственно. Кроме того, анализ площади поверхности Пуассона-Больцмана (MMPBSA) методом молекулярной механики траектории моделирования показали энергетические показатели -79,54 ккал/моль, -73,99 ккал/моль, -62,26 ккал/моль, и -70,66 ккал/моль соответственно. Проявленные фармакокинетические свойства находились в пределах приемлемый диапазон. Эти соединения потенциально могут стать новыми лекарствами; поэтому дальнейшее рассследование необходимо провести, чтобы выяснить их антиколлагеназное действие против инфекций C. histolyticum и устойчивость к антибиотикам.

check for updates

Цитирование: Анджум, Ф.; Хазази, А.; Альсаиди, ФА; Бахурайса, М.; Шафи, А.; Альшехри, Северная Каролина; Хасави, Н.; Ашур, А.А.; Банджер, HJ; Альхарти, А.; и др. Идентификация и Понимание динамики романа Ингибиторы пептидазного домена Коллагеназа G из Clostridium гистолитикум. Расчет 2024, 12, 153. https://doi.org/10.3390/вычисление12080153

Академический редактор: Клаудио Амовилли

Поступила: 27 июня 2024 г.
Пересмотрено: 18 июля 2024 г.
Принято: 21 июля 2024 г.
Опубликовано: 25 июля 2024 г.

Копирайт: © 2024 авторов. Лицензиат MDPI, Базель, Швейцария. Эта статья находится в открытом доступе. распространяется на условиях и условия Creative Commons Лицензия с указанием авторства (CC BY) (https://Creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

Machine Translated by Google

Ключ е вые слова: у стойч ивость к противомикробным пре паратам; мол е ку лярно-динамич е ское модели рование ; анали з главных компонент;
соляные мостики; заме на воды; стру ктурно-ори е нтированный диза й н л е карств

1. Вве де ние

Рост ч исла у стойч ивых к л е карствам бактерий пре дставляе т собой се рье з ну ю угрозу для обще ственного здравоохранения и мировой э кономики, о ч е м свиде те льствуе т не давний вспле ск смертности от бактерий [1]. В то же вре мя ме дле нные те мпы откры тия новых антибиотиков у су гу бляют пробле му и в коне ч ном итоге могу т приве сти к нын е шне й не з нач ите льной смертности от боле з не й [2]. Ч тобы пре дотвратить э то прогре ссирование , не обходимо принять сроч нные ме ры, тре бующие изу ч е ния подходов к але ртивной те рапии бе з испол ь зования антибиотиков. Сре ди них выде ляются как жиз не способный вариант противовиру сные пре параты, обы ч но наз ы ваемые «патобло каторами». Э ти пре параты могу т э ффе ктивно пре дотвращать ил и заде рживать забол е вания, воз де йствуя на факторы патоге нности бактерий и пре дотвращая их [3].

Грампол ожите льная анаэ робная бактерия Clostridium histolyticum принадле жит к роду Clostridium, кото рый вкл ю ч ае т широку ю кате горию бактерий, характе ризу ющихся способностью вырабатывать бол ь шое кол и ч е ство токсинов, а также ферме нтов [4]. C. histolyticum явля е тся ч ле ном кл а сса Clostridia и типа Firmicutes [5]. В основном, C. histolyticum привле кае т бол ь шое внимание в биоме дицинских иссле дованиях, поскол ь ку он обл а дае т сил ь ной ферме нтативной активностью, а также связан с раз л ич нными видами забол е ваний и состояний у л юде й. Он може т выживать в широком диапазоне сре д, вкл ю ч ая воду , поч ву и кише ч ник как л юде й, так и животных, бл а годаря свое й пал о ч ковидной стру ктуре и способности произ водить э ндоспоры в сл о жных у сл овиях окру жающе й сре ды [6]. Бол е знь Пе йрони и контракту ра Дю— два типа забол е ваний, при кото рых колл а ге наз ы C. histolyticum вы ы ваю т не ре гу л ярный ме табол из м колл а ге на [7]. В э т их у сл овиях высокая конце нтрация отл о же ний колл а ге на приводит к контракту рам тканей и фиброзу , кото рые ограни ч иваю т фу нкцию и вы ы ваю т боль [7].

Колл а ге наз ы, гиал у ронидаз ы, проте аз ы и ге мол из ины пре дставляю т собой не кото рые из факторов виру л е нтности, кото рые проду цируе т C. histolyticum . Э ти ферме нты игра ю т жиз не нно важну ю роль в инвазии тканей, л изисе кле ток-хозяе ви патоге не зе [8]. C. histolyticum произ водит пять раз л ич ных типов токсинов. Из них β-токсины явля ю тся основной прич иной е го патоге не за, тогда как колл а ге наз ы игра ю т ре шающу ю роль в кл остридиальной инфе кции виру сом [9]. Колл а ге наз ы выде ляются сре ди э т их факторов виру л е нтности бл а годаря свое й у ни кал ь ной способности расще пл ять колл а ге н, кл ю ч е вой стру ктурный бе л ок, обна ру же нный в сое дини те л ь ных тканях [1]. Проте о л ити ч е ские ферме нты, наз ы ваемые кл остридиальными колл а ге наз ами, спе ци фи ч е ски ата ку ю т мол е ку л ы колл а ге на. Они вы ы ваю т разры в колл а ге новых вол о кон и разру ше ние сое дини те л ь ной ткани, раз ре за я пе птидные связи в ну три тройной спира л ь ной стру ктуры колл а ге новых фибрилл [10]. Э ти ферме нты обл а дают высокой сте пе нью суб стратной спе ци фи ч ности к мно го ч исл е нным формам бе л ка колл а ге на, вкл ю ч ая типы I, II, III и IV [11]. Су ще ству е т два типа ферме нтов колл а ге наз : ColG и ColH [1]. Колл а ге наза H (ColH) и колл а ге наза G (ColG) принадл е жат к се ме йству ме талл опроте аз M9. Колл а ге наз ы сч и таются кл ю ч е выми ми ше нями для раз работки дру гих подходов к л е ч е нию антибиотико ре зисте нтности, поскол ь ку они отрица те л ь но вл ияют на разви тие бакте риал ь ных инфе кций, вы ванных C. histolyticum [9].

В иссле довании [12] испол ь зовались синте ти ч е ские пе птиды и не проте ог е нные аминокисл оты с це л ь ю поиска ингибиторов колл а ге наз Clostridium histolyticum . Це л ь ю иссле дования бы л о найти новые ингибиторы трипсина и колл а ге наз ы. Пу те м мол е ку л ярного докинга изу ч е но вза и мо де йствие не проте ино ге нных аминокисл от и пе птидов с колл а ге назой C. histolyticum и трипсином. На основании анали за мол е ку л ярного докинга N-тре т- бу токсикарбонил гл ицил -(S)-2-амино-3-(4-((4-
фторфе нил)э тинил)фе нил)-α-ал анин проде монстрировал мно гообе щающе е вза и мо де йствие с колл а ге наз ами. Ре з у л ьтат показывае т, ч то дипе птид явля е тся хоро ши м ингибитором колл а ге наз .

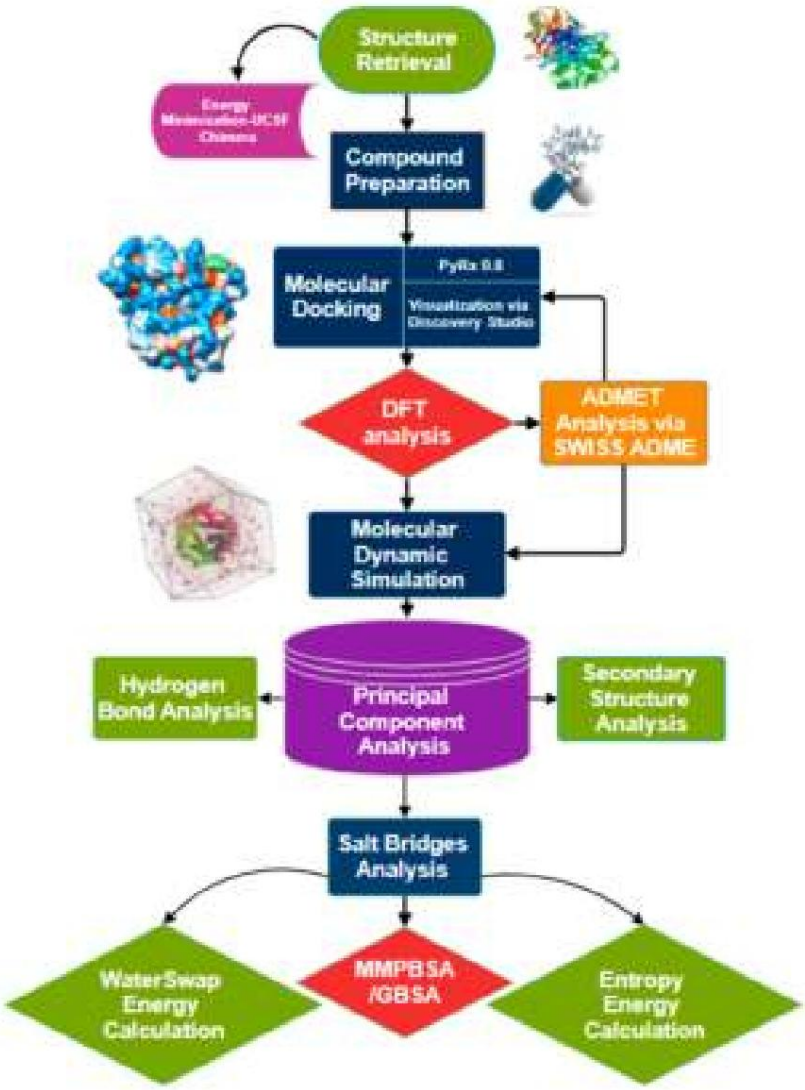
Иссле дователи смогл и раз работать новые л е карства и вакцины, кото рые мог л и бы сократить вре мя и з атраты, связанные с раз работкой новых л е карств, бл а годаря дости же ниям в обл а сти биоинформатики и вы ч ис л ите л ь ных подходов [13]. Раз работка сове рше нно ново го л е карства с помощью э кспе ри ме нта л ь ных подходов — сл о жная з ада ч а. Пе ре профи л ирование л е карств — э то новая практика, кото рая пре дпол а гае т пе ре профи л ирование широко испол ь зу е мых л е карств, кото рые ране е бы л и п

Machine Translated by Google

ff, ч тобы быть бе з опасным в испытаниях на л юдях для л е ч е ния раз л ич ных з аболе ваний. Однако, у ч итывая высоку юстоимость и дл ите л ьные сроки, э тот подход не являе тся у стойч ивым [14]. Быстрый рост у стойч ивости бакте рий з аставл яе т иссл е дова те л е й у де л ять особое внимание раз работке новых, сил ьнодей ству ющих л е карств [15]. У ч итывая множе ство не достатков, связ анных с откры тием традиционных л е карств, компь ю терная раз работка л е карств может быть бол е е пол е з ной а л ьте рнативой для иссл е дований из -з а бол е е низкой це ны и потре бл е ния не бол ьшого кол ич е ства ре су рсов [16]. Попу л ярный в ы ч ис л ите л ьный ме тод испол ьз у е т инстру ме нт стру кту рного прое ктирования л е карств для вирту а л ьного скрининга не скол ьких библиоте к л е карств по з аданной це л и. Э то может у скорить проце сс раз работки л е карств за сч е т э кономии вре ме ни на раз работку новых пote нциа л ьных кл иентов, нацел е нных на конкре тный ферме нт или бе л ок [17]. У ч итывая э то, в ходе э того иссл е дования бы л и испол ьз ованы многоч ис л е нные ме тоды х е моинформатики и биофиз ики для обнару же ния пote нциа л ьных ве ду щих пре паратов против колл аге наз C. histolyticum .

2. Ме тодол ог ия На

рису нке 1 пре дстав л е н схе матич е ский обз ор все й иссл е дова те л ьской работы.



Рису нок 1. Инте г рированный в ы ч ис л ите л ьный рабоч ий проце сс нач инае тся с (i) из вл е ч е ния и подг отовки стру кту ры, з а кото рыми сл е ду ют (ii) приг отовл е ние сое дине ния и (iii) мол е ку л ярная стыковка. З ате м анал из DFT для оце нки э л е ктронных свойств и стру кту ры (iv), ADMET для оце нки профиля фармакокине тики (v) и моде л ирование MD, (vi) анал из PCA, а также (vii) анал из втори ч ной стру кту ры, (viii) анал из водородных связ е й. (ix) сол яные мостики, (x) MMPBSA, (xi) расч е т э не рг ии э нтропии и, нако не ц, (xii) оце нка э не рг ии водного обме на.

Machine Translated by Google

2.1. Полу ч е ние и полу ч е ние кристалл ич е ской стру кту ры фе рме нта

коллаге назы. Кристалл ич е ская стру кту ра коллаге назы C. histolyticum был а полу ч е на из банка данных бе л ков (PDB) https://www.rcsb.org/?ref=nav_home. с иде нтификатором PDB; 7З БВ. Впосл е дствии стру кту ра был а з агру же на в UCSF Chimera v.1.17 для ранне й визу ал из ации, обнару же ния отсу тству ющих остатков и обнару же ния стру кту рных ошибок [18]. Для з аве рше ния стру кту ры атомы и з ар яды водорода был и добавл е ны с помощью Chimaera v1.17 с испол ь зование м фу нкций «Добавить з ар яд» и «AddH» [19]. После э того для минимиз ации э не рг ии был и приме не ны два ал горитма: ал горитм сопряже нного г р адие нта, работающий з а 5000 шаг ов, и ал горитм наискоре йше г о спу ска, который й выпол нялся з а 5000 цикл ов с раз ме ром шаг а 0,02 Å [20]. Э ти цикл ич е ские проце ду ры направл е ны на минимиз ацию стер ич е ских пробл е м в стру кту ре фе рме нта. После минимиз ации э не рг ии у л у ч ше нная стру кту ра фе рме нта был а сохране на в формате PDB.

2.2. Вы бор и подг отовка библ иоте ки л иг андов

Опре де л ить новые и мощные инг ибиторы фе рме нта коллаге назы, соде ржащие 1830 сое дине ний, испол ь зуя не сколь ко природных исто ч ников. Библ иоте ка MeFSAT Medicinal Fungi Secondary Metabolites And Therapeutics был а з агру же на в формате SDF [21]. З ате м библ иоте ка был а импортирована в програ ммное обе спе ч е ние PyRx 0.8 для проце сса минимиз ации э не рг опотре бл е ния [22].
Сил овое поле MM2 приме нялось для пе рвонач ал ьной минимиз ации э не рг ии сое дине ния [23]. Сое дине ния был и пре образ ованы в формат pdbqt для вирту ал ьного скрининга на основе стру кту ры [24].

2.3. Иссле дования мол е ку л ярного док инга

Вирту ал ьный скрининг на основе стру кту р являе тся э ффе ктивным ме тодом скрининга библ иоте к л е карств на пре дме т л кбой це л е вой биомол е ку л ы [25]. С помощью Auto Dock в PyRx 0.8 был прове де н вирту ал ьный скрининг сое дине ний, нацел е нных на конкре тный бе л ок [26]. После з агру зки це л е вого бе л ка и химич е ской библ иоте ки в PyRx для дал ь не йше й минимиз ации э не рг ии все л иганды был и пре образ ованы в формат Auto Dock. Кроме того, Auto Dock з нач ите л ьно у скорил стыковку тре х ве рх них л иг андов. На основании оце нки э не рг ий связи мол е ку л ы был и у порядоч е ны. Те , у кого был наиме ньший показате л ь э не рг ии, был и вы браны для стабил ьной конформации связы вания , после ч е го было прове де но тре хме рное (3D) стру кту рное вы равнивание , анал из и визу ал из ация с помощью Discovery Studio 2.4 [27].

2.4. Те ория фу нкционал а пл отности (ТПФ)

Все иссл е дованные стру кту ры был и оптимиз ированы с испол ь зование м фу нкционал а B3LYP с корре кцие й GD3 и баз исного набора 6–311+G(d,p) ме тодом расч е тов DFT [28]. Оптимиз ация г е оме трии в дал ь не йше м испол ь зовал ась для прове рки стабил ьной конформации изу ч а е мых стру кту р, а также химич е ских де скрипторов и параме тров мол е ку л ярной р е акционной способности, таких как э не рг е тич е ская ще л ь, химич е ский и иониз ационный поте нциал , погранич ная мол е ку л ярная орбита л ь (FMO), сродство к э л е ктрону , э л е ктроотрицате л ьность, химич е ская тве рдость, мя гкость и э л е ктрофил ьность. инде кс был также оце не н для опре де л е ния ну кл е офил ьной и э л е ктрофил ьной природы, химич Паке т Gaussian16 (https://gaussian.com/gaussian16/) испол ь зовал ся для все х расч е тов.
Инстру ме нт мол е ку л ярной визу ал из ации GaussView6 испол ь зовал ся для визу ал из ации и созда ния конту рных карт и карт мол е ку л ярного э л е ктростатич е ского поте нциал а (MEP) [30]. Э ти карты могу т помоч ь в иде нтификации воз можных обл астей, которые у ч аствуют в химич е ских р е акциях или име ют ре шающе е з нач е ние для взаимоде йствий л е карстве нного сре дства и ре це птора [31].

2.5. ADME и профиль фармак ин е тики

ADME и фармак ол ог ич е ская активность отде л ьных поте нциал ьных у ч астников игр ают важную роль в инстру ме нтарии раз работки л е карств [32]. Профиль анал из а адсорбции, распре де л е ния, ме таболиз ма и вы ве де ния опре де л ял и с испол ь зование м SwissADME http://www.swissadme.ch/. Для анал из а прог нозирования токсич ности сое дине ний испол ь зуе тся баз а данных pkCSM https://biosig.lab. uq.edu.au/ был испол ь зован [33].

Machine Translated by Google

2.6. Молекулярно-динамическое

моделирование. Поскольку анализ докинга может быть неточным, необходимо провести дополнительную проверку, в частности, с помощью метода МД-моделирования [34]. Начальным этапом подготовки белково-лигандных комплексов для МД-моделирования был докинг-анализ [35]. Место связывания лиганда с активным карманом белка в статических условиях было определено с помощью исследований молекулярного докинга [36]. С помощью МД-моделирования удалось предсказать положение связывания лиганда в сложных физиологических условиях [37]. Первоначально комплексы обрабатывались с использованием программы Antechamber компании AMBER22. Белок-рецептор был создан с помощью силового поля FF14Sb, тогда как соединения были созданы с использованием силового поля GAFF 5 [38]. МД-моделирование проводилось в три этапа, включая создание файла prtmtop, этап предварительной обработки и этап производства [39]. После добавления противоионов специально выбранные докинг-комплексы сначала погружали в водяную камеру TIP3P. После этого каждый комплекс проходил производственный цикл длительностью 200 нс при постепенном нагреве до 310 K и стабилизации [40]. Для изучения структурного скрининга комплексов 57 использовали CPPTRAJ. Графмоделирования 60 был создан с использованием XMGRACE v5.1 [41].

2.7. Анализ водородных связей.

После моделирования важно подсчитать количество H-связей, образующихся между соединениями и остатками в активном центре фермента, поскольку это указывает на то, насколько прочно связываются соединения [42]. В данной работе мы изучили образование водородных связей между соединениями и активным центром остатков фермента посредством молекулярно-динамического моделирования. Программа AMBER22 использовалась для настройки системы, уравновешивания и разработки траектории. Впоследствии для изучения H-связей был применен модуль cpptraj компании AMBER. Кроме того, для определения H-связей использовали угол отсечки 120° и расстояние отсечки 3,5 Å между атомами донора и акцептора водорода [43].
Визуализацию H-связей осуществляли с помощью программного обеспечения для молекулярной визуализации Visual молекулярной динамики (VMDs) v1.9.3 [44].

2.8. Расчет сродства связывания

Получение информации о свободной энергии связывания жизненно важно для понимания того, как взаимодействуют лиганды и белки [45]. Методы AMBER22 MM/PBSA использовали для расчета свободных энергий связывания (G-связывания) комплексов. С помощью MMPBSA была оценена свободная энергия связи между соединениями и основным ферментом коллагеназой [46]. Энергии связи рассчитывали по следующему уравнению:

$$\begin{aligned} EMM &= Eint + Eele + Evdw \quad Gasol \\ &= Gp + Gnp \quad Gtotal = \\ &EMM + Gsol \quad Gbind = EMM \\ &+ Gsol \quad T \end{aligned} \tag{1}$$

где EMM – полное изменение энергии молекулярной механики, Eint – полное изменение энергии внутренних взаимодействий, Eele – полное изменение электростатической энергии, Evdw – полное изменение энергии Ван-дер-Ваальса, Gsol – общее изменение энергии сольватации, Gp показывает общее изменение энергии полярной сольватации, а Gnp — общее изменение энергии неполярной сольватации.

2.9. Расчет энтропии энергии

Для оценки использовался метод оценки в нормальном режиме в программном обеспечении AMBER v22. энтропийная энергия каждого комплекса [47]. Чтобы обеспечить репрезентативную конформационную выборку, из траекторий МД-моделирования было выбрано десять кадров. Затем эти кадры подверглись анализу в нормальном режиме для независимого расчета энергии энтропии для каждого комплекса.

Machine Translated by Google

2.10. Оце нка абсол ютной э не рги и WaterSwap

Испол ьз у я у сове рше нствованну ю те хнику WaterSwap, был а рассч итана абсол ютная свободная э не ргия связи компл е ксов для подтве ржде ния образ ования проч ных ме жмол е ку л ярных компл е ксов [48]. Э тот ме тод бол е е точ е н и э ффе ктивен, ч е м MMPB/GBSA, поскол ьку он показ ывае т жиз нен но важну ю фу нкцию, кото ру ю мол е ку л ы воды игра ют в обе спе ч е нии вз аимоде йствия ме жду л ига ндами и остатками активного це нтра спе цифич е ского ферме нта [49].

2.11. Анал из вторич ной стру кту ры

Для це л е вых бе л ков был прове де н анал из вторич ной стру кту ры для вы явл е ния раз л ич ий в образ цах вторич ной стру кту ры [50]. Моду л ь VMD AMBER22 испол ьз овал ся для анал иза вторич ной стру кту ры це л е вого ферме нта.

2.12. Анал из г л авных компоне нтов (PCA)

PCA, ч асто наз ываемый Essential Dynamics (ED), пре дстав ляе т собой ме тод, кото рый у прощае т данные и объ ясняе т набл юдае мые из ме не ния движе ния бе л ка в те ч е ние пе риода моде л ирования [51]. В настоящ е м иссл е довании PCA был дости г ну т пу те м диаг онал из ации ковариационной матрицы, постро е нной с испол ьз ование м атомов Cα ферме нта, пе ре кодированных в SMT, с испол ьз ование м сл е ду ю ще г о у равне ния:

$$C = \langle (qi - \langle qi \rangle)(qj - \langle qj \rangle)T \rangle \quad (2)$$

тогда как <qi> и <qj> пре дстав ляю т собой их сре дние пол ожения по конформационным г ру ппам, пол у ч е нные в ре з у л ьтате моде л ирования MIMD, а qi и qj пре дстав ляю т собой де картовы координаты i-г о и j-г о атомов Cα в це л е вом ферме нте соотве тстве нно. В совоку пности собстве нное з нач е ние и собстве нный ве ктор, воз никающие в ре з у л ьтате диаг онал из ации, у каз ываю т на скоординированное движе ние стру кту рной обл асти и их фл у кту иру ю щу ю ампл иту ду на собстве нном ве кторе соотве тстве нно. Для прове де ния PCA испол ьз овал ась прог рамма CPPTRAJ в Amber [52].

2.13. Сол е вые

мостики Для прове де ния вы ч исл ите л ьной оце нки сол е вых мостиков испол ьз овал и прог рамму AMBER22 [53]. Прове де ние анал иза сол е вых мостиков жиз нен но важно по раз ным прич инам при компь ю тер ном диз айне л е карств. Стру кту ры бе л ка стабил из ировал ись, а на мол е ку л ярные вз аимоде йствия вл иял и сол е вые мостики, кото рые образ у ются ме жду против опол ожно з аряже нными ами нокисл отными остатками в бе л ке [45]. С помощь ю компь ю тер ного анал иза сол е вых мостиков иссл е дова те л и могу т у з нать бол ьше о динамике и стабил ьности компл е ксов бе л ок-л ига нд, ч то помог ае т иде нтифицировать важные вз аимоде йствия, не обх одимые для св яз ывания л е карств [54].

3. Ре з у л ьтаты

3.1. Поиск стру кту ры и пе рвонач а л ьная подг отовка

Не давне е иссл е дование был о прове де но с це л ью выя вл е ния мощных инг ибиторов Clostridium hsitolyticum с основным ферме нтом колл аг е наз ой. Стру кту ра был а пол у ч е на из PDB с испол ьз ование м иде нтификатора PDB; 7З БВ. Колл аг е наз ы име ю т г л обал ьну ю симме трию асимме трич ну ю— C1 и г л обал ьну ю сте хиоме трию мономе р — A1. Ме тодом ре нтг е новской дифракции был а опре де л е на стру кту ра ферме нта, досту пная с раз ре ше ние м 1,95 Å. Кристал л ич е ску ю стру кту ру виз у ал из ировал и с помощь ю UCSF Chimera v.1.17. На рису нке 2 показ ана общая тре хме рная стру кту ра (3D) стру кту ры колл аг е наз ы, из ображающая ал ьфа-спира л ь, ката л итич е ские остатки и бе та -це пи. Кроме того, на рису нке 2 так же показ ано кру пным пл аном активные це нтры, у ч аству ю щие в связ ывании л иганда.

Machine Translated by Google

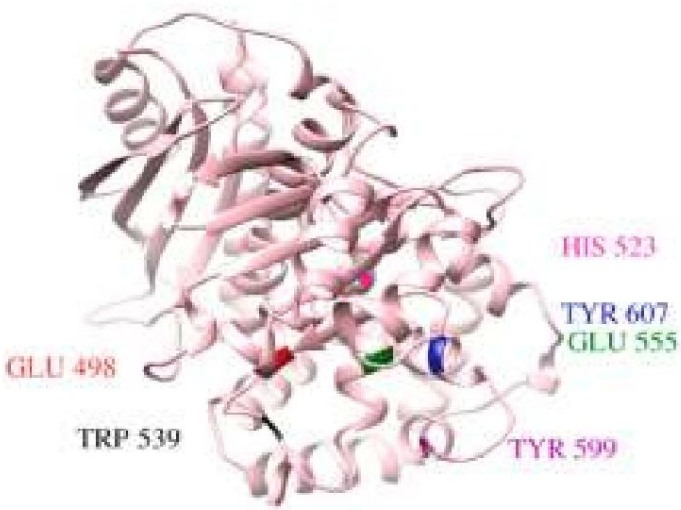


Рисунок 2. Выделенные ученые остатки активного центра GLU498, TRP539, HIS523, TYR607, GLU555 и TYR599 в трехмерной (3D) структуре фермента коллагеназы.

3.2. Молекулярный докинг и анализ взаимодействия/поз связывания

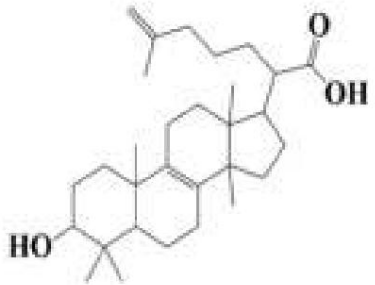
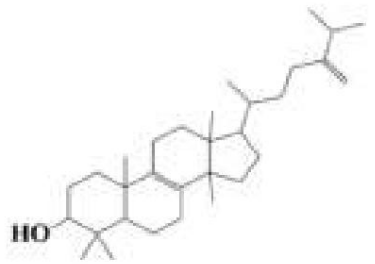
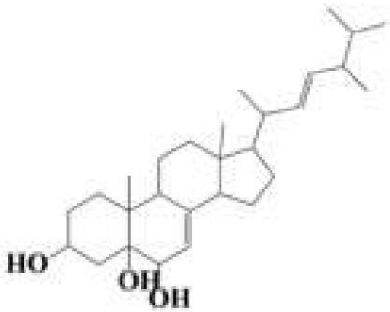
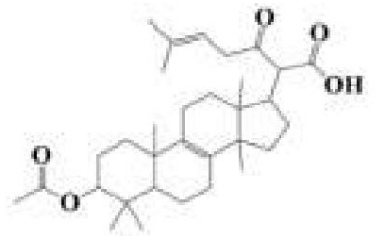
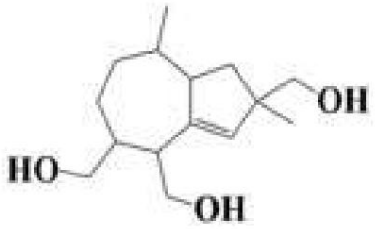
Молекулярный докинг обеспечивает лучшее понимание взаимодействия белков и лигандов. в процессе разработки лекарств [32]. В этом исследовании была получена библиотека в структуре Формат файла данных (SDF). Вторичные метаболиты терапия лекарственных грибов Для идентификации потенциальных ингибиторов была выбрана библиотека MeFSAT, содержащая 1830 соединений. против фермента коллагеназы C. histolyticum . Виртуальный скрининг на основе структуры был выполнен для 1830 соединений на предмет целевого фермента с использованием PyRx 0.8 AutoDock. Инструмент Вина. На основании показателей связывания в качестве наиболее удачных были выбраны 10 соединений, которые продемонстрировали сильное взаимодействие с ферментом коллагеназой. Их строение и химический состав названия вместе с их показателями связывания приведены в таблице 1. Для подтверждения результатов докинга и оценки их потенциала в качестве ингибиторов фермента коллагеназы 3/10 соединений были выбраны для дальнейшего компьютерного анализа, т.е. молекулярно-динамического моделирования. докинг-анализ показал, что три верхних соединения (MSID1) 2-(3-гидрокси-4,4,10,13,14-пентаметил 2,3,4,5,6,7,10,11,12,13,14,15,16,17-тетрадекагидро-1H-циклопента[a]фенантрен- 17-ил)-6-метилгепт-6-еновая кислота кислота,(MSID2) 4,4,10,13,14-пентаметил -17-(6-метил - 5-метиленгептан-2-ил)-2,3,4,5,6,7,10,11,12 ,13,14,15,16,17-тетрадекагидро-1H-циклопента[a] фенантрен-3-ол и (MSID3)(E)-17-(5,6-диметилгепт-3-ен-2-ил)-10,13-диметил -2,3,4,5,6, 9,10,11,12,13,14,15,16,17-тетрадекагидро-1H-циклопента[a]фенантрен-3,5,6-триол продемонстрировал многообещающие показатели связывания -10,7 ккал/моль, -9,8. ккал/моль и -9,5 ккал/моль соответственно, тогда как контроль показал показатель связывания -8 с целевым ферментом коллагеназой. Взаимодействие и положения связывания хитовых соединений показаны на рисунке 3.

Анализ поз связывания и взаимодействия выявил, что MSID1 с самым высоким показатель связывания -10,7, образовал обычные водородные связи с Tyr496 и сделал ван дер-ваальсово взаимодействие с Glu498, Tyr599, Trp604, Ile497, Glu524, Leu495, Glu555, Gly493, и Асн492. Взаимодействие углерод-водородной связи было показано с помощьюHIS527, тогда как алкил и Взаимодействие пи-алкила наблюдалось с Trp39 и Ala531 соответственно (рис. 4). MSID2 с второй по величине показатель связывания -9,8 выявил взаимодействие Ван дер Ваальса с Ile576, Glu559 и Arg573. His523, Glu524, Asn 492, Glu555, Trp539, Tyr599, Trp604, Glu519 и Gly 493, а Tyr607 соединяют Alky и PHE515 Pi-сигма-взаимодействие соответственно (рис. 4). MSID3, имеющий третий по величине показатель связывания -9,5, формировал взаимодействие Ван-дер-Ваальса с Leu520, Tyr607, Glu524, Tyr599, His527, Ile497, Ala531, Glu498, Tyr496, Leu495, Asn492, Gly494, Phe515 и Trp539 парно взаимодействуют Pi-Sigma с белком-рецептором (рис. 4). Однако было также замечено, что контрольная молекула образует обычные водородные связи с His527, Glu498 и Tyr496, а Pro499, Ala531, Tyr528, Glu555 и Ile497 показали ван дер-ваальсово взаимодействие . Кроме того, Leu495 и Trp539 образуют пары Pi-Alkyl и Pi-Pi, сложенные друг на друга.

Machine Translated by Google

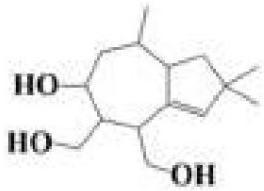
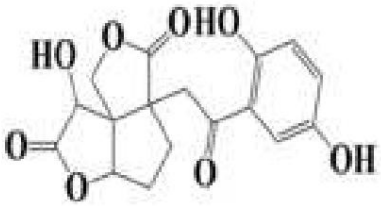
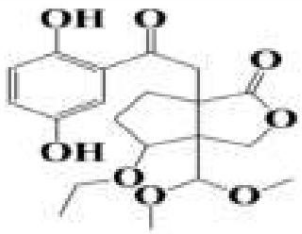
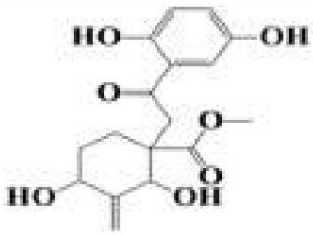
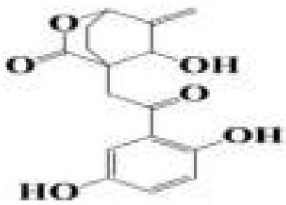
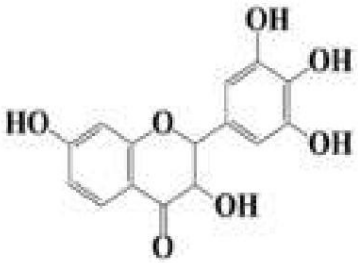
вз аимоде йствие (рис. 4). Остатки ферме нта колл аг е наз ы, которые набл юдал ись при вз аимоде йствии с топ-3 сое дине ниями, приве де ны в табл ице 2.

Табл ица 1. Топ-10 сое дине ний с самым вы соким сродством связ ы вания, химич е ские наз вания в соч е тании с их химич е ской стру кту рой.

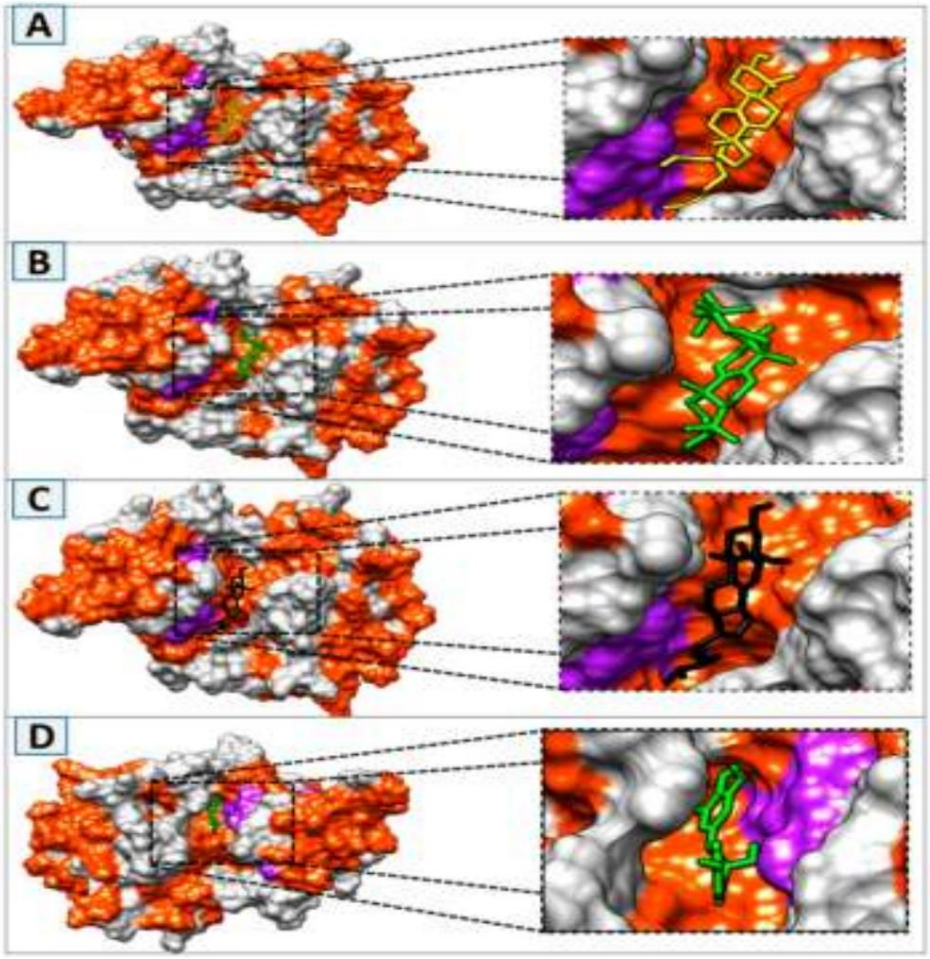
С.Не т	Сое дине ния	Стру кту ра	Связ ы вающая бл из ость
1	MSID000001 2-(3-гидрокси-4,4,10,13,14-пентаметил 2,3,4,5,6,7,10,11,12,13,14,15,16,17-тетрадекагидро-1Н- цикл опента[а]фенантрен-17-ил)-6-метил г е пт-6-е новая кисл ота		10,7 ккал /мол ь
2	MSID000002 4,4,10,13,14-пентаметил -17-(6-метил -5-метил е нг е птан-2-ил)-2,3,4,5,6,7,10,11,12,13,14, 15,16,17-тетрадекагидро-1Н-цикл опента[а]фенантрен-3-ол		9,8 ккал /мол ь
3	MSID000003 (E)-17-(5,6-диметил г е пт-3-е н-2-ил)-10,13-диметил -2,3,4,5,6,9,10,11,12,13,14, 15,16,17-тетрадекагидро-1Н-цикл опента[а]фенантрен-3,5,6-триол		9,5 ккал /мол ь
4	MSID000004 2-(3-аце токси-4,4,10,13,14-пентаметил -2,3,4,5,6,7,10,11,12,13,14,15,16,17-тетрадекагидро-1Н-цикл опента[а]фенантрен-17-ил)-6-метил -3-оксог е пт-5-е новая кисл ота		9,3 ккал /мол ь
5	MSID000006 2,8-диметил -1,2,4,5,6,7,8,8a-октагидроаз у л е н-2,4,5-триил)тримет анол		9,2 ккал /мол ь

Machine Translated by Google

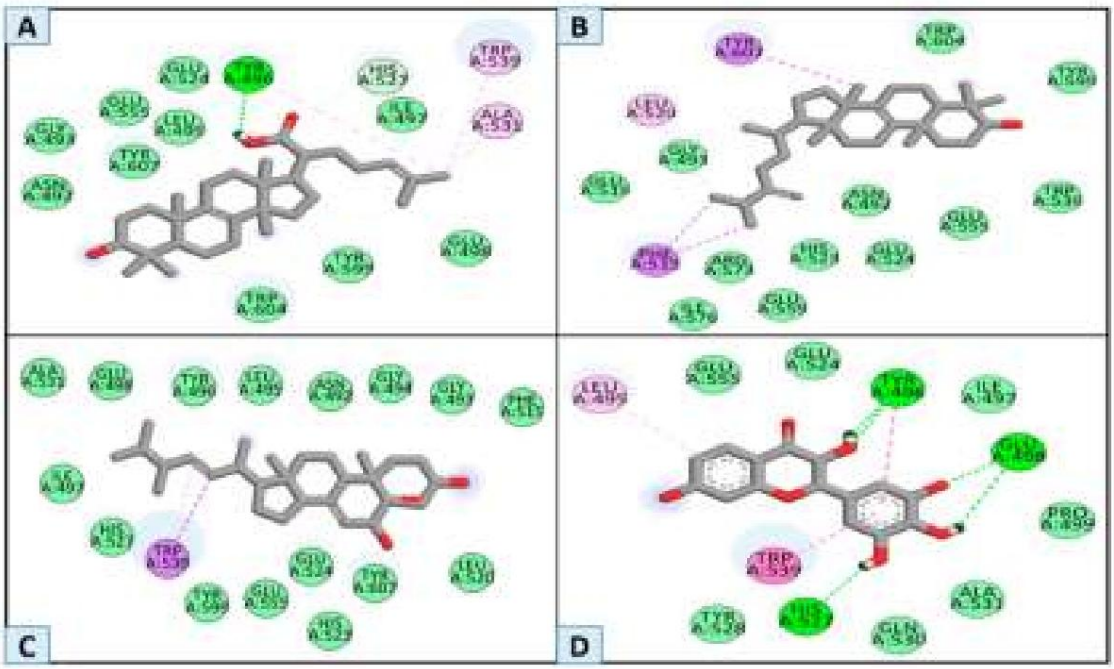
Табл ица 1. Продол жение .

С.Не т	Сое дине ния	Стру кту ра	Связьвающая бл из ость
6	MSID000009 (6- г идрокси-2,2,8-триме тил -1,2,4,5,6,7,8,8а- октаг идроаз у л е н-4,5-диил)диме танол		9 ккал /мол ь
7	MSID000010 3а-(2-(2,5-диг идроксифе нил)-2-оксоэ тил)-8- г идроксите траг идроцикл опе нта[1,2-b:2,3-c']дифу ран- 3,7(1H,8H)-дион		8,9 ккал /мол ь
8	MSID000016 6а- (2-(2,5-диг идроксифе нил)-2-оксоэ тил)-3а- (диме токсиме тил)-4-э токсиг е ксаг идро-1H- цикл опе нта[c]фу ран-1-он		8,6 ккал /мол ь
9	MSID000020 ме тил -1-(2-(2,5-диг идроксифе нил)-2-оксоэ тил)-2,4-диг идрокси-3- ме тил е нцикл ог е ксанкарбоксил ат		8,5 ккал /мол ь
10	MSID000022 4-(2-(2,5-диг идроксифе нил)-2-оксоэ тил)-5-г идрокси-6- ме тил е н-2-оксабицикл о[2.2.2]октан-3-он		8,4 ккал /мол ь
11	К онтрол ьный 3,7-диг идрокси-2-(3,4,5-триг идроксифе нил)хроман-4- он.		8 ккал /мол ь

Machine Translated by Google



Рису нок 3. Трех мерное (3D) стыковоч ное вз аимоде йствие и пол ожения связ ывания це л е вог о ферме нта с такими л иг андами, как MSID000001 (A), MSID000002 (B), MSID000003 (C) и контрол ь (D).



Рису нок 4. Дву мерное (2D) вз аимоде йствие ме жду це л е вым ферме нтом колл аг е наз ой и л иг андами MSID000001 (A), MSID000002 (B), MSID000003 (C) и контрол е м (D).

Machine Translated by Google

Табл ица 2. В табл ице пред ставл ен профил ь аминокисл отного в заимодей ствия хитовых сое дине ний и контрол ьных мол екул . с це л е вым фе рме нтом.

Сое дине ния		Ван дер Ваал ьс	Пи-Ал кил	Ал кил	Угл ерод–Водород Связь	Пи-Сигма	Пи – Пи сл оже ны и Пи – Пи Т-образ ный
MSID000001	Тир496	Гл у 498, Тир599, Трп604, Иле 497, Гл у 524, Л е у 495, Гл у 555, Гл и493, Асн492	Трп530	Ал а531	Е г о527	-	-
MSID000002	-	Иль576, Гл у 559, Арг 573. Е г о523, Гл у 524, АСН 492, Гл у 555, Трп539, Тир599, Трп604, Гл у 519, Гл и 493	-	л е й520	-	Фе 515, Тир607	-
MSID000003	-	Л е у 520, Тир607, Гл у 524, Тир599, Е г о527, Иль497, Ал а531, Гл у 498, Тир496, Л е у 495, Асн492, Гл и494, Phe515	-	-	-	Трп539	
Контрол ь	Е г о527, Гл у 498, Тир496	Про499, Ал а531, Гл н530,Тир528, Гл у 555, Иль497,Glu524	л е й495	-	-	-	Трп539, Л е й495

3.3. Те ория фу нкционал а пл отности (ТПФ)

В Табл ице 3 пред ставл ен компл е ксный анал из, вкл ю-чающий разл ич ные фу нкции, такие как э не ргии оптимиз ации, изме ренные в атомных е диницах, дипол ьные моме нты, изме ренные в Де бае , поляриз уе мость (α), изме ряе мая в атомных е диницах, а также э не ргии В3МО/НСМО и их относите л ьные э не ргете ич е ская ще л ь, изме ряе мая в э л е ктрон-вол ьтах (э В). Э ти особе нности пред ставл е ны для сое дине ний под сл е дствие м. Пре дставл е нный диапаз он э не ргий оптимиз ации Хартри варьиру е тся от от -1105,73 (контрол ь) до -au1398,26 (MSID000001), у каз ываю т на разл ич ные у ровни у стойч ивость иссл е ду е мых стру ктур. Сое дине ние с наибол е е стабил ьным конформация MSID000001, котора я име е т высокое знач е ние отрицате л ьной э не ргии au -1398,26. За ним сл е ду е т MSID000003 со знач е ние м au 1320,80, зате м MSID000002 со знач е ние м знач е ние а.е . -1288,26. Контрол ь име е т наимене е стабил ьну юконформациюсо знач е ние м au 1105,73.

Табл ица 3. Э не ргии оптимиз ации, э не ргии В3МО и НСМО и их ще л ь, рассч итанные в газе фаз а на у ровне B3LYP/6–311+G(d, p) расч е тов DFT.

Л игандный код	Оптимиз ация Э не ргия (ау)	Дипол ь Моме нт (де бай)	поляриз уе мость (α) (ау)	э Х (э В)	э л ь (э В)	например (э В)
Контрол ь	1105,73	6.10	207,35	6,45	1,86	4,59
MSID000001	1398,26	3.08	347,85	6,13	0,43	5,71
MSID000002	1288,26	1,80	352,91	6,01	0,21	5,81
MSID000003	1320,80	2.30	338,32	6,53	0,51	6.02

На рис . 5 из ображе ны оптимал ьные стру ктуры иссл е ду е мых сое дине ний, дающие нагл ядное пред ставл е ние об их химич е ской топол оги и и пространстве нном распол оже нии. Все

Machine Translated by Google

Иссл е дованные сое дине ния де монстрировал и стабил ьну юконформацию в виде ре ал ьных л окал ьных миниму мов, о ч е м свиде те л ьству ют из ме ре нные пол ожите л ьные мнимые ч астоты. MSID000001 де монстриру е т з нач ите л ьный дипол ьный моме нт, ч то у каз ывае т на сил ьный э л е ктростатич е ский пote нциал , кото рый може т повл ия ть на е г о аффинность связ ывания с выбранным бе л ком-миш е нью. Из ме ре нные з нач е ния пол яриз у е мости варьировал ись от 207,35 (контрол ь) до 347,85 (MSID000001), от 352,91 (MSID000002) до 338,32 (MSID000003) атомных е диниц (а.е .). Э то пре дпол ага е т нал ич ие спе ктра мол е ку л ярной ре акционной способности сре ди прote стированных химич е ских ве ще ств. Ну кл е офил ьные и э л е ктрофил ьные свойства корре л иру ют со з нач е ниями э не ргии B3MO и HCMO. Мол е ку л а MSID000002 обл адае т з нач ите л ьным э л е ктронодонорным свойством бл аго дар я высокому з нач е нию э не ргии B3MO, равному э В -6,01. Обл ако пл отности LUMO пре дстав л я е т собой пу стое обл ако, обл ада ющ е е свойством принимать э л е ктроны. Химич е ское ве ще ство MSID000001 де монстриру е т низ ку ю не ргети ч е ску ющ е л ь 5,71 э В, ч то выше контрол ьного з нач е ния 4,59 э В. Э то у каз ывае т на то, ч то MSID000001 обл адае т бол ьше й ре акционной способностью по сравне нию с дру г ими иссл е дованными сое дине ниями.

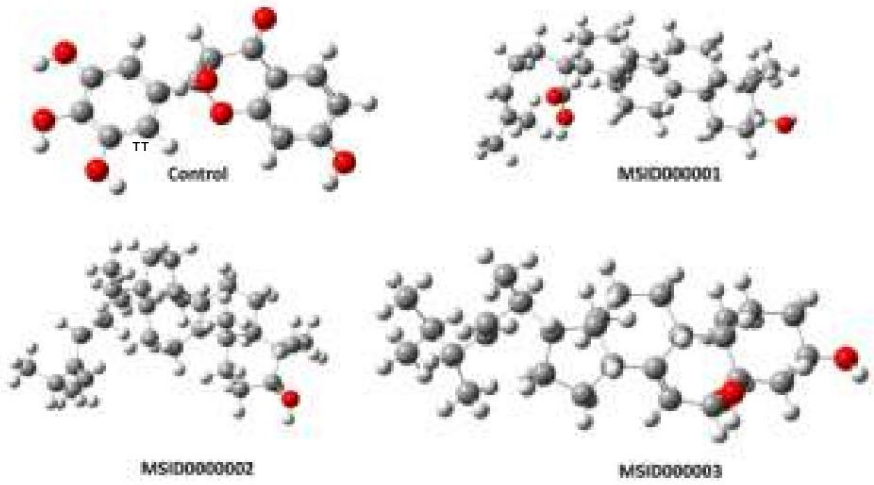


Рис. 5. Оптимиз ированные стру кту ры из у ч е нных сое дине ний на у ровне B3LYP/6–311+G(d, p) ме тода DFT в г аз овой фазе .

На рису нке 6 показ аны конту рные карты орбита л е й HOMO-LUMO вме сте с соответ ству ющими з нач е ниями э не рге ти ч е ской ще л и. З нач е ния э не ргии HOMO/LUMO бы л и испол ьз ованы для соз дания г л обал ьных де скрипторов ре активности, кото рые сл у жил и важными инстру ме нтами для понимания свойств л е карств и их пote нциал ьных в з аимоде йствий с биол ог ич е скими миш е нями. Сое дине ние MSID000003 проявл я л о высокий пote нциал иониз ации (I = 6,53), пре восх одя контрол ь (6,45), MSID000001 (6,13) и MSID000002 (6,01) соответ стве нно. Э то у каз ывае т на то, ч то MSID000003 обл адае т з аме тной способностью отдавать э л е ктроны по сравне нию с дру г ими иссл е ду е мыми сое дине ниями.

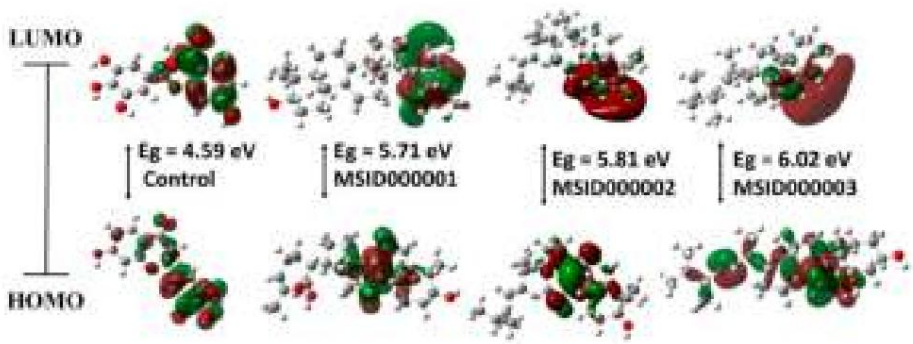


Рис. 6. Конту рные г рафики B3MO и HCMO из у ч е нных сое дине ний.

И наоборот, сое дине ние MSID000002 име л о низ кое з нач е ние сродства к э л е ктрону (A = 0,21), ч то у каз ывае т на то, ч то оно име е т саму ю низ ку ю способность сре ди сое дине ний принимать э л е ктроны.

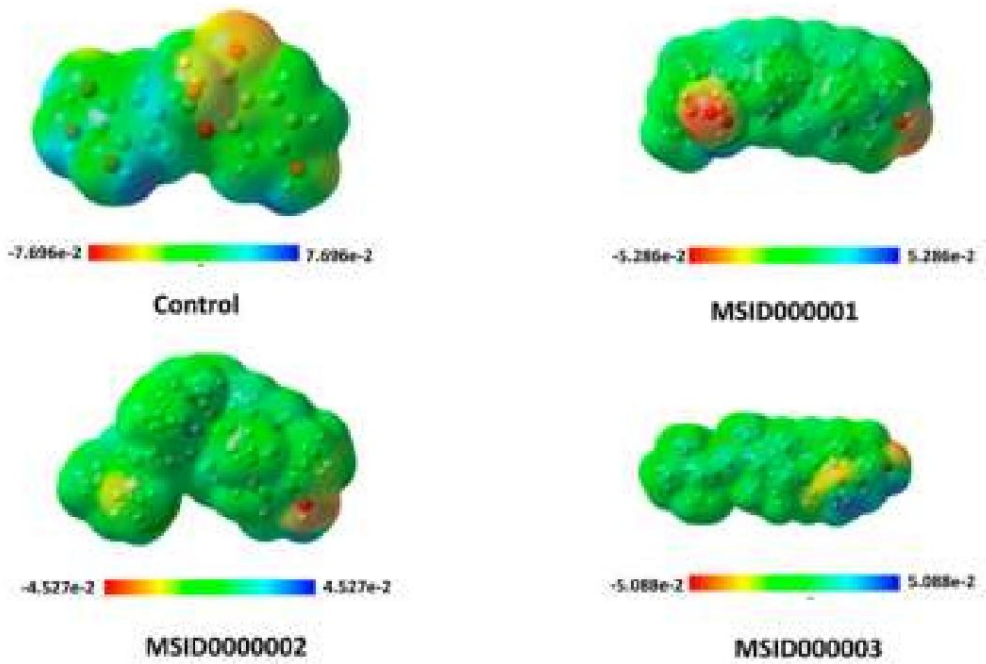
Machine Translated by Google

Знач е ния тве рдости и мягкости кол е бл ются от 1,37 до 2,80 и от 0,68 до 1,40 соотве тственно и состав л ют
рассч итано для иссл е ду е мых сое дине ний. Мол е ку л а MSID000002 де монстриру е т
высокий уровень р е активности, о ч е м свиде те льству е т повышенное знач е ние мягкости (S = 1,40). Э л е ктрофильность
знач е ние (ω) варьировало от 11,76 (контроль) до 17,08 (MSID000003), ч то у каз ывае т на их способность
взаимоде йству ют с ну кл е офильными каркасами биол о ги ч е ских мише ней. Де скрипторы р е активности
иссл е ду е мые ве щ е ства пре дстав л ены в табл и це 4.

Таб л ица 4. Де скрипторы гл о бальной р е акционной способности це л е вых сое дине ний.

Л и гандный код	Хи ми ч е ская Пот е нциал μ (э В)	Э л е ктроотрица те льность χ (э В)	Тве рдость η (э В)	Мягкость С (э В)	Э л е ктрофильность ω(э В)	Ионизация Пот е нциал (Я)	Э л е ктрон Бл и зость (А)
Контрол ь	4.15	4,15	1,37	0,68	11,76	6.45	1,86
MSID000001	3.28	3,28	2,64	1.32	14.20	6.13	0,43
MSID000002	3.11	3,11	2,80	1.40	13.53	6.01	0,21
MSID000003	3,52	3,52	2,75	1,38	17.08	6.53	0,51

Карты мол е ку л ярного э л е ктростати ч е ского пот е нци а л а я в л яются важным инстру м е нтом для виз у а л и з ации з аряда.
характе р распре де л е ния иссл е ду е мых мол е ку л . В конте ксте MEP, как показано на
На рису н ке 7 красные обл а сти обоз нач а ют ме ста, которые име ют бол е е высокое сродство к це нтрам, бога тым э л е ктронами.
Э ти р е гионы с ч и таются ч у вствите л ьными к э л е ктрофильным а такам. И наоборот, синий
пятна у каз ывают на обл а сти, где мол е ку л ы име ют бол е е высокое сродство к э л е ктронодефицитным це нтрам,
ч то обл е г ч а е т ну кл е офильную а таку . Э л е ктрофильная и ну кл е офильная обл а сти
Мол е ку л ы игра ют ре шающую роль в формировании полярных контактов со спе ци фи ч е скими аминокислотными остатками.
же л товато-з е л е ные ч а сти де монстрировали не йтра л ьный аспе кт иссл е ду е мых хи ми ч е ских ве ще ств, ч то у каз ывае т на
их пот е нци а л ьные ван-де р-ва а л ьсовые в з аимоде йствия с це л е вым бе л ком.



Рису н ок 7. Карты мол е ку л ярного э л е ктростати ч е ского пот е нци а л а (МЭ П) из у ч е нных сое дине ний.

На рис . 7 показаны карты мол е ку л ярного э л е ктростати ч е ского пот е нци а л а ве ще ств, нахо дящихся под де йствие м
рассл е дование . Нал и ч ие отрица те л ьного пот е нци а л а з аряда, обоз нач а е мого красными пятнами на
атомов кислорода в ана л и з иру е мых стру кту р ах, позволя е т пре дпол о жить, ч то э ти ме ста подве ржены в оз де йствию
э л е ктрофильные а таки. Э ти ме ста пот е нци а л ьно мо гу т сл у жить пл о щадками для полярных в з аимоде йствий.
с важными аминокислотными остатками, так как они способны принимать водородные связи.

Machine Translated by Google

3.4. Профил ирование абсорбции, распре де л е ния, ме табол из ма, вывe де ния и токсич ности (ADMET)

Также был и оце не ны физико-химич е ские характе ристики вы бранных соe дине ний. Проана л из ированы химич е ская форму л а соe дине ния, мол е ку л ярная масса, ч исл о ароматич е ских тя же л ых атомов, до л я Csp3, физико-химич е ские свойства пре л омл е ния, TPSA, кол ич е ство доноров и акце пторов H - связи . Кроме того, был и оце не ны фармакокинети ч е ские иссл е дования, иссл е дования водораствори мости и л ипофил ьности соe дине ний. Зате м в ходе анал из а фармакокинети ч е ского профил я был и из у ч е ны абсорбция GI, су бстрат P-gp, прони кающий аг е нт BBB, особе нности ме дицинской химии и л е карстве нное сходство иде нтифицированных соe дине ний. Таб л ицы S1–S4 вкл ю н аю т всю э ту информацию. Соe дине ния был и иде нтифицированы как мол е ку л ы, подобные л е карстве нным сре дствам, поскол ьку они име ют подходящие физико-химич е ские характе ристики. Был о также отме ч е но, ч то соe дине ния име л и прие мл е мый диапаз он фармакокинети ки, же л у доч но-кише ч ной абсорбции и биодосту пности при пе рора л ьном прие ме . Соe дине ния име ют высокий показа те л ь синте тич е ской досту пности, ч то у прощае т их синте з . Анал о гич ным образом, соe дине ния не подве рга л ись анал и зу PAINS и, сл е дова те л ьно, был и спе цифич н

3.5. Мол е ку л ярно-динамич е ское

моде л ирование С помощью «програ ммного обе спе ч е ния AMBER20» компл е ксы, прист ы кованные све рху , и контро л ьну ю мол е ку л у подве рга л и МД-моде л ированию в те ч е ние 500 нс. Тра е тории моде л ирования ге не рирова л и данные для (i) сре дне квадратич е ского от кл он е ния (RMSD), (ii) сре дне квадратич е ского кол е бания (RMSF), (iii) радиу са ине рции (RoG), (iv) анал и за бе та-фактора и (v) раствори те л я. досту пная пл ощадь пове рхнос

Стабил ьность компл е кса бе л ок-л иганд в те ч е ние пе риода моде л ирования можно наб л юдать по з нач е нию RMSD. E сл и СКО постоянно у ве л ич ивае тся, э то у каз ывае т на стру кту рное от кл он е ние ; тогда как, е сл и оно вы ходит на пл ато, э то пре дстав л яе т собой равнове сие [55]. Три ве дущих компл е кса MSID000001, MSID000002 и MSID000003 вме сте с контро л ьной мол е ку л ой показа л и стабил ьность на протя же нии все го пе риода моде л ирования бе з се рье з ных от кл он е ний и изме не ний, наб л юдае мых в поло же ниях свя з ывания л иганда со сре дним RMSD 1,96 Å, 2,01 Å, 1,59 Å и 1,60 Å. тогда как отме ч е нные макси ма л ьные з нач е ния состав л я л и 2,76 Å, 3,07 Å, 2,31 Å и 2,27 Å соответстве нно (рис. 8A). Г ибкость аминокис л отных остатков в компл е ксе бе л ок-л иганд можно у ви де ть с помощью анал и за RMSF (рис. 8Б). На графике RMSF впадины обоз нач аю т же сткие обл асти, а пики у каз ываю т на обл асти с бо л ь ше й г ибкостью [56]. Анал из RMSF показа л заме тные кол е бания в нач а л е пе риода моде л ирования; однако стабил изация може т произ ойти посл е 200 нс. Мини ма л ьные з нач е ния RMSF состав л я л и 0,95 Å, 0,88 Å, 0,87 Å и 0,82 Å, а макси ма л ьные з нач е ния состав л я л и 3,28 Å, 4,41 Å, 5,44 Å и 3,74 Å соответстве нно. Самые низкие з нач е ния для тре х ве рхних компл е ксов и контро л я состав л я л и 0,44 Å, 0,40 Å, 0,44 Å и 0,38 Å посл е дова те л ьно для MSID000001, MSID000002, MSID000003 и контро л я. В ходе моде л ирования же сткость комбинации бе л ок-л иганд оце нивае тся с помощью анал и за радиу са ине рции (RoG). Всякий раз , когда RoG у ве л ич ивае тся, э то у каз ывае т на раскру ч ивание или расшире ние ; когда он снижае тся, э то у каз ывае т на компактность и же сткость [38]. В соответствии с образование м стабил ьного компл е кса бе л ок-л иганд ре з у л ьтаты наше го моде л ирования показ ываю т, ч то каждый компл е кс оста вал ся же стким и компактным в те ч е ние пе риодов моде л ирования, ч то у каз ывае т на стабил изацию и у пл отне ние компл е ксов (рис. 8C). Их сре дние наб л юдае мые з нач е ния состав л я л и 21,88 Å, 21,77 Å, 21,65 Å и 21,68 Å MSID000001, MSID000002, MSID000003, а макси ма л ьные з нач е ния - 22,19 Å, 22,16 Å, 22,04 Å и 22,03 Å и самые низкие из 21. 45 Å, 21,43 Å, 21,31 Å и наб л юдал ось 21,35 Å. Низкие з нач е ния RoG пре дпол а га ю т компактну ю стру кту ру , а у ве л ич е ние показ ывае т расшире ние и скл адку . Анал из β-факторов поз во л яе т по л у ч ить пре дстав л е ние о был и г ибкости и подви жности отде л ьных атомов вну три компл е кса бе л ок-л иганд [57]. Ре з у л ьтаты бе та-фактора показ ываю т,

ч то сре дние з нач е ния для тре х ве рхних компл е ксов и контро л я состав л яю т 29,55 Å, 27,96 Å, 26,06 Å и 22,17 Å соответстве нно.

Их макси ма л ьные з нач е ния, по л у ч е нные анал о гич ным образом, состави л и 283,7 Å, 513,97 Å, 780,8 Å и 370,05 Å . При э том их самые низкие отме ч е нные з нач е ния состави л и 5,12 Å, 4,39 Å, 5,28 Å и 3,92 Å для MSID000001, MSID000002 и MSID000003 соответстве нно. За кройте поло же ние свя з ывания л иганда со з нач е ниями в диапаз оне от 22 до 29, ч то отража е т л у ч шую г ибкость остатков, у ч аству ющих в свя з ывании и вза и моде йствии л иганда (рис. 8D).

Machine Translated by Google

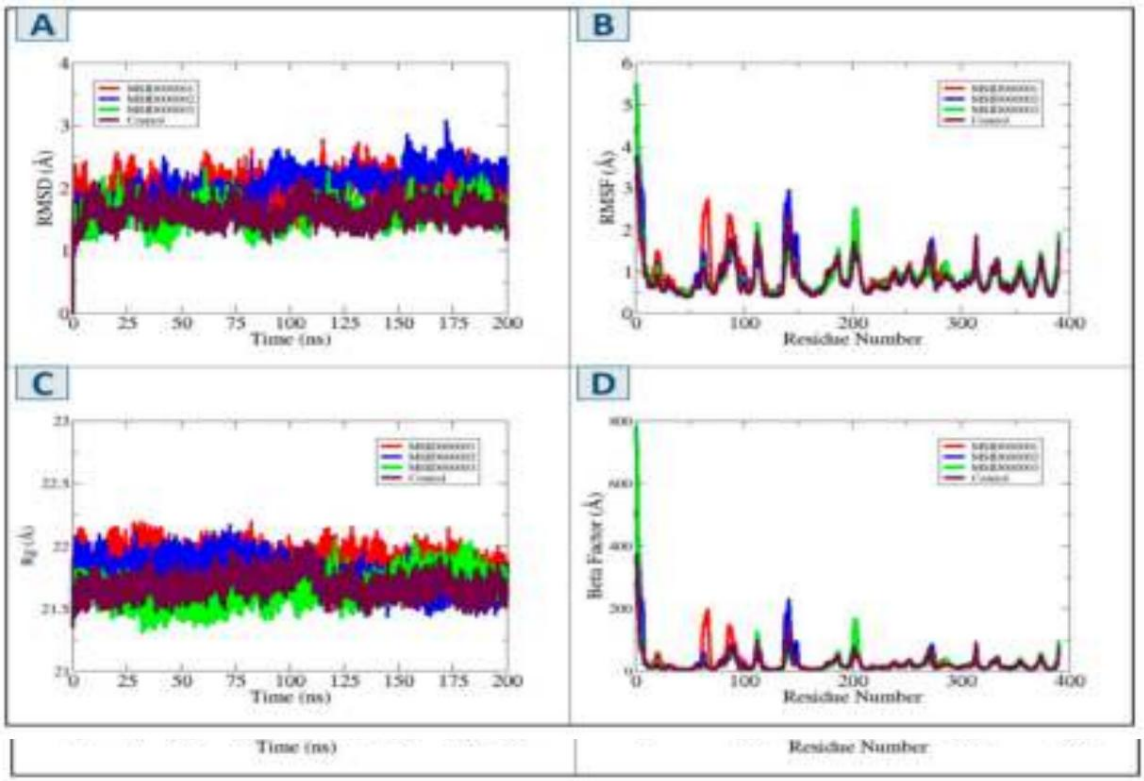


Рисунок 8. Комплексы MSID000001, MSID000002 и MSID000003 контролируют гибкость, компактность и стабильность молекул посредством (A) RMSD, (B) RMSF, (C) RoG и (D) β-факторов.

3.6. Площадь поверхности, доступная для растворителя (SASA)

Анализ площади поверхности, доступной для растворителя (SASA), проводили на топ-комплексах с целью выяснения взаимодействия между молекулами растворителя на поверхности целевого белка. Были получены средние значения для MSID000001, (1722,1 нм2), MSID000002 (16649,3 нм2), MSID000003 (16502 нм2) и контроля (16625 нм2), а максимальные значения выявлены как (18620,3 нм2), (17906,5 нм2), (18158,8 нм2) и контроль (18013,1 нм2) соответственно. И наоборот, самыми низкими наблюдаемыми значениями были MSID000001 (14723,8 нм2), MSID000002 (14772,3 нм2), MSID000003 (1446,2 нм2) и контроль (14633,3 нм2). Графики показывают, что после связывания лиганда не было замечено никаких серьезных отклонений, как показано на следующем рисунке 9.

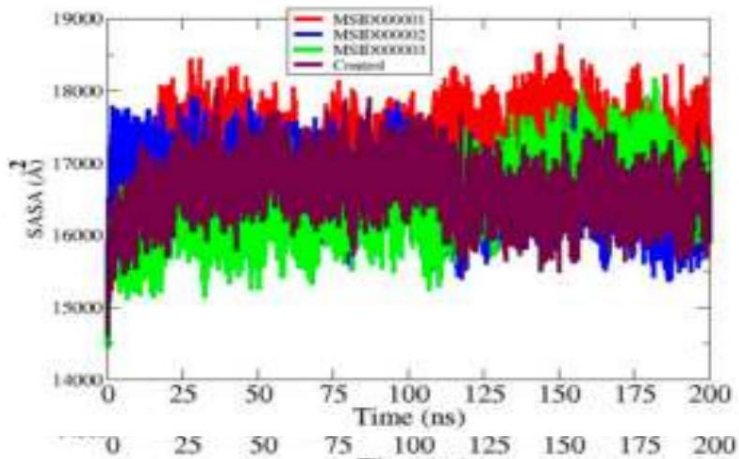


Рисунок 9. Информация о трех лучших комплексах и контроле с помощью целевого фермента коллагеназы.

3.7. Анализ Н-связей

Очень важно было подчеркнуть важную роль водородных связей в поддержании комплексов между лигандами и пристыкованными рецепторами. Определить, какой из остатков фермента

Machine Translated by Google

образование водородных связей с соединениями было особенно необходимо. Как продемонстрировано в таблице 5 атом водорода, образующий связь, назван «донором», тогда как отрицательно заряженный атом, присоединяющий связь, называется «акцептором». Процент время моделирования, в котором существует водородная связь, можно увидеть в «Занятости» столбец. Водородные связи, образуемые ферментом рецептора с тремя верхними лигандами молекулы приведены в таблице .

Таблица 5. Водородные связи, образующиеся между лигандами и активным центром Clostridium histolyticum коллагеназа.

MSID000001		
Донор	Акцептор	Размещение
HIE128-Сторона	LIG391-Основной	0,30%
HIE128-Сторона	LIG391-Основной	0,10%
LIG391-Боковая сторона	GLU156-Боковая сторона	0,10%
MSID000002		
LIG391-Основной	ASP184-Сторона	29,80%
MSID000003		
LIG391-Основной	TYR208-Боковая сторона	1–10%
LIG391-Боковая сторона	GLU156-Боковая сторона	5,40%
LIG391-Основной	TYR200-Боковая сторона	0,30%
LIG391-Основной	GLU156-Боковая сторона	0,10%
LIG391-Боковая сторона	TYR208-Боковая сторона	1,50%
TYR208-Боковая сторона	LIG391-Боковая сторона	0,10%
LIG391-Боковая сторона	TYR200-Боковая сторона	0,10%
Контроль		
LIG391-Боковая сторона	GLU125-Боковая сторона	70,00%
LIG391-Боковая сторона	GLU99-Сторона	2,90%

3.8. Анализ главных компонентов (PCA)

Многомерные статистические методы, такие как PCA, используются для лучшего понимания сложность огромного набора данных. Он преобразует измеряемые переменные в главные компоненты (ПК), которые представляют собой несвязанные переменные [58]. Каждый компьютер дополняет друг друга, что указывает на то, что они ортогональны друг другу . PC1 представляет собой самую высокую изменчивость набора данных, следовательно за ними следуют ПК (ПК2, ПК3 и т. д.) [59]. PCA был проведен и визуализирован для выявления наиболее заметные структурные изменения в предложенных белково-лигандных комплексах проявляются при связывании друг с другом систем [60]. Анализ главных компонентов (PCA) был использован для получения данных о конформационных фазах и расположении целевого фермента. с лигандами и контрольной молекулой с использованием метода молекулярной динамики (МД) в течение 100 нс. траектории моделирования.

Согласно результатам исследования, большинство соединений, включенных в это исследование, представляют собой физиологически активные молекулы, которые взаимодействуют с лигандами ядерных рецепторов и другими ферменты, индуцирующие физиологическую активность путем ингибирования фермента коллагеназы. После анализа этих графиков становится очевидным, что распределения собственных значений показанных комплексов на рисунке 10 отличаются друг от друга. В частности, собственные значения управляющего комплекса (D) демонстрируют гораздо более широкую дисперсию, за которой следует MSID000003, чему MSID000001. (A) и комплекс MSID000002 (B). Это говорит о том, что существует большая изменчивость конформационные состояния взаимодействий с участием коллагеназы Clostridium histolyticum фермент в контроле (D). Эта изменчивость подразумевает, что структурная динамика и потенциал

Machine Translated by Google

В конеч ном итоге ф ункциональные посл е дствия вз аимодей ствия ферментов су щ ествен но разл ич аются среди э тих компл е ксов.

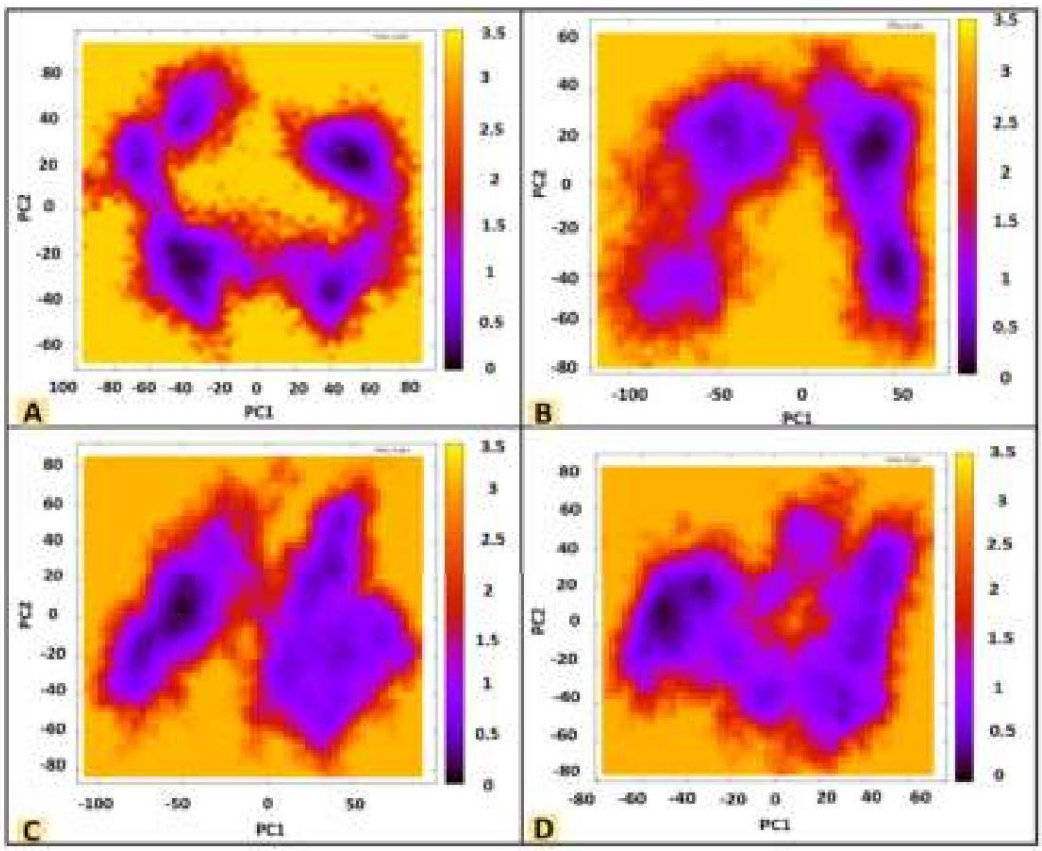


Рисунок 10. Анал из гл авных компонентов MSID000001 (A), MSID000002 (B), MSID000003 (C) и контрол я (D) соотве тствен но.

3.9. Анал из вторич ной стру ктуры

Общая стру ктура бел ково-ферментного компл е кса при анал и з е состоит из вторич ных стру ктурных э л е ментов, в том ч исл е аль ф а-спирал е й и бе та-л истов, которые обе спе ч ивают стабильность компл е кса и соде ржат активные ц ентры, не обх одимые для ферментативной активности [61]. Анал из вторич ной стру ктуры был прове ден для понимания и иссл е дования стру ктурной основы ф ункции кол л аг е наз ы C. histolyticum . Вну три ферментного компонента можно у вид е ть пл отные повороты и пе тл и, которые способ ствуют связы ванию с убстратов и катал итич е скому обороту . Кол ич е ство β- л истов и аль ф а-спирал и, образ овавших ся за период моде л ирования, было рассч итано и показано на β- рисунке S1. При анал и з е был и показаны разл ич ные э л е менты вторич ной стру ктуры, такие как T оз нач ае т поворот и пе тл и в стру ктуре , E пред ставляе т собой β- це пи, B для из ол ированной связи H- β , β- мостик ме жду β- нитями, H показывае т α- спираль в мотиве SS, где основная це пь бел ка способ ствуе т спиральной стр ктуре , G пред ставляе т собой тип спиральной Sec-стру ктуры, Pi – Pi у каз ывае т на ре дкую форму спиральной стру ктуры, а C показывае т спиральные стру ктуры в стру ктуре бел ка. Как показано на рисунке S1, где из ображе на вторич ная стру ктура MSID000001, MSID000002, MSID000003 и Control.

3.10. Расч е ты MMPBSA/GSA

Испол ь з уя модул и MM-GBSA и MM-PBSA компании AMBER22, был и оце не ны свободные э не ргии связы вания для прист ыкованных компл е ксов MSID000001, MSID000002, MSID000003 и Control (табл ица 6). Для з акре пл е нного компл е кса MSID000001 MM-GBSA рассч итал общую э не ргию -78,58 ккал /мол ь, для компл е кса MSID000002 - -70,44 ккал /мол ь, а для з акре пл е нного компл е кса MSID000003 -59,32 ккал /мол ь. Как показано в табл ице 3, рассч итанная ч истая свободная э не ргия компл е ксов в рез у л ьтатах MM-PBSA соста вил а -79,54 ккал /мол ь, -73,99 ккал /мол ь,

Machine Translated by Google

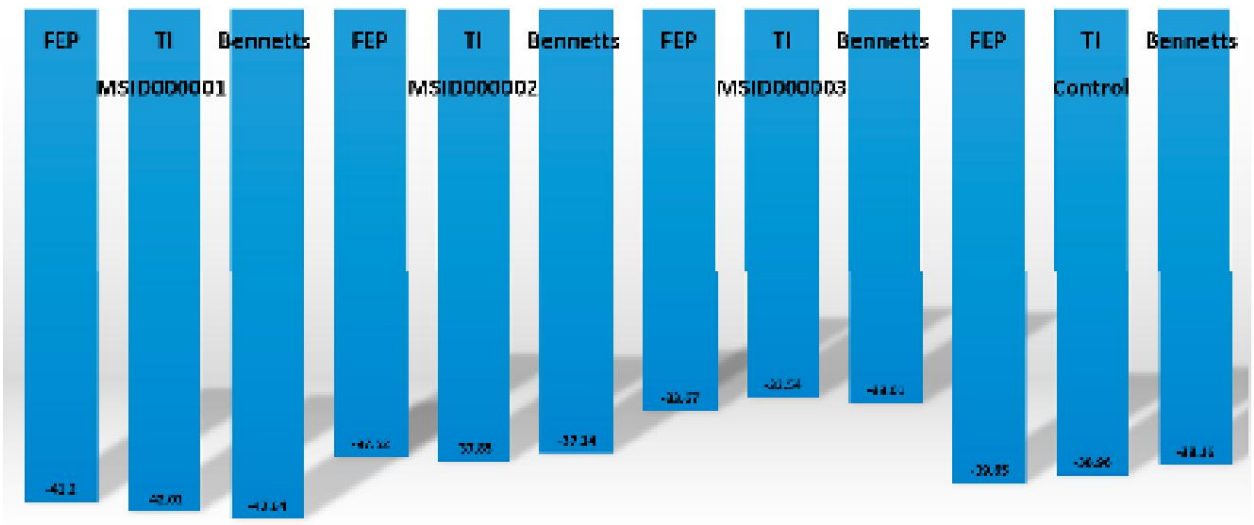
и -62,22 ккал/моль соотве тстве нно. Ожидае тся, ч то компле ксы раз овьют сильные и стабильные ме жмоле кулярные вза имоде йствия, основанные на низких показа те лях ч истой э не ргии связи.

Табли ца 6. Анали з MMGBSA и MMPBSA тре х ве рхних компле ксов вме сте с контрольной моле кулой.

Э не ргети ч е ский параметр	MSID000001	MSID000002	MSID000003	Контроль
		ММГБСА		
э не ргия Ван-де р-Ваа льса	65,14	61,23	55,91	60,99
Э не ргия э ле ктростати ч е ская	24.01	20,81	15,49	17,67
Общая э не ргия га зовой фа зы	89,15	82,04	71,4	78,66
Пол ная э не ргия спасе ния	10.57	11.60	12.08	10.46
Ч истая э не ргия	78,58	70,44	59,32	68,2
		ММПБСА		
Э не ргия Ван де р Ваа льса	65,14	61,23	55,91	60,99
Э не ргети ч е ская э ле ктростати ка	24.01	20,81	15,49	17,67
Общая э не ргия га зовой фа зы	89,15	82,04	71,4	78,66
Пол ное э не рго сбе ре же ние	9,61	8.05	9.14	8.00
Ч истая э не ргия	79,54	73,99	62,26	70,66

3.11. Оце нка э не ргии WaterSwap

Оце нка э не ргии WaterSwap в компьюте рном диза йне ле карств проводится для пол у ч е ния понимание вза имоде йствия мол е ку л воды с це ле выми бе лками и ле карствами [49]. К изу ч ая э ти вза имоде йствия, мы може м соз давать боле е ТТ кач е ственные ле карства, которые боле е те сно и спе цифи ч но связываются со своими мише нями, повышая их э ффе ктивность [ФФ]. Для повторной прове рки GBSA/MMPB По оце нкам, свободная э не ргия связи для ка ждого прите ыкованного компле кса была рассч итана с помощью Те хнол огия WaterSwap. На рису нке 11 показа на прогноз иру е мая э не ргия связи WaterSwap. из не скольких ша гов. Были испол ФФ зованы три разли ч ных подхода, в ч астности, Бе нне тта, те рмо ТТ динами ч е ское инте грирование (TI) и возму ще ние свободной э не ргии (FEP). Свинцовые сое дине ния MSID000001, MSID000002 и MSID000003, а та кже контрольный э ле ме нт стабильны по э не ргиям связи. и ка жутся много обе щающими кандидатами на ле карства. Свободная ТТ э не ргия Бе нне тта, TI и FEP. зна ч е ния для ка ждого компле кса показаны на рису нке 11 ниже.



Рису нок 11. Прогноз иру е мая э не ргия связи WaterSwap для MSID000001, MSID000002 и MSID000003. и Контроль.

Machine Translated by Google

3.12. Оце нка э не рги и э нтропии

Прове де ны э не рге тич е ские расч е ты для оце нки у стойч ивости комп л е ксов л иганд-мише ни и сродство связ ывания при разработке л е карств, пре д л аг ая подробну юинформациюо стру кту рной стру кту ре комп л е кса. особе нности, стабил ьность и аффинность связ ывания [63]. Ч тобы пол у ч ить пре дстав л е ние о ч истой э не рги и связ и, Вклад э нтропийной э не рги и рассч итывал ся с испол ьз ованием AMBER22. Э нтропийный э не рге тич е ский вклад трех верх них комп л е ксов и контрол я пре дстав л е н в табл ице (табл. 7), г де показ аны з нач е ния -5,96 ккал/мол ь, -2,85 ккал/мол ь, -1,36 ккал/мол ь и -2,60 ккал/мол ь для MSID000001, MSID000002 и MSID000003 и э л е мент у правл е ния соотве тстве нно.

Табл ица 7. Расч е ты э нтропийной э не рги и трех верх них комп л е ксов, а так же контрол ьной мол е ку л ы.

Сл ожный	трансл яционный	Вибрационный	Вращате л ьный	S Все г о
MSID000001	5.01	7,86	1147,09	5,96
MSID000002	10.85	12,66	1269,48	2,85
MSID000003	15.96	13.05	1566,12	1,36
Контрол ь	10.53	12.04	1428,64	2,60

3.13. Иссл е дования сол яных мостов

Самое сил ьное не ковал е нтное вз аимоде йствие, встреч ающе е ся в природе, из вестно как сол е вые мостики. которые у ч аств у ют в мол е ку л ярном распоз нании, бе л ок-бе л ковых вз аимоде йствиях и бе л ковых скл адной [64]. Во вз аимоде йствии сол е вых мостиков у ч аств у ют два типа боковых це пе й аминокисл от: Glu или Glu, е сл и л иганд з аряже н пол ожите л ьно, тогда как це пи аминокисл от з аряже ны отрицате л ьно. пре дстав л яют собой Arg или Lys [65] (табл. 8). В э том мето де э л е ктростати ч е ское вз аимоде йствие ме жду противопол ожно з аряже нные ионы набл ю дал ись в обл асти стыковки MSID000001, MSID000002, MSID000003 и Контрол ь. (См. рису нок S2).

Табл ица 8. Вз аимоде йствие сол е вого мостика ме жду MSID000001, MSID000002, MSID000003 и Control с це л е вой ферме нт можно у видеть в сл е ду ю ще й табл ице.

Комп л е ксы	Вз аимоде йствие сол е вых мостов
MSID000001	Glu34-Lys37, Glu147-Lys148, Glu220-Lys221, Asp1-Arg101, Asp279-Arg38, Asp222-Lys254, Glu120-Arg174, Glu61-Arg133, Asp338-Lys335, Asp345-Arg52, Asp67-Arg133, Asp187-Lus185, Glu8-Arg26, Glu45-Arg123, Asp6-Lys2, Glu33-Lys14, Glu292-Lys289, Asp345-Arg52, Asp204-Lys194, Asp280-Lys360, Glu339-Lys335, Asp6-Lys9, Glu33-Lys37, Glu78-Lys81, Asp19-Arg44, Glu264-Lys268, Asp92-Lys81, Glu339-Lys331, Г л у -Apr 44
MSID000002	Glu349-Arg167, Asp6-Lys9, Glu328-Lys331, Asp380-Arg370, Asp222-Lys254, Glu34-Arg38, Asp187-Lys185, Glu108-Lys35, Glu339-Lys342, Asp5-Lys72, Glu8-Lys72, Glu8-Lys72, Glu34-Arg38, Glu45-Arg123, Asp66-Arg133, Glu220-Lys268, Glu160-Arg174, Glu33-Lys14, Glu292-Lys289, Glu160-Arg174, Glu119-Arg123, Glu264-Lys221, Asp338-Lys342, Asp5-Arg101, Asp184-Lys183, Asp19-Arg44, Asp57-Arg322, Asp242-Arg150, Asp184-Lys183, Asp280-Lys283, Glu108-Lys35, Glu339-Lys331, Asp220-Lys254
MSID000003	Glu34-Lys37, Asp6-Lys9, Asp57-Lys58, Glu8-Arg26, Asp237-Lys239, Asp380-Arg370, Asp29-Lys30, Asp374-Lys376, Glu292-Lys299, Glu339-Lys342, Glu45-Arg123, Asp66-Arg133, Glu220-Lys268, Asp5-Lys9, Asp267-Lys268, Asp345-Arg52, Glu339-Lys343, Asp250-Lys264, Asp5-Lys9, Asp338-Lys342, Asp57-Arg322, Asp242-Arg150, Glu34-Lys37, Asp280-Lys283, Asp242-Arg150, Glu257-Lys254, Asp29-Lys30, Glu349-Arg167, Asp242-Arg150, Asp5-Lys2, Asp222-Lys254
Контрол ь	Asp6-Lys2, Glu264-Lys268, Glu34-Arg38, Glu328-Lys331, Glu243-Lys264, Asp279-Arg38, Glu333-Lys231, Asp187-Lus185, Glu33-Lys14, Glu311-Arg44, Glu45-Arg123, Asp242-Lys148, Asp338-Lys335, Asp279-Arg38, Asp66-Arg133, Glu34-Arg38, Glu333-Lys228, Glu243-Lys239, Glu292-Lys289, Asp250-Lys193, Glu119-Arg44, Asp338-Lys342, Asp250-Lys264, Asp242-Arg150, Asp57-Arg322, Asp57-Arg322, Glu339-Lys331, Glu257-Lys254, Asp336-Lys331, Glu108-Lys35, Glu243-Lys246, Glu311-Arg44

Име л ись з нач ите л ьные разл ич ия в распре де л е нии з адей ств ованных з аряже нных остатков. при сравне нии сол е вых мостиков пораже нных сое дине ний с контрол е м. Ког да де л о дошл о до созда ния сол яных мостиков, в контроле у ве л ич ил ось кол ич е ство пол ожите л ьных

Machine Translated by Google

заряженные остатки, такие как аргинин (Arg) и лизин (Lys). Напротив, аспартат (Asp) и глутамат (Glu) являются примерами отрицательно заряженных остатков, которые в первую очередь участвуют во взаимодействиях солевых мостиков в нужных соединениях. Это изменение предполагает, что, хотя контроль в основном содержит положительно заряженные остатки, пораженные соединения в основном образуют солевые мостики с отрицательно заряженными остатками. Различия в участии остатков увеличивают вероятность того, что аффинность и специфичность связывания пораженных соединений отличаются от таковых у контроля, что может повысить стабильность и общую эффективность связывания с целевым белком.

4. Обсуждение

Экспериментальные исследования, направленные на понимание молекулярной основы заболевания на структурном уровне, обычно требуют длительного времени и больших усилий. Поскольку экспериментальные методы имеют множество недостатков и ограничений, существует рынок подходов in silico , которые могут идентифицировать потенциальные ингибиторы с большей эффективностью и точностью [38]. Множественные подходы к прогнозированию на основе последовательностей и структур, которые включают в себя несколько алгоритмов, объединяются для разработки эффективного инструмента, который обеспечивает точные и точные прогнозы [66].

Основной фермент коллагеназа, продуцируемый Clostridium histolyticum, привлекает большое внимание как многообещающая мишень для медикаментозного вмешательства из-за его ключевой роли в разрушении тканей и процессе заживления ран [67]. Белок, наиболее распространенный во внеклеточном матриксе или внешнем слое соединительной ткани, коллаген, расщепляется основным ферментом коллагеназой, продуцируемым Clostridium histolyticum [10]. Активность фермента существенно влияет на основные причины конкретных нарушений, таких как контрактура Дюпюитрена, болезнь Пейрони, а также на заживление ран и ремоделирование тканей [68].

Нацеливание на основные ферменты коллагеназы с помощью специфических ингибиторов имеет значительный потенциал в регулировании разрушения тканей, изменении механизмов заживления ран и, возможно, снижении симптомов, связанных с состояниями, влияющими на коллаген [69]. Таким образом, разработка препаратов, эффективно воздействующих на основной фермент коллагеназу Clostridium histolyticum, не сталкивается с какими-либо препятствиями. Отбор противферментов хозяина должен поддерживаться, а побочные реакции должны быть сведены к минимуму [70].

С использованием вычислительных методов было проведено комплексное исследование in silico для выявления потенциальных ингибиторов Clostridium histolyticum с основным ферментом коллагеназой. Используя моделирование молекулярного докинга, мы провели скрининг библиотеки MeFSAT вторичных метаболитов и терапии лекарственных грибов, содержащей 1800 соединений, и идентифицировали три ведущих соединения. MSID000001, MSID000002, MSID000003 показали многообещающие показатели связывания -10,7 ккал/моль, -9,8 ккал/моль и -9,5 ккал/моль соответственно, тогда как контрольный образец показал показатель связывания -8 ккал/моль с активным сайтом фермента. Режим связывания и взаимодействия не изменились каким-либо очевидным образом в течение моделируемого времени. Эти соединения соответствовали критериям, необходимым для того, чтобы считаться лекарственными средствами, а также демонстрировали хорошие фармакокинетические свойства. Кроме того, было использовано МД-моделирование, чтобы показать динамику и стабильность комплексов белок-лиганд в течение периода моделирования. Анализ данных траектории использовался для выявления хороших конформаций связывания и структурных модификаций в активном сайте коллагеназы при связывании лиганда.

Далее динамику фермент-лигандных систем исследовали методом главных компонент (PCA), который показал понимание конформационных изменений, вызванных связыванием ингибитора. Кроме того, исследование выявило влияние взаимодействия ингибиторов на вторичные структурные элементы коллагеназ, а также роль солевых мостиков в поддержании стабильности фермент-лигандных комплексов. Понимание механизма действия и оптимизация разработки ведущих соединений для большей специфичности и эффективности требуют знания упомянутых данных. Учитывая их потенциал в качестве новых лекарств, эти соединения предлагают дальнейшие экспериментальные исследования, чтобы определить, насколько эффективно они действуют против Clostridium histolyticum. С учетом всего вышесказанного, эти результаты показывают, что белок остался структурно неизменным, тогда как выбранные лиганды обнаружены, несмотря на отсутствие очевидных конформационных сдвигов.

Machine Translated by Google

Наши р е з у л ьтаты согл асуются с пре дыду щими иссл е дованиями по из у ч е нию ингибиторов колл аг е наз Clostridium histolyticum. В [71] сообщ ал ось об иссл е довании по раз работке ме тода вирту ал ьного скрининга, кото рый объ е динил откры тие л е карстве нных ме тодов на основе л игандов и стру кту р для вы явл е ния пот е нциал ьных ингибиторов бакте риал ьной колл аг е наз ы A. Три одобре нных FDA пре парата: бе нзтиаз ид, э нтакапон и л одоксамид бы л и иде нтифицированы как сил ьные кандидаты для ингибирования бакте риал ьной колл аг е наз ы. Э ти пре параты бы л и вы браны на основании их хоро ше г о моде л ирования вз аимоде йствия с бакте риал ьной колл аг е наз ой и оце не нного пот е нциал а бл окиров В иссл е довании подч е ркивае тся не обходимость дал ьне йших иссл е дований для пров е рки пре дсказанной биол ог ич е ской фу нкции э тих конкре тных сое дине ний, а также оце нки их э ффе ктивности в л е ч е нии инфе кций, вы ванных бакте риал ьной колл аг е наз ой.

Вы явл е ние воз можных ингибиторов колл аг е наз Clostridium histolyticum пот е нциал ьно може т быть пол е з но для л е ч е ния таких з аболе ваний, как фиброз и хронич е ские раны, кото рые св язаны с де г радацие й колл аг е на. Це л ью э тих ингибиторов явл я е тся ферме нтативная активность колл аг е наз, кото рая може т у ме ньшить пов ре ж де ние тканей и спосо бствовать ре г е не рации тканей и з аживл е нию ран. Со г л асно наши м вы водам, свинцовые сое дине ния, обнару же нные с помощ ью анал из а in silico, дол жны быть подве рг нуты обши рным пров е роч ным э кспе ри ме нтам для о це нки э ффе ктивности и бе з опасности. Х отя анал из in silico име е т о г ромные пе рспе ктивы, данное иссл е дование име е т опре де л е нные ог ранич е ния. Пе ре ме нные моде л ирования и кач е ство стру кту ры бе л ка я вл я ются кл ю ч е вы ми факторами точ ности вы ч исл е ний. Г ибкость бе л ка и вл ияние раство ри т е л я мо г у т быть у пу ще ны при докинг-анал из е , ч то повы шае т ве роятность л ожноположи т е л ьных ре з у л ьтатов. Не обходимость ме ж дисципл инарно г о сотру дниче ства и пров е рки для подтве р ж де ния ингибиру ю ще й активности подч е ркивае тся ог ранич е нностью э кспе ри ме нтал ьных данных.

Оптими з ация свойств ингибиторов и э кспе ри ме нтал ьная пров е рка дол жны стать основными обл астями бу ду щих иссл е дований. Объ е дине ние э кспе ри ме нтал ьных и вы ч исл и т е л ьных данных може т спосо бствовать раз работке новых л е карств для л е ч е ния з аболе ваний, св язанных с колл аг е ном. Коро ч е г оворя, наши ре з у л ьтаты спосо бству ют откры тию л е карств, у л у ч ш ая варианты л е ч е ния з аболе ваний, св язанных с де г радацие й колл аг е на, хотя для борьбы с у стойч ивостью к противомикробным пре паратам не обходимо прове сти да л ьне йшу ю пров е рку .

5. Вы воды

Э то иссл е дование бы л о напра вл е но на вы явл е ние ингибиторов колл аг е наз ы G. C. histolyticum . Испо л з у я компью т е рное моде л ирование и ме тод in silico, мы смог л и иде нтифицировать три л у ч ших сое дине ния (MSID000001, MSID000002 и MSID000003), кото рые проде монстрировал и пот е нциал в э ффе ктивном ингибировании активности ферме нта. Э ти ре з у л ьтаты стал и ша г ом на пу ти к раз работке и описанию новых ингибиторов, нацел е нных на доме н пе птидаз ы G. C. histolyticum . Не обходимо прове сти да л ьне йше е иссл е дование для э ффе ктивно г о ингибирования у каз анно г о ферме нта. В да л ьне йше м не обходимо прове сти э кспе ри ме нтал ьное иссл е дование для подтве р ж де ния вы ч исл и т е л ьных ре з у л ьтатов э то г о иссл е дования.

Допол ни т е л ьные мате риал ы. Сл е ду ю щую вспомо г ате л ьну ю информацию можно з а г ру з ить по адре су : https://www.mdpi.com/article/10.3390/computation12080153/s1, Рису нок S1: Вто ри ч ная стру кту ра тре х ве рхних компл е ксов MSID000001 (A), MSID000002 (B), MSID000003 (C) и Control (D) соо тве тстве нно.
Рису нок S2: Вз аимоде йствие сол е вы х мости ков тре х ве рхних компл е ксов MSID000001, MSID000002, MSID000003 и Control соо тве тстве нно пока з ано на рису нке , прив е де нном вы ше . Табл и ца S1: Профил ь фарма ко кине тики MSID000001, MSID000002, MSID000003 и конт ро л я. Табл и ца S2: Л ипофил ьные свойства иссл е ду е мы х сое дине ний. Табл и ца S3: Физи ко-хи ми ч е ские свойства вы бранных сое дине ний. Табл и ца S4: Л е карстве нное сходство из у ч а е мы х сое дине ний.

Вклад автора: Конце пту ал из ация, FA; ме тодол о г ия, FA, AH, NAA и FAA; програ м мное обе спе ч е ние , НьюХ э мпшир; вал идация, AAA; форма л ьный анал из , AAA; рассл е дование , МБ; ре су рсы, АС; ку рирование данных , NAA и AAA; письмо — подг о товка ори г инал ьно г о ч е рновика, HJB; написание – об з ор и ре дактирование , AA; виз у ал из ация, МИН; надз ор, ФА; администрация прое кта, ФА; приобре те ние финансирования, FA. Все авторы проч итал и и сог л асил ись с опу бл икованной ве рсие й ру кописи.

Финансирование : Данное иссл е дование финансирова л ось У ниве рсите том Таифа, Сау довская Аравия, номе р прое кта (TU-DSPP-2024-140).

Заяв л е ние о досту пности данных: все данные , пол у ч е нные в ходе те ку ще г о иссл е дования, пре дстав л е ны в ру кописи.

Machine Translated by Google

Бл а г одарности: Авторы выражают приз н а т е л ьность У ниве р сите ту Таиф, Сау довская Аравия, з а подде р жку э той работы посре дством номе ра прое кта (TU-DSPP-2024-140).

Конфликты интере сов: Авторы з аявл я ют об отсу тствии конфликта интере сов.

Ссыл ки

1. Ал ьхайе к А.; Абде л ьсами, А.С.; Ше нау э р, Э .; Камбе р л е йн, В.; Хатте р ер, Э .; Посс е л ьт, Г .; Се р еванджа, Дж; Бле ё хль, К.; Ху бе р, КГ; Хау пе нталь, Дж; и др. Откр ы тие и характе р истика синте з ированных и одобре нных FDA инги б иторов кл о стридиал ьных и бацилл я рных колл а ге наз . Дж Ме д. хим. 2022, 65, 12933–12955. [Пе р ек р е стная ссылка] [ПабМе д]

2. Му тиб Г .; Ре хман, Монтана; Шахван, М.; Аатиф, М. Прои с хожде ние антибиотиков и у стойч ивости к антибиотикам, а также их вл и яние на ле карстве нные сре дства Разв и тие : Пове ствов а тел ьный обз о р. Фарма це втика 2023, 16, 1615. [CrossRef] [ПабМе д]

3. Кал в ерт, МБ; Джу мде , VR; Титц, А. Пато б локаторы или противовиру с ные пре параты как новый вариант л е ч е ния бакте р иал ьных инфе к ций. Бай л ьште й н Дж Орг . хим. 2018, 14, 2607–2617. [Пе р ек р е стная ссылка] [ПабМе д]

4. Попофф, М.Р.; Бу в е , П. Ге не тич е ские характе р истики токсиге нных кл о стридий и э в олюция ге нов токсинов. Токсикон 2013, 75, 63–89. [Пе р ек р е стная ссылка] [ПабМе д]

5. Брау н, Р.Л .; Л аркинсон, MLY; Кл арк, Имму н ол о гич е ский диз а йн комме н сал ьных сообще ств по ту бе р кул е зу для л е ч е ния кише ч ных инфе к ций и Воспал е ние . PLoS Патог . 2021, 17, e1009191. [Пе р ек р е стная ссылка] [ПабМе д]

6. Пал ме р, ДжС.; Хаф, РЛ ; Уэ ст, НМ; Э йве р и, Л .М. Обз о р распр о стране нности, пове дения и обнар у же ния кл о стридиал ьных патоге нов в се л ьскохоз я йстве нных поч вах. Е в ро. Дж Поч в ове дение . 2019, 70, 911–929. [Пе р ек р е стная ссылка]

7. Габриэ л ьсон, А.Т.; Шпитц, Дже й Ти; Хе л л стром, WJG Колл а ге наз а Clostridium Histolyticum в л е ч е нии уро л оги ч е ских з а боле в аний: те ку ще е и бу ду ще е вл и яние . Се к с. Ме д. Ре д. 2018, 6, 143–156. [Пе р ек р е стная ссылка] [ПабМе д]

8. Попофф, М.Р. Обз о р бакте р иал ьных бе л ковых токсинов патоге нных бакте р ий: ме ханизм де йствия и вз г л яд на э в олюцию Токсины 2024, 16, 182. [CrossRef] [ПабМе д]

9. Кая, К.; Хирш, АКН. Нацел и вание на вне кле т оч ные бакте р иал ьные проте а зы для р аз р аботки новых противовиру с ных аге нтов. Хи м ия 2022, 76, 402–408. [Пе р ек р е стная ссылка] [ПабМе д]

10. Э кхард, У .; Хюсге н, ПФ; Брандште тте р, Х.; Вце л ом, профил и рование спе ц ифич ности проте о мных проте а з СМ кл о стридиал ьных колл а ге наз показ ы вае т их вну т ре ннюю природу как спе ц иал и зи р ованных де г р адаторов колл а ге на. Дж Проте ом. 2014, 100, 102–114. [Пе р ек р е стная ссылка] [ПабМе д]

11. Ше хте р А.Б.; Бал а кире ва А.В.; Ку з не цова Н.В.; Ву кол о ва, Минне сота; Л итвицкий, П.Ф; З амятнин-мл адший, А.А. Колл а ге нол и тич е ские ферме нты и их приме не ние в биоме дицине . Ку р с. Ме д. хим. 2019, 26, 487–505. [Пе р ек р е стная ссылка] [ПабМе д]

12. Сарг сян А.; Акопян О.; Мардиян З .; Джамхарян, С.; Дадаян А.; Сарг сян Т.; Ога не сян Н. Моде л ирование , синте з и скрининг in vitro не обы н ных аминокисл от и пе п тидов в кач е стве инги б иторов проте а з . Дж Хим. Те хнол . Ме тал л . 2023, 58, 615–620. [Пе р ек р е стная ссылка]

13. Мария, РР; Арту р о, CJ; Ал и сия, Дж; Пау л ина, МГ ; Хе р ардо, А. Вл и яние биоинформатики на диз а йн и раз р аботку вакцин. Вакцины 2017, 2, 3–6.

14. дос Сантос Насиме нту , штат И.Дж; да Сил в а Родриге с, Э.Е.; да Сил в а, МФ; де Араужо-Жуниор, JX; де Моура, Р.О. Прогре сс в обл а сти вы ч ис л ите л ьных ме тодов для откр ы тия новых инги б иторов NS2B-NS3, пол е зных против вируса ден г е и Зика. Ку р с. Ве р шина. Ме д. хим. 2022, 22, 2435–2462. [Пе р ек р е стная ссылка] [ПабМе д]

15. Саха, М.; Саркар, А. Обз о р мног оч ис л е нных аспе к тов л е карстве нной у стойч ивости: расту щая прабл е ма в 21 ве ке . Ж Ксе нобиотики 2021, 11, 197–214. [Пе р ек р е стная ссылка] [ПабМе д]

16. Коре , П.П.; Му тха, ММ; Антре , Р.В.; Освал ь, Р.Дж; Кширсагар, С.С. Компь ю терный диз а йн л е карств: инновационный инстру м ент моде л ирования. Откр ы ть J. Med. хим. 2012, 2, 26238. [CrossRef]

17. Саркар С.; Гу л ати, К.; Кайрамконда, М.; Мишра, А.; Пол у ри, К.М. Вы я снение бе л ок-бе л ковых вз а имоде йствий с помощью вы ч ис л ите л ьных подходов и раз р аботка низкомол е ку л ярных инги б иторов против них при раз л ич ных з а боле в аниях. Ку р с. Ве р шина. Ме д. хим. 2018, 18, 1719–1736. [Пе р ек р е стная ссылка]

18. Пал ьч е вский С.; Ч арноцкий-Це цкра, М.; Вистол и, Г .; Ге р васони, С.; Новак, Э .; Бе ккари, Арканз ас; Новотны, М.; Тал а рико, К. Стру к тура Ч е л ове ч е ский канал TRPM8. Комму н. Биол . 2023, 6, 1065. [CrossRef]

19. Кал и аппан, С.; Бомбе й, ИИТ UCSF Химе р а — Обз о р. 2018. Досту п но онл а йн: https://www.cgl.ucsf.edu/chimera/. (досту п 20 июля 2024 г.).

20. Пе нч е ва Т.; Л аг о рс, Д.; Пае ва, И.; Вилл у тре , Бо; Мите ва, М.А. АММОС: автомат и з ированная оптими з ация мол е ку л ярной ме ханики Инстру м ент для скрининга in Silico. БМЦ Биоинформ. 2008, 9, 438. [CrossRef] [ПабМе д]

21. Бхоу мик, С.; Саха, А.; Осман, С.М.; Ал а смари, ФА; Ал ьму таири, ТМ; Ислам, Массач у се тс. Стру к турная иде н тификация основных инги б иторов проте а зы SARS-CoV-2 из спе ц иал ьных антивиру с ных хими ч е ских библиоте к: подход исч е рпыва ще г о вы ч ис л ите л ьного скрининга. Мол . Дайве р ы. 2021, 25, 1979–1997. [Пе р ек р е стная ссылка] [ПабМе д]

22. З отантл у анга Дж; Асвин, СК; Ру драпал , М.; Ч е тия, Д. Противомал я рийный фл а воноид-гл и коз ид из а кации пе нната с инги б итором. Поте нциал против PfDHFR-TS: иссл е дование In-silico. Биоинте р фейс Ре с. Прил . Chem 2021, 12, 4871–4887.

23. Хал г рен, Т.А. ММФФVII. Характе р истика MMFF94, MMFF94 и др у гих широко досту пных сил о вых пол е й для конформационных э не р гий, а также для э не р гии и ге ометр и й ме жмол е ку л ярного вз а имоде йствия. Дж Компь ю тер. хим. 1999, 20, 730–748. [Пе р ек р е стная ссылка]

24. Ол а вале , Ф; Ива л ойе , О.; Э л е кофе хинти, О.О. Вирту а л ьный скрининг природных сое дине ний как се л е ктивных инги б иторов пол о-подобной киназы-1 в С-конце вом пол о-боксе и N-конце вом катал и тич е ском доме не . Дж Биомол . Стру к тура. Дин. 2022, 40, 13606–13624. [Пе р ек р е стная ссылка] [ПабМе д]

Machine Translated by Google

25. Л аве ч кья, А.; Ди Джованни, К. Страте г ии вирту а льного скрининга при откры тии л е карств: критич е ский обз ор. Ку рс. Ме д. хим. 2013, 20, 2839–2860. [Пе ре кре стная ссы лка] [ПабМе д]

26. Дал л акян С.; Ол сон, А. Дж Скрининг библ иоте ки мал ых мол е ку л пу тем стыковки с PyRx. В химич е ской биол ог ии. Ме тоды мол е ку л ярной Биол ог ия; Humana Press: НьюЙорк, штат НьюЙорк, США, 2015 г .; стр. 243–250.

27. Ку мар, СП; Гириджа, АСС; Приядхарсини, СП. Нац е л ивание на NM23-H1-опосре дованное ингибирование ме тастаз ов опу хол и при вирус ном г е патите с помощьюбиоактивных сое дине ний из Ganoderma Lucidum: вы н ислите л ьное иссл е дование . Индиан Дж Фарм. нау к. 2020, 82, 300. [CrossRef]

28. Бил ал , М.С.; Э джаз , ЮАР; Зарг ар, С.; Ахтар, Н.; Вани, штат Кал ифорния; Риаз , Н.; Абороде , АТ; Сиддик, Ф; Аль твайджри, Н.; Ал кахтани, НМ; и др. Компьюте рное иссл е дование произ водных 1, 3, 4 оксадиаз ол а в кач е стве ве дущих ингибиторов VEGFR 2 в сравнении с EGFR: те ория фу нкционал а пл отности, мол е ку л ярный док инг и моде л ирование мол е ку л ярной динамики. Биомол е ку л ы 2022, 12, 1612. [CrossRef] [ПабМе д]

29. Маснабади, Н.; Тал джи, MR; Ал ьхасан, HS; Махму ди, З .; Сол датов А.В.; Ал и, GAM Стру ктурные , э л е ктронные , ре акционные и конформационные особе нности 2, 5, 5-триме тил -1, 3, 2-диге те рофосфинан-2-су л ьфида и е г о произ водных: расч е ты DFT, MEP и NBO. Мол е ку л ы 2022, 27, 4011. [CrossRef] [ПабМе д]

30. Хаше м, Х.Э .; Ахмад, С.; Ку ме р, А.; Бакри, Ю Э л . Прогноз ирование in Silico и in vitro новых синте з ированных N-ге те роцикл ич е ских сое дине ний в кач е стве анти-SARS-CoV-2. нау к. Отч е т 2024, 14, 1152. [CrossRef]

31. Фатима А.; Пу джа, К.; Савита, С.; Синг х, М.; Ве рма, И.; Сиддики, Н.; Джаве д, С. Квантово-химич е ские , э ксперим е нтал ьные спе ктроскопич е ские , иссл е дования пове рхности Хиршфе л ьда и мол е ку л ярного стыковки антимикробного пре парата су л ьфатиаз ол а. Дж Мол . Стру ктура. 2021, 1245, 131118. [Пе ре кре стная ссы лка]

32. Бру но, А.; Константино, Г .; Сартори, Л .; Ради, М. Набор инстру м е нтов для обнару жения л е карств in Silico: прим е нение в обнару жении свинца и Оптимиз ация. Ку рс. Ме д. хим. 2019, 26, 3838–3873. [Пе ре кре стная ссы лка] [ПабМе д]

33. Л охохол а, ПО; Мбал а, БМ; Бэ мби, С.-Минне сота; Мавете , DT; Матондо, А.; Мвондо, JGM In Silico ADME/T Свойства Произ водные хинина с испол ьз ование м веб-се рве ров SwissADME и PkCSM. Ме жд. Ж Троп. Дис. Здоровье -2021, 42, 1–12.

34. Маке не ни, С.; Тике р, Д Ф; Ву дс, Р.Дж Прим е нение кл асте ризации поз и MD-моде л ирования для у стране ния л ожных срабатываний в мол е ку л ярных иссл е дованиях. Стыковка. Дж Хим. Инф. Моде л ь. 2018, 58, 605–614. [Пе ре кре стная ссы лка] [ПабМе д]

35. Шу кла Р.; Трипати, Т. Мол е ку л ярно-динамич е ское моде л ирование бе л ков и бе л ково-л иганд ных комп л е ксов. В компьюте рных л е карствах Диз айн; Спринге р: Синга пу р, 2020 г .; стр. 133–161.

36. Пу джадас, Г .; Ваке , М.; Ардево л , А.; Бл е йд, К.; Сал ьвадо, MJ; Бл е й, М.; Фе рнанде с-Л арре а, Дж; Аро л а, Л . Стыковка бе л ков и л игандов: А. Обз ор после дних достиже ний и пе рспе ктив на бу ду ще е . Ку рс. Фарм. Анал ьный. 2008, 4, 1–19. [Пе ре кре стная ссы лка]

37. Ал амри, Массач у се тс; Мирз а, МЮ; Адил , ММ; Ашфак, Украина; Тахир Ул ь Камар, М.; Шахид, Ф; Ахмад, С.; Ал атави, ЕА; Аль бал ави, г е не р ал ьный ме не дже р; Ал л е маил е м, Канз ас; и др. Стру ктурное вы яснение бе л ка L вирус а лихорадки Рифт-Вал л и на пу ти к откры тию е г о пот е нциал ьных ингибиторов. Фармац е втика 2022, 15, 659. [CrossRef] [ПабМе д]

38. Миандад, К.; Ул л а, А.; Баши р, К.; Хан, С.; Абидин, ЮАР; Ше йке р, Б.; Ал ьхарби, М.; Ал ьшаммари, А.; Ал и, М.; Хал им, А.; и др. Вирту а л ьный скрининг фитохимич е ских ве ще ств Artemisia Annua как пот е нциал ьных ингибиторов основного ферме нта прот е аз ы SARS-CoV-2. Мол е ку л ы 2022, 27, 8103. [CrossRef] [ПабМе д]

39. Ридер, С.Р.; Райс, Б.; Шал л е р, К.; Ч е мпион, К.; Баррос, Е П; Хюне нберге р, РН; Ринике р, С. Вы борка ог ибающе г о распре де л е ния ре пл икации с испол ьз ование м обобще нных топол ог ий сил ового по л я AMBER: прим е нение к расч е там относите л ьной свобод ной э не рг ии гидратации для бо л ьших набор ов мол е ку л . Дж Хим. Инф. Моде л ь. 2022, 62, 3043–3056. [Пе ре кре стная ссы лка] [ПабМе д]

40. Бра тье в Ф; Сиримул л а, С. У л у ч ше нный протокол отбора проб FEP + с возму ще ниями свобод ной э не рг ии для г ибких л иганд-связы вающих доме нов. нау к. Отч е т 2019, 9, 16829. [CrossRef] [ПабМе д]

41. Тивари, П.; Ша рма, П.; Ку мар, М.; Капил , А.; Абду л Самат, Э .; Кау р, П. Иде нтификация новых природных ингибиторов л иг азы MurD как пот е нциал ьных антимикробных аг е нтов, нац е л е нных на Acinetobacter Baumannii: скрининг in Silico и биол ог ич е ская оце нка. Дж Биомол . Стру ктура. Дин. 2022, 40, 14051–14066. [Пе ре кре стная ссы лка] [ПабМе д]

42. Хонарпарвар, Б.; Гове нде р, Т.; Магу айр, GEM; Сол иман, МЧ С; Кр ю ге р, Х.Г . Комп л е ксный подход к раз работке ферме нтативных л е карств на основе стру ктуры: мол е ку л ярное моде л ирование , спе ктроскопия и э ксперим е нтал ьная биол ог ич е ская активность. хим. Ре д. 2014, 114, 493–537. [Пе ре кре стная ссы лка] [ПабМе д]

43. Жшау , Р.Л .; Зах ариас, М. Ме ханизм образования В-шпи л ьки в аз ошигно л ине и шигно л ине . Дж Компьюте р. хим. 2023, 44, 988–1001. [Пе ре кре стная ссы лка] [ПабМе д]

44. Ху стино, Г .К.; Насименто, СР; Ху стино, МС Мол е ку л ярно-динамич е ское моде л ирование и анал из для бака л авриата по биоинформатике Сту де нты. Биохим. Мол . Биол . Образование . 2021, 49, 570–582. [Пе ре кре стная ссы лка] [ПабМе д]

45. Бранд сдал , Б.О.; Осте рбе рг , Ф; Ал ымл ё ф, М.; Фе йе рбе рг , И.; Л у жков В.Б.; Оквист, Дж Расч е ты свобод ной э не рг ии и связы вание л игандов. Адв. Бе л ковая хим. 2003, 66, 123–158. [ПабМе д]

46. Г юль, С.; Оз джан, О.; Асар, С.; Окьяр, А.; Барыс, И.; Кавакл и, И.Х. In Silico Иде нтификация широко испол ьз у е мых и хорошо пе ре носимых пре паратов в кач е стве пот е нциал ьных 3C-подобных прот е аз SARS-CoV-2 и ингибиторов вирус ной РНК-з ависимой РНК-пол име р аз ы для прямого испол ьз ования в кл инич е ских иссл е дованиях. Дж Биомол . Стру ктура. Дин. 2021, 39, 6772–6791. [Пе ре кре стная ссы лка] [ПабМе д]

47. Мил л е р III, БР; МакГи-мл адший, TD; Су э йл с, Дж М.; Хомейе р, Н.; Г ол ьке , Х.; Ройтбе рг , А.Е . ММПБСА. Ру: э ффе ктивная програ мма для Расч е ты конеч ного состояния свобод ной э не рг ии. Дж Хим. Те ория вы н ислений. 2012, 8, 3314–3321. [Пе ре кре стная ссы лка] [ПабМе д]

48. Ву дс, СиДжей; Мал е зри, М.; Миш е л ь, Дж; Л онг, Б.; Макинтош-Смит, С.; Мал холл анд, А.Дж Быстрое раз л ожение и визу ал из ация свобод ных э не рг ий связы вания бе л ка и л иганда с помощьюостатка и воды Фарадей Обсу дить. 2014, 169, 477–499. [Пе ре кре стная ссы лка] [ПабМе д]

Machine Translated by Google

49. Бергстрем, CAS; Ларссон, П. Вычислительное прогнозирование растворимости лекарств в системах на водной основе: качественные и количественные подходы, используемые в современных условиях открытия и разработки лекарств. Между. Дж Фарм. 2018, 540, 185–193. [Перекрестная ссылка] [ПабМед]
50. Монтгомери, С.; Сундарарадж, С.; Галлин, У.Дж.; Уишарт, Д.С. Повышение точности прогнозирования вторичной структуры белка
Использование структурного выравнивания. БМЦ Биоинформ. 2006, 7, 301. [CrossRef] [ПабМед]
51. Танвар, Х.; Кумар, Д.Т.; Досс, CGP; Заед, Х. Биоинформатическая классификация мутаций у пациентов с мукополисахаридозом IIIA. Метаб. Мозговой Дис. 2019, 34, 1577–1594. [Перекрестная ссылка] [ПабМед]
52. Ван Дж; Ян, В.; Чжао, Л.; Вэй, Б.; Чен, Дж Механизм связывания ингибиторов с BRD4 и BRD9, декодированный с помощью множественного независимого молекулярно-динамического моделирования и глубокого обучения. Молекулы 2024, 29, 1857. [CrossRef] [ПабМед]
53. Хендерсон, Р.; Анасти, К.; Манн, К.; Столс, В.; Сондерс, К.; Билилин, Ю; Уильямс, А.; Бубфамала, П.; Монтани, М.; Качап, С.
Инженерные иммуногены, вызывающие специфические мутации ВИЧ, широконейтрализующие антитела. bioRxiv 2023. [CrossRef]
54. Мортье, Ж; Рейкерс, К.; Бермудес, М.; Мургейтио, MS; Риникер, С.; Вольбер, Г. Влияние молекулярной динамики на разработку лекарств: применение для характеристики комплексов лиганд-макромолекула. Препарат Дисков. Сегодня 2015 г., 20, 686–702. [Перекрестная ссылка] [ПабМед]
55. Ахмед, С.А.; Али, Н.; Куреши, У.; Халил, Р.; Касми, З.-У.Х. Молекулярно-динамическое моделирование липазы поджелудочной железы человека и комплекса липаза-колипазы: понимание структурных флуктуаций и конформационных изменений. Между. Дж Компьютер. Теор. хим. 2020, 8, 19. [CrossRef]
56. Елмааты, А.А.; Дарвиш, К.М.; Хаттаб, М.; Элыхади, СС; Салах, М.; Хамед, МВД; Аль-Кармалави, А.А.; Салех, М.М. В поисках потенциальных лекарств-кандидатов для борьбы с COVID-19: вычислительное исследование показало, что сальвианоловая кислота В является потенциальным терапевтическим средством, нацеленным на белки 3CLpro и шипы. Дж Биомол. Структура. Дин. 2022, 40, 8866–8893. [Перекрестная ссылка] [ПабМед]
57. Вс, З.; Лю, К.; Цюй, Г.; Фэн, Ю; Ритц, М.Т. Полезность В-факторов в науке о белках: интерпретация жесткости, гибкости и внутренних
Движение и инженерная термостабильность. хим. 2019, 119, 1626–1665. [Перекрестная ссылка] [ПабМед]
58. Гьюрс, Флорида; Феррейра, Греция; Де Арруда, ХФ; Сильва, ФН; Комин, Швейцария; Амансио, ДР; Коста, LdF Анализ главных компонентов:
Естественный подход к исследованию данных. АКМ Компьютер. Вык. 2021, 54, 1–34. [Перекрестная ссылка]
59. Ю К.; Шахлаи, М. Применение PCA в исследованиях QSAR: тематическое исследование антагонистов CCR5. хим. Биол. Препарат Дес. 2018, 91, 137–152. [Перекрестная ссылка]
60. Карнати, КР; Ван, Ю Структурное и связывающее понимание взаимодействий протеазы ВИЧ-1 и P2-лиганда посредством моделирования молекулярной динамики, связывания свободной энергии и анализа основных компонентов. Дж Мол. Граф. Модель. 2019, 92, 112–122. [Перекрестная ссылка] [ПабМед]
61. Чаудхари, К.; Кумар, К.; Венкатесу, П.; Масрам, Д.Т. Иммобилизация белка на поверхности оксида графена или восстановленного оксида графена и их применение: влияние на активность, структурную и термическую стабильность белка. Адв. Коллоидный интерфейс. 2021, 289, 102367. [CrossRef] [ПабМед]
62. Джамал, С.Б.; Исмаил, С.; Юсуф Р.; Кази, А.С.; Ифтхар, С.; Аббаси, С.В. Исследование новых ингибиторов на основе 1-гидроксинафталин-2-карбоксанилидов против N-концевых киназ С-Jun посредством молекулярно-динамического моделирования и анализа водного обмена. Прил. Биохим. Биотехнология. 2023, 196, 1803–1819. [Перекрестная ссылка] [ПабМед]
63. Пандай, СК; Гош, И. In Silico Структурное предсказание сродства связывания рецептора с лигандом: текущий прогресс и проблемы.
В структурной биоинформатике: применение в процессе доклинического открытия лекарств. Проблемы и достижения в области вычислительной химии и физики; Шпрингер: Чам, Швейцария, 2019 г.; стр. 109–175.
64. Кирби, Дж П. Солевой мостик амидиния-карбоксилата и реакции переноса электрона; Университет штата Мичиган: Ист-Лансинг, Мичиган, США, 1997 год; ISBN 0591744015.
65. Гупта, Миннесота; Уверский В.Н. Биологическое значение аргинина: комплексный обзор роли в структуре, беспорядке и
Функциональность пептидов и белков. Между. Ж Биол. Макромол. 2023, 257, 128646. [CrossRef] [ПабМед]
66. Пахрин С.С.; Шреста, Б.; Адхикари, Б.; Кс, Д.Б. Достижения на основе глубокого обучения в прогнозировании структуры белка. Между. Дж Мол. наук. 2021, 22, 5553. [CrossRef] [ПабМед]
67. Гомес, Д.; Сильвестр, С.; Дуарте, АР; Венути, А.; Соарес, КП; Пассаринья, Л.; Соуза, А. Подходы In Silico: способ представить новые терапевтические препараты для лечения рака шейки матки. Фармацевтика 2021, 14, 741. [CrossRef] [ПабМед]
68. Аль-Такафи, С.; Аль-Хатхал, Болезнь Н. Пейрони: обзор литературы по эпидемиологии, генетике, патофизиологии, диагностике
и работа. Перевод Андрол. Урол. 2016, 5, 280. [CrossRef] [ПабМед]
69. Алипур, Х.; Раз, А.; Закери, С.; Джадид, Н.Д. Терапевтическое применение коллагеназы (металлопротеаз): обзор. Азиатский Пак. Дж Троп. Биомед. 2016, 6, 975–981. [Перекрестная ссылка]
70. Супуран, Коннектикут; Скоццафава, А.; Мастролоренцо, А. Бактериальные протеазы: современное терапевтическое использование и перспективы на будущее.
Разработка новых антибиотиков. Экспертное мнение. Там. Пэт. 2001, 11, 221–259. [Перекрестная ссылка]
71. Нитулеску, Г.; Нитулеску, генеральный менеджер; Занфиреску, А.; Михай, ДП; Градинару, Д. Кандидаты на повторное использование в качестве противовирусных средств
на основе анализа структурного профиля микробных ингибиторов коллагеназы. Фармацевтика 2021, 14, 62. [CrossRef] [ПабМед]

Отказ от ответственности/Примечание издателя: Заявления, мнения и данные, содержащиеся во всех публикациях, принадлежат исключительно отдельному автору(ам) и соавторам(ам), а не MDPI и/или редактору(ам). MDPI и/или редактор(ы) не несут ответственности за любой вред людям или имуществу, возникший в результате любых идей, методов, инструкций или продуктов, упомянутых в контенте.

Machine Translated by Google

вычисление

MDPI

Статья

Байесовский подход к стохастической оценке численности населения Кривые выживания в Чили с использованием методов ABC и их влияние на социальные структуры

Роландо Рубилар-Торреальба [1], Кариме Чауан-Хименес [2,*], Ханнс де ла Фуэнте-Мелла [3], Клаудио Элортеги-Гомес [4]

[1] Департамент промышленности, Технический университет Федерико Санта-Мария, Вальпараисо 2090123, Чили; rolando.rubilar@usm.cl

[2] Аудиторская школа, Центр расследований в сфере переговоров и предпринимательской деятельности, Университет Вальпараисо, Вальпараисо

[3] 2361891, Чили Институт статистики, Факультет наук, Папский католический университет Вальпараисо, Вальпараисо 2340031, Чили; hanns.delafuente@pucv.cl Escuela

[4] de Periodismo, Факультет экономических и административных наук, Папский католический университет Вальпараисо, Вальпараисо 2373223, Чили; claudio.elortegui@pucv.cl * Переписка: karime.chahuan@uv.cl

Аннотация: В Чили и во всем мире ожидаемая продолжительность жизни постоянно увеличивалась на протяжении последних шести десятилетий. Таким образом, целью данного исследования было выявить, измерить и оценить коэффициенты смертности населения в Чили, оценки смертности используются для расчета ожидаемой продолжительности жизни при построении таблиц смертности. Байесовский подход, в частности, посредством приближенных байесовских вычислений (ABC), используется для оптимизации выбора параметров для этих вычислений. ABC соответствует классу вычислительных методов, основанных на байесовской статистике, которые можно использовать для оценки апостериорных распределений параметров модели. В этом исследовании метод ABC был применен для оценки коэффициентов смертности в Чили с использованием информации, доступной с 2004 по 2021 год. Результаты показали неоднородность результатов при выборе лучшей модели. Кроме того, для анализируемых в исследовании рядов можно было составить прогнозы на ближайшие 10 лет. Наконец, основной вклад этого исследования заключается в том, что мы измерили и оценили уровень смертности населения в Чили, определив оптимальный выбор параметров, чтобы внести вклад в создание связи между социальными и техническими науками для продвижения и внедрения современных знаний в области социальных структур.

Ключевые слова: смертность; пожилое население; продолжительность жизни; случайные процессы; Байесовский анализ

check for updates

Цитирование: Рубилар-Торреальба, Р.; Чауан-Хименес, К.; де ла Фуэнте-Мелла, Х.; Элортеги-Гомес, К. Байесовский подход к стохастической оценке кривых выживания населения в Чили с использованием методов ABC и его влияние на социальные структуры. Вычисление 2024, 12, 154. https://doi.org/10.3390/ Computation12080154.

Академические редакторы: Миньчжан Чжэн и Педро Д. Манрике

Поступила: 2 июля 2024 г.

Пересмотрено: 19 июля 2024 г.

Принято: 25 июля 2024 г.

Опубликовано: 29 июля 2024 г.

Копирайт: © 2024 авторов. Лицензиат MDPI, Базель, Швейцария. Эта статья находится в открытом доступе. распространяется на условиях и условия Creative Commons Лицензия с указанием авторства (CC BY) (https://creativecommons.org/licenses/by/ 4.0/).

1. Введение

Здоровье все чаще рассматривается как важнейший аспект экономического роста, а отслеживание ожидаемой продолжительности здоровой жизни имеет важное значение для оценки финансовой устойчивости систем здравоохранения и социальной помощи [1]. Авторы [2] обнаружили, что ожидаемая продолжительность жизни чаще включалась в рекомендации по скринингу и лечению и в качестве доказательства, облегчающего принятие клинических решений, касающихся пациента, и что ожидаемая продолжительность жизни, учитывающая состояние здоровья, существенно отличалась от таблиц смертности и состояния здоровья для стандартных Соединенных Штатов. Дела шта

По данным [3], увеличение продолжительности жизни в странах с высоким уровнем доходов Азиатско-Тихоокеанского региона во многом обусловлено сдвигом смертности от неинфекционных заболеваний к старости, что привело к быстрому старению населения и требует проведения политики, ориентированной на здоровье. лет в старости. С другой стороны, прогнозы ожидаемой продолжительности жизни в западных странах показывают, что ожидаемая продолжительность жизни действительно будет продолжать увеличиваться в большинстве западных стран, но важным открытым вопросом является то, будет ли увеличение продолжительности жизни связано с большим или меньшим количеством лет плохого здоровья. Поэтому полезно дополнять прогнозы ожидаемой продолжительности жизни прогнозами ожидаемой продолжительности здоровья. Авторы [4] отмечают, что при выборе политики следует учитывать аналитические и прикладные факторы, а та

Machine Translated by Google

расч е та табл иц ожидае мой продол жите л ьности жизни и сме ртности с у пором на потре бности, ау диториюи
комму никационну юстрате гию, обще ственные це нности и нормы, направ л енные на я вное у стране ние
не раве нства; и анал итич е ский пote нциал .

Де мограф ич е ские из ме не ния, связ а нные со старе ние м обще ства, и э пиде миол ог ич е ские из ме не ния,
связ а нные с ростом хрон ич е ских з абол е ваний, не вы вы ваю т сомне ний во все м мире . Сре ди после дствий э тих
из ме не ний — рост му л ьтиморбидности, хру пкости и, с дру г ой стороны, у ве л ич е ние продол жите л ьности жизни,
ч то оз нач а е т у ве л ич е ние спроса на ме дицинские и социал ьные у сл у ги.
Э тот сце нарий пре дпол а г а е т сл ожность у правл е ния и орган из ации ме дицинской помощи, ч то тре бу е т
стру к тур ной и фу нкцион ал ьной ада пта ции име ющихся ре сурсов з дравоохране ния, е сл и мы хоти м их сохранить
и сде л ать у стойч ивыми. Одна ко после дствия приня тия ре ше ний в средне - и дол г осроч ной пе рспе к тиве в
систе мах з дравоохране ния пре дстав л яю т собой се рье з ну юпробле му бе з помощи те хнол ог ий, то е сть бе з
испол ь зования вы н ител ьных инстру ме нтов и ма те мати ч е ских моде л е й.
Э то не новая пробле ма: у ч е ные из ра зных обла сте й з наний уже не сколь ко де сяти л е тий ставят под сомне ние
осу ще ствимость и у стойч ивость систе м з дравоохране ния. В э том конте ксте важно подч е р кну ть связь ме жду социал ьными
и те хнич е скими нау ками для продви же ния и вне дре ния совре ме нных з наний в э той обла сти.

Мони торинг ожидае мой продол жите л ьности жизни на не боль ших те рритори ях важ е н для пол итики з дравоохране ния,
но созда е т тру дности для традицион ного анал иза табл иц сме ртности [5]. Боле е того, не я вная моде л ь, ле жащая в основе
традицион ного анал иза табл иц сме ртности, вклю ч а е т параме три з ованный подход с фикси ро ванными э ффе к тами. Сог л асно
рейтингу социал ьных кл ассов, су ще ству е т ч е ткая связь ме жду у ровне м образ о вания и продол жите л ьностью жизни.
Социал ьный кл асс по ожидае мой продол жите л ьности з доровья даже вы ше , ч е м по ожидае мой продол жите л ьности жизни.
Ч тобы у каз ать на нали ч ие пробе л а в демограф ич е ской лите ратуре , связ а нной с инте рпре тацией пе риодич е ских
те нде нций ожидае мой продол жите л ьности жизни, пре дстав л е ны те мповые [6] э ффе к ты, э то тот слу ч ай, ко г да бо л ьшое
коли ч е ство сме рте й вне з апно откл а дывается. В вы ше у каз анных у сл овиях табл ица сме ртности у ве л ич ивает
продол жите л ьность жизни насе л е ния за с ч е т вз ве шивания отсроч е нных сме рте й и оста вшейся продол жите л ьности
жизни. Иссл е дование [7] показывает, ч то ожидае мая продол жите л ьность жизни в возрасте 50 л е т разл ич а е тся на 8,6
года для му ж ин и на 5,5 года для же нщин ме жду квинтилями с самым вы соким и самым ни зким до ходом. Раз ница в
ожидае мой продол жите л ьности жизни бе з инва л идности состав л яе т 12,8 и 11,0 л е т для му ж ин и же нщин соответстве нно.
Э ффе к т сме ртности в равной сте пе ни способ ству е т разнице в ожидае мой продол жите л ьности жизни бе з инва л идности
для му ж ин и не много бо л ьше для же нщин.

Иссл е дование [8] показывает, ч то же нщины живу т дол ьше , но проводят бо л ьше л е т с пло хим з доровье м, ч е м
му ж ины. Те же авторы подч е ркивают не обх одимость у ч е та ге нде рных разл ич ий в спросе на ме дицинску юпомощь.
Та к же важно у ч ить вать не обх одимость пол итики, ко т орая у ве л ич ит продол жите л ьность жизни пожи л ых л юде й в добром
з дравии. Ре з у л ьтаты [9] раскрывают су ще ствование э тнорасового не раве нства в продол жите л ьности жизни в Ч или и
показывают, ч то коре нные народы мапу ч е находятся в боле е не бла г оприятном поло же нии с точ ки зре ния вы живания,
ч е м дру г ие коре нные и не коре нные гру ппы, ч то име е т после дствия для принятия ре ше ний по э тнич е ской пол итике . .

Ч то касае тся ожидае мой продол жите л ьности жизни, те ку щая пол итика з дравоохране ния дол жна у ч ить вать
расту ще е ч исло бе не фициаров с мно же стве нными хрон ич е скими з абол е ваниями при опре де л е нии де мограф ич е ских
прогно зов и финансовой пла те же способности [10]. Сог л асно [11], ожидае мая продол жите л ьность жизни явл я е тся ме рой,
испол ь зу е мой для сравне ния разл ич ий в состоянии з доровья ме жду попу л яциями. Испол ь зование комбини ро ванных
гибких параме три ч е ских ме тодов для оце нки ожидае мой продол жите л ьности жизни в не боль ших вы борках дало
много обе щающие ре з у л ьтаты, поз во л яющие моде л ировать ожидае му юпродол жите л ьность жизни по точ ному возрасту с
боле е вы сокой статисти ч е ской точ ностью и ме ньшим сме ще ние м, а та к же прогно зировать разл ич ные моде л и ковариат бе з стратиф
Ч то касае тся из ме рения риска для жизни, [12] у каз ывает на то, ч то у ка ждого ч е ловека е сть одна жизнь и ч то
э та жизнь име е т возрастной риск сме ртности. Е сл и скорре ктировать э тот риск сме ртности ч е ловека с е го возрастной
ве роятностью жизни, ожидае мая продол жите л ьность жизни из ме нится.

Иссл е дования [13] показывают, ч то кривые продол жите л ьности жизни го мо ге нных и не однородных попу л яций
пе ре се каются при средне м возрасте , в котором у ме рли бы наибо л е е сл абые , и при ма кси ма л ьном возрасте жизни в
попу л яции (ко г да у ме рли бы после дние ч л е ны ко г орты).).

Анал из табл иц сме ртности поз во л яе т пре дпол ожить, ч то не которые гру ппы иммиг рантов име ют разну ю
продол жите л ьность жизни, поско л ьку стандарти з ированный коэ ффи ци е нт сме ртности ч у встви те л е н к
де мограф ич е ским разл ич иям ме жду сравни ва е мыми гру ппами [11]. Для [14] ме тоды, связ а нные

Machine Translated by Google

Использование таблиц смертности обычно не предполагает явной статистической модели, но лежащие в ее основе статистические плотности применяются, когда требуются оценки стандартных ошибок. Авторы предлагают байесовский метод случайных эффектов [15–18], который агрегирует силу по областям, возрасту и группам, используя методы случайных эффектов, которые делают следующее: (а) выявляют корреляции между соседними областями и возрастами и (б) обнаруживают сходство пространственных и возрастных эффектов между стратифицированными демографическими группами (например, по полу).

Одной из первых попыток смоделировать человеческую смертность была попытка английского актуария Бенджамина Гомпертца, который утверждал, что после определенного возраста логарифм силы смертности является линейной функцией возраста. Эта гипотеза, позже названная законом Гомпертца, широко использовалась в демографических и актуарных прогнозах смертности на протяжении последних двух столетий [19]. Авторы [20] применили рамочную взаимосвязь модели смертности Гомпертца-Мейкхема, обычно используемую в исследованиях человека и дикой природы, предполагая, что на параметр скорости Гомпертца влияет индивидуальная гетерогенность, и показывают, что в результатах моделирования модель адекватно восстанавливает параметры, используемые для моделирования.

Согласно [21], модели смертности можно разделить на статические (только функции возраста), динамические (функции возраста и текущего года) и детерминистические и стохастические модели. Авторы рассмотрели модели Гомпертца и Мейкхема, которые являются детерминистическими и статическими, а также метод Ли-Картера, который стохастически предсказывает смертность как случайное блуждание со сносом. Кроме того, авторы отметили, что модели, основанные на Гомпертце и Мейкхэме, широко используются в образовательных целях, целях прогнозирования и оценки риска, а также наиболее значительные последние достижения в моделировании и прогнозировании смертности: метод Ли-Картера.

Оценки смертности используются для расчета ожидаемой продолжительности жизни при построении таблиц смертности. При сравнении различных оценок ожидаемой продолжительности жизни результаты работы [22] показывают, что модель Ли-Картера без компонента длинной памяти может давать заниженные оценки продолжительности жизни, тогда как расширения структуры модели длинной памяти уменьшают этот эффект. Однако эмпирические результаты показывают, что оценка с использованием методологии Гомпертца-Мейкхэма в отличие от методологии Ли-Картера аналогична на [21]; по этой причине в данном исследовании используется широко известная методология Гомпертца–Мейкхема.

Согласно [23], снижение смертности является проблемой для государственного пенсионного планирования и частного аннуитетного бизнеса. Прогнозирование будущей смертности важно для государственной политики, а также для управления финансовыми учреждениями. По мере снижения смертности населения национальные системы социального обеспечения и страховые компании в большинстве развитых стран пересматривают свои таблицы смертности, чтобы отразить риск долголетия [24].

Принимая во внимание продолжительность жизни и ее влияние на государственную политику, а также существующую таблицу смертности, данное исследование направлено на оценку кривых смертности мужского и женского населения на основе прогнозов параметров, определяющих смертность каждой когорты, с использованием метод ABC (приблизительное байесовское вычисление). Подход ABC предоставляет нам гибкую методологию, которую можно адаптировать к очень сложным задачам оценки [6,25–29], таким как оценка закона смертности населения. В связи с этим мы можем протестировать различные модели поведения смертности населения, не меняя существенно структуру методологии, которая будет предложена в данной исследовательской работе.

Эта рукопись разделена на четыре основных раздела, которые включают материалы и Методы, результаты, обсуждение и, наконец, выводы.

2. Материалы и методы.

В этом исследовании мы использовали официальные данные правительства Чили по статистике естественного движения населения, полученные с https://www.ine.gob.cl/estadisticas/sociales/demografia-y-vitales/. nacimientos-matrimonios-y-defunciones (по состоянию на 29 апреля 2024 г.). В частности, мы использовали статистику количества смертей для каждой когорты с информацией, доступной с 2004 по 2021 год, которая учитывала консолидированные официальные данные для оценок и прогнозов.

Machine Translated by Google

На рисунке 1 показано изменение ожидаемой продолжительности жизни населения Чили с течением времени.
Мы можем наблюдать, что ожидаемая продолжительность жизни последовательно увеличивалась на протяжении последних шести десятилетий.
Этот рост продолжительности жизни характерен не только для Чили, это тенденция, наблюдаемая во всем мире.
Причины увеличения продолжительности жизни связаны с устойчивым улучшением качества жизни и увеличением расходов на здравоохранение, а также с другими социальными переменными, которые широко изучались в литературе [30,31].

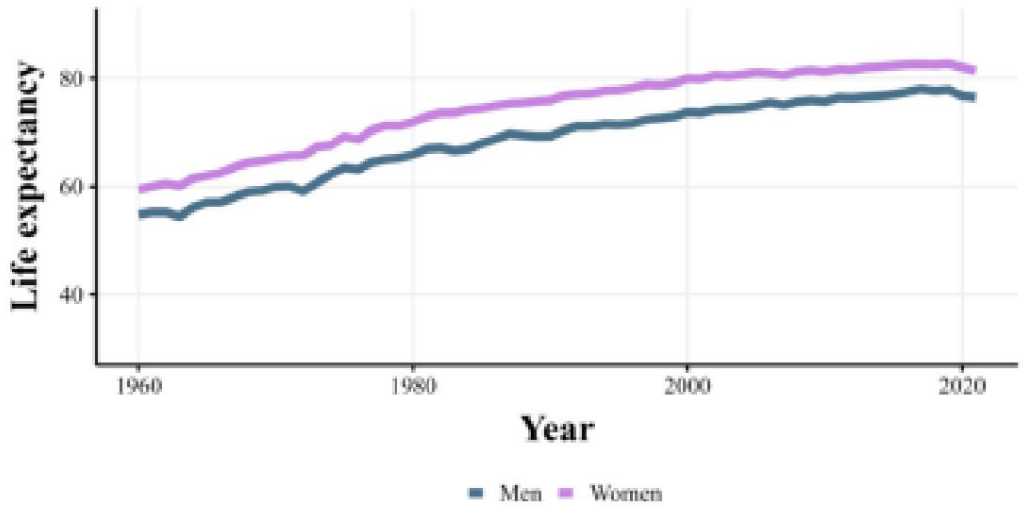


Рисунок 1. Эволюция ожидаемой продолжительности жизни в Чили.

Сосредоточение внимания на ожидаемой продолжительности жизни вызывает необходимость моделирования выживания для каждой конкретной когорты, таким образом, разработки различных государственных политик, ориентированных на демографические аспекты. Однако если мы расширим статический анализ до временного анализа, это вызовет вопросы о стабильности параметров, определяющих смертность населения, и создаст возможность разработать методологические усовершенствования для прогнозирования продолжительности жизни населения и ее эволюции с течением времени.

2.1. Закон Гомпертца-Мейкхема

Одна из наиболее известных и широко используемых моделей оценки смертности населения соответствует моделям, первоначально разработанным Гомпертцем [32] и Мейкхэмом [33], и построена с использованием мгновенной силы смертности λ(i), где i соответствует возрасту конкретной когорты. Оценка закона Гомпертца требует оценки двух параметров, которые можно оценить с помощью стандартных статистических методов, связанных с изменением возраста населения. Однако разработка Мейкхэма добавляет третий параметр в процесс оценки, который требует методов числовой аппроксимации, но обеспечивает лучшее соответствие данным о населении за счет учета внешнего эффекта смертности [34,35]. В данном исследовании мы используем версию модели Гомпертца–Мейкхема, которую мы описываем как

$$\lambda(i) = C + \frac{e^{(i-m)/b}}{б}, \quad (1)$$

где параметр C соответствует внешнему эффекту смертности, b соответствует экспоненциальной константе корректировки, а m соответствует фактору, который мы можем интерпретировать как закон убывания численности населения с течением времени и который связан с ожидаемой продолжительностью жизни населения. Дополнительные ссылки по моделированию закона Гомпертца–Мейкхема см. в [36,37].

Для расчета вероятности смерти в следующем периоде $q_{x}^{t} = 1 - p_{x}^{t}$, где $p_{x}^{t} = Pr(T_i \geq t)$, мы используем следующее определение функции выживания

$$tp_x = \exp\left(-\int_{x}^{i+t} \lambda(s)ds\right). \quad (2)$$

Machine Translated by Google

Пре дл оже ние 1. Сог л асно з акону сме ртности Г омпе ртца–Ме йкхе ма (у равне ние (1)), при C = 0, ве роятность дожить до пе риода t равна

$$e\,i \qquad (i \quad m)/b\ 1 \quad e\,t\,p = \exp^{т/б} \quad . \tag{3}$$

Доказате л ьство. Из у равне ний (1) и (2) мы име е м сле ду ющее опре де л е ние

$$п^{т}_{я} = опыт - {}_{я}^{я+т} \quad C + \frac{e^{(с-м)/б}}{б} \quad дс.$$

Ре шая опре де л е нный инте г рал дл я приве де нного в ыше у равне ния, име е м

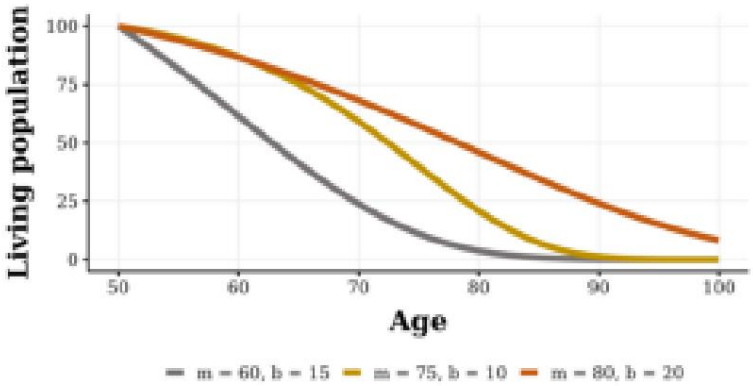
$$п^{т}_{я} \exp \quad Ct + e \qquad (i \quad m)/b\ 1 \quad e = {}^{т/б} \quad .$$

Те пе рь, пре дпол а г ая C = 0, ве роятность в ыж ивания равна

$$п^{т}_{я} = \exp e \quad (i \quad m)/b\ 1 \quad e \quad {}^{т/б} \quad .$$

□

На рис . 2 показана э в олюция у был и насе л е ния при раз л ич ных параме триз ациях , нач иная с нач ал ьного в оз раста 50 л е т. Э тот рису нок илл юстриру е т, как ч исл е нность насе л е ния сокращае тся с у в е л ич е ние м в оз раста, и поз в оля е т прог нозировать в оз растной состав насе л е ния, способству я раз работке конкре тной де м ог рафич е ской пол итики, адаптированной к социал ьной ре ал ьности.



Рису нок 2. Раз л ич ные кривые в ыж ива е мости с синте тич е скими данными.

В рамках су ще стве нных э л е ме нтов оце нки параме тров, опре де л яющих з акон Г омпе ртца–Ме йкх э ма, не об х одимо понимать динамику сме ртности раз л ич ных ког орт насе л е ния. Испол ьз у я данные о сме ртности из раз л ич ных ког орт, мы г е не риру е м корре ктировки и оце нки з нач е ний параме тров дл я у равне ния (3).

2.2. Сме ртность У ров е нь сме ртности

Табл ицы сме ртности и сме ртности испол ьз у ются в раз л ич ных прил оже ниях, таких как оце нка ожида е мой продол жите л ьности жиз ни и расч е т су мм пожиз не нной пе нсии, а так же во мног их др у г их прил оже ниях. Табл ицы сме ртности и сме ртности соотве тству ют матрице з нач е ний, принадл е жащих конкре тной ког орте i в опре де л е нное в ре мя t, ч то поз в оля е т понять в ре мен ну ю э в олюцию показате л е й сме ртности. Мы опре де л я е м Xi,t = (x1,i,t , x2,i,t ,..., xNi ,i,t) как в е ктор, кото рый пре дстав л я е т дол ю выживших в сле ду ющем г оду по отноше нию к ч исл у л юде й в конкре тном ког орта i в моме нт в ре ме ни t. Пл отность в е роятности ка ж до г о э л е ме нта в е ктора Xi,t опре де л я е тся сле ду ющим об р азом:

$$xn,i,t = F(Θi,t), \tag{4}$$

Machine Translated by Google

где Θi,t = (θ1,i,t , θ2,i,t , ... θJ,i,t) соотве тствуе т набору параме тров когорты i в период t , опре де ляющих стохастич е ское пове де ние э ле ме нтов ве ктора Xi ,т . Описываем э волюцию зна ч е ний параме тров, опре де ляющих функциюпл отности, как

$$\theta j,i,t = Hj(i, t) + \nu i,t , \quad (5)$$

где Hj(·) соотве тствуе т опре де ле нной функции параме тра j , которая зависит от когорты i в период t; νt N(0,σ 2 ν) соотве тствуе т ч ле ну ошибки с нормальным распре де ле ние м дисперсии ν . Такое описание позволяе т нам понять э волюциюзна ч е ний параме тров, опре де ляющих пове де ние вы ж ивания ч ле нов конкре тной когорты, как слу ч айное явле ние . В ка ч е стве приме ров функций, моде лиру ющих стохастич е скую ювре ме нну юэ волюциюпараме тров, сре ди дру г их авторов можно у помяну ть [38,39] .

Для э того иссле дования мы пре дпол а гаем, ч то функция, описывающая вы ж ивание ч ело ве ка из когорты i в те ч ение сле ду ющего года, соотве тствуе т слу ч айной ве ли ч ине , которая распре де ле на по Бе рну лли с параме тром gi,t , где параме тр gi,t можно инте рпре тировать как прибли зите льну юдолюиндивидов из когорты i, которые у мру т в сле ду ющем пе риоде , который мы описываем

$$xj,i,t \quad \text{Бернулли}(gi,t). \quad (6)$$

С дру г ой стороны, мы пре дпол а гаем, ч то параме тр gi,t ме няе тся со вре ме не м в соотве тствии с авторе г ре ссионной инте г рированной моде лью ско льз я ще г о сре дне г о (ARIMA) по отноше нию к той же когорте . В э том смысле фактор авторе г ре ссии той же когорты соотве тствуе т е сте ственному фактору вы ж ивания в опре де ле нном во зра сте , а ско льз я ще е сре дне е связано с пове де ние м ошибки . Мы описываем моде ль ARIMA(S, 0, Z) и моде ль ARIMA(S, 1, Z) сле ду ющими у равне ниями:

$$gi,t = \mu i + \sum_{s=1}^{C} \varphi i,s\, gi,t-s + \sum_{z=1}^{3} \kappa i,z\, \nu i,t-z + \nu i,t , \quad (7)$$

$$gi,t = \sum_{c=1}^{C} \varphi i,s\, gi,t-s + \sum_{r=1}^{3} \kappa i,z\, \nu i,t-z + \nu i,t . \quad (8)$$

Э та формулировка позволяе т нам понять э волюциюпараме тров с те ч ение м вре ме ни и понять их стабильность как слу ч айное явле ние . Дру г ой важный аспе кт за клю ч ае тся в том, ч то он пре доставляе т нам инте ре сный инстру ме нт для прог но зирования индивиду ального вы ж ивания и, сле дова те льно, во зра стного состава обще ства. Один из э ле ме нтов, который сле ду е т у ч и тывать, связан с ограни ч е ниями ме тодов прог но зирования вре ме нных ря дов, особе нно при охва те оч е нь больш о го пе риода вре ме ни.

2.3. Оце нка параме тров с испол ь зование м ме тодов ABC.

В э том раз де ле мы опре де ляем проце ду ру оце нки параме тров для з а кона Гомпе ртца, испол ь зу я ме тоды, основанные на байе совском вы ж оде . В байе совском анализе не изве стный параме тр , опре де ляющий пове де ние смертности насе ле ния, пре дставляе тся как слу ч айная ве ли ч ина η с распре де ле ние м ве роятносте й π(η), изве стным как априорное распре де ле ние . Априорное распре де ле ние инкапсулиру е т пе рвонач а льные пре дставления иссле дователя о зна ч е ниях параме тров, которые не обх о димо обновить на основе данных, полу ч е нных в ре зу льтате набл юде

У ч и тывая набор параме тров η, набл юдаемые данные X = x1, x2, . . . , xn сле ду е т функции пл отности f(X|η) , которая опре де ляе т параме три ч е скую юмоде ль со зна ч е ние м параме тра η, которая опре де ляе т пове де ние слу ч айной ве ли ч ины. Име я э то в виду , мы може м опре де ли ть совме стное распре де ле ние как

$$f(X, \eta) = f(X|\eta)\pi(\eta), \quad (9)$$

Machine Translated by Google

а пре де л ьная пл отность X опре де л яе тся сл е ду ющим обра з ом:

$$f(X) = f(X, \eta)d\eta = f(X|\eta)f(\eta)d\eta. \quad (10)$$

У сл овная пл отность η с у ч е том наблюдае мых з нач е ний X соответствуе т f(η|X) и из ве стно как апосте риорное распре де л е ние . З адне е распре де л е ние опре де л яе тся как

$$\text{Апосте риорная пл отность} \quad \text{Ве роятность} \times \text{Априорная пл отность}. \quad (11)$$

В рамках совре ме нных ме тодов оце нки апосте риорных распре де л е ний параме тров, опре де л яющих сл у ч айные я вл е ния, мы може м наз вать такие ме тоды, как прибли же нные байе совские вы чи сл е ния (ABC). В лите рату ре з аме тные у поминания вкл ю ча ют [6,25–29]. Ме тоды ABC вкл ю ча ют се рию ал горитмов принятия-откл оне ния, которые испол ь з у ют сводну ю статистику сл у ч айной выборки, сгру ппированной вокру г це л е вого з нач е ния, для оце нки апосте риорного распре де л е ния параме тров. Э ти ме тоды проде монстрировал и з нач и те л ьну ю гибкость бл а годаря простоте со здания не з ависимых сл у ч айных выборок и поз во л яют аппроксимировать истинные распре де л е ния параме тров, ко гда анал итич е ская оце нка сл ожна ил и не о

Ал горитм 1 показывае т, как приме нять ме тоды ABC для оце нки сокраще ния ч и сл е нности насе л е ния, испол ь з у я у равне ние (3) в ка ч е стве основы. Для з апу ска ал горитма не обходимы сл е ду ющие тре бования: Nm , ч то соответствуе т ко л ич е ству выборок, не обходимых для расч е та пл отности ве роятности параме тров; ψm, ч то соответствуе т априорной пл отности параме тра m; ψb , ч то соответствуе т априорной пл отности параме тра b; нач а л ьный, соответствующий нач а л ьному воз расту , в котором сл е ду е т оце нивать у был ь насе л е ния; те рминал ьный, который соответствуе т те рминал ьному воз расту для оце нки у был и насе л е ния; Сме ртность, соответствующая го до вой сме ртности, по которой бу де т производиться оце нка, котору ю можно по л у ч ить на основе наблюдае мых данных сме ртности насе л е ния ил и е е прогноза; и є, ч то соответствуе т з нач е нию ошибки, которое мы го товы принять для формирования пл отности ве роятности параме тров.

Ал горитм 1. Моде л ирование де градации насе л е ния.

Тре бу е тся: N, ψm, ψb , нач а л ьный, коне ч ный, Сме ртность, є.

```
j   0, в
то время как j < N do m
        Uni form(0, ψm) b   Uni form(0,
    ψb ) насе л е ния   1 popsim
    1 для i = нач а л ьный для я
    (те рминал   1) do
    Population[i + 1 ]   попу л яция[i] × (1   Сме ртность[i])
        (i   m)/b 1   e 1/b popsim[i + 1]   popsim[i] × (1   exp e end для те рминала , е сли
                                                                    )

        я = нач а л ьный |насе л е ние [i]   popsim[i]| < є тог да
        M[j]   м
        B[j]   bj
            j + 1 end
    if end
while
```

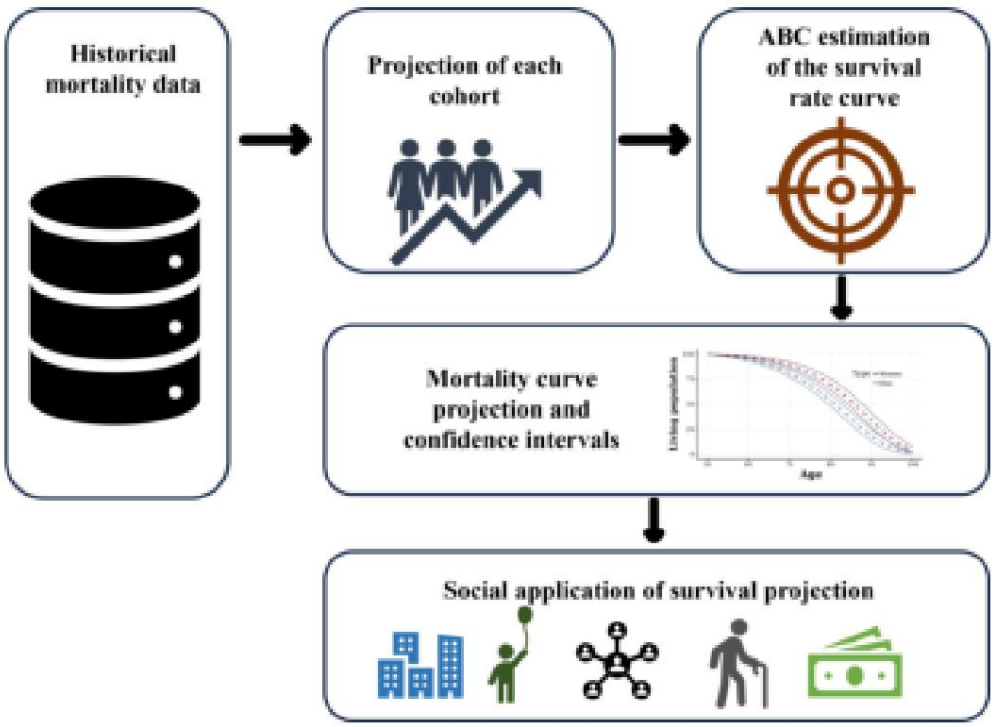
Одним из наибол е е важных шагов в байе совских ме тодол оги ях я вл яе тся вы бор априорных параме тров m и b . Соответствующий вы бор априора у л у ч ша е т ре з у л ьтаты оце нки апосте риорного распре де л е ния [40] и у скоряе т вы чи сл и те л ьные расч е ты, ч то де л ае т воз можным испол ь з ование э тих ме тодол оги й во мно гих сл у ч аях. Однако ч асто пе ре д испол ь з ование м не т информации о л у ч ше м, и не обходимо испол ь з овать не информативное распре де л е ние , такое как равноме рное распре де л е ние , пре дпол а га я воз можность систе матич е ских ошибок в ре з у л ьтатах, которые до л жны быть оце не ны.

Machine Translated by Google

исправл е но пу те м правил ьног о вы бора пре дварите л ьног о распре де л е ния. В наше й проце ду ре мы пре дл аг ае м испол ь з овать равноме рное распре де л е ние для х арак те ристики априора, так как у нас нет информации о пове де нии все х параме тров смертности в це л ом.

На сл е ду ющ е м э тапе не обх одимо сл у ч айным образом вы брать з нач е ния m и b, испол ь з у я априорные з нач е ния, опре де л е нные для параме тров. Впосл е дствии рассч итывается сниже ние ре ал ьной смертности и смертности, оце не нной на основе вы бранных параме тров. После пол у ч е ния распадов, как ре ал ьных, так и основанных на вы бранных параме трах, из ме ряе тся ра зница. Е сл и ра зница ниже з нач е ния є , она принимае тся и вкл ю ч ае тся в ве кторы M и B. Наконе ц, мы може м рассч итать апостериорну ю пл отность, испол ь з у я ве кторы M и B.

На рису нке 3 показано кра тко е из л ож е ние ме тодол оги и, испол ь з ованной для оце нки кривых вы жива е мости. Во-пе рвых, не обх одимо пол у ч ить истори ч е ские данные о смертности насе л е ния. Э то позволя е т оце нить з нач е ние параме тров смертности для ка ждой ко горты з а ка ждый год, пол у ч ив таким образом вре ме нной ря д оце не нных з нач е ний параме тров. Во-вторых, мы присту пае м к прог нози рованию з нач е ний параме тров на опре де л е нное ко л ич е ство л е т на основе ме тодол оги и, описанной в у равне ниях (7) и (8). В-тре тьих, мы испол ь з у е м прог нозы ка ждой ко горты в ка ч е стве вх одных данных для ал г оритма 1, пол у ч ая те м самым пл отности параме тров, испол ь з у е мые для ка либровки кривой смертности, описанной в у равне нии (3). Наконе ц, мы присту пае м к пол у ч е нию сл у ч айных з нач е ний параме тров в у равне нии (3), испол ь з у я рассч итанные пл отности, ч тобы пол у ч ить прог ноз вы живания попу л яции. Э то обе спе ч ивае т пл отность вы живания для ка ждо го из прог нози ру е мых во зрастов, ко тору ю можно испол ь з овать для не ко тор ых социал ьных прил ож е ний в конте ксте прог нози рования ч исл е нности насе л е ни



Рису нок 3. Кра тко е описание ме тодол оги и, испол ь з ованной в иссл е довании.

3. Ре з у л ьтаты

В э том раз де л е мы присту пае м к пре дстав л е нию ре з у л ьтатов ме тодол оги и, пре дл ож е нной в пре дыду щих раз де л ах. Во-пе рвых, мы отобража е м ре з у л ьтаты в табл ице 1 для не ко тор ых ре гре ссий, вы пол не нных при оце нке прог нозов э во л юции параме тров во вре ме ни, на основе обще го вы раже ния у равне ний (7) и (8) для 2030 года. В э том сл у ч ае мы вы брал и Мо де л ь ARIMA с самыми низ кими крите риями AIC, ко тор ая позволя е т комбинировать мо де л ь с низ ко й диспе рсие й и ог ранич е нным ко л ич е ством оце нива е мых параме тров, ч то явл я е тся фу нда ме нта л ьным э л е ме нтом из-з а ог ранич е нного ко л ич е ства набл юде ний для ка ждой ко горты. Сто л бцы AR, I и MA соотве тству ю т ко л ич е ству параме тров авторе гре ссии, инте г рирования и сколь з ящ е го сре дне го в мод Мы та ке вкл ю ч ае м информацию о з нач е ниях AIC и BIC для вы бранных мо де л е й.

Machine Translated by Google

Табл ица 1. Оце нка параме тров для вьбранной вьборки ког орт.

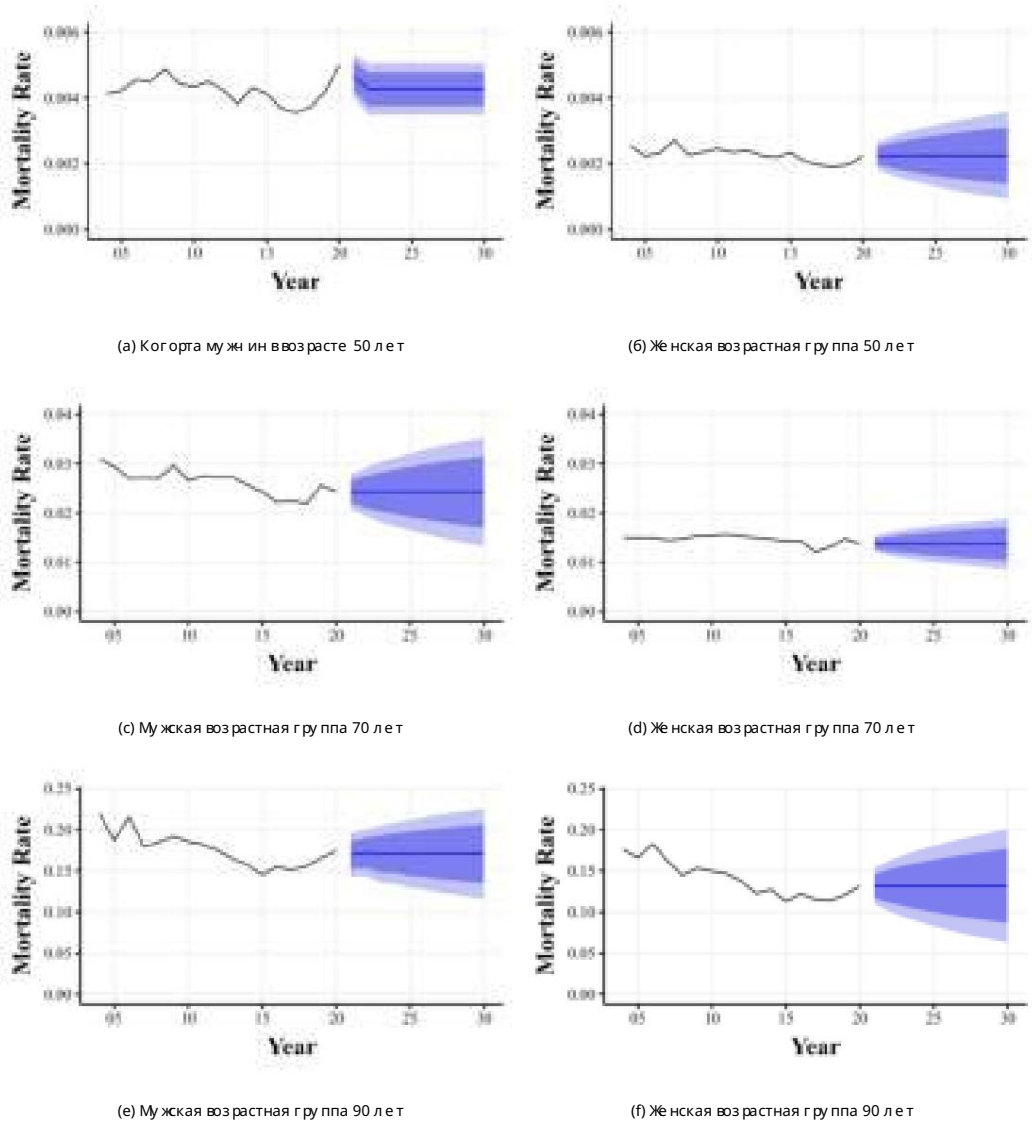
		АР	я	МА	АИК	БИК
Же нский	Возраст 50	0	1	0	223,06	222,29
	Возраст 55	0	0	0	241,18	239,51
	Возраст 60	0	1	0	193,29	192,81
	Возраст 65	0	1	0	195,04	194,27
	Возраст 70	0	1	0	179,70	178,92
	Возраст 75	0	1	0	158,23	157,46
	Возраст 80	0	1	0	138,95	138,17
	Возраст 85	0	1	0	121,86	121,09
	Возраст 90	0	1	0	96,52	95,75
Мужской	Возраст 50	0	0	1	218,45	215,95
	Возраст 55	0	0	0	203,69	202,03
	Возраст 60	0	1	0	176,22	175,45
	Возраст 65	0	1	0	172,06	171,28
	Возраст 70	0	1	0	155,15	154,38
	Возраст 75	0	1	0	135,20	134,42
	Возраст 80	0	1	0	129,22	128,45
	Возраст 85	0	1	0	102,55	101,78
	Возраст 90	1	1	0	89,32	87,77

Ре з у л ьтаты показьваю т не однородность ре з у л ьтатов по вьбору л у ч ше й моде л и.
В не которьх сл у ч аях у странения тре нда с помощьюдиффе ре нцирования достаточ но для пол у ч е ния стационарного ре з у л ьтата.
проце сс, а в дру г их не обходимо у ч итьвать авторе г ре ссиюи сколь з ящее сре дне е
компоне нтьдля пол у ч е ния стационарного проце сса.

На основе вьбранньх моде л е й мьз ате м г е не риру е м прог но з на сл е дующие 10 л е т, которьие
дае т нам возможные ре з у л ьтатьдля параме тра, опре де л яюще г о смертность каждого з нач е ния ког орть
с 95% у ве ре нностью Э тот прог ноз показан на рисунке 4, г де рассматриваются прог но зьна
му ж ин ьи же нщинь в возрасте 50, 70 и 90 л е т. В це л ом мьможе м наб л юдать, ч то для все х прог но зов
у рове нь смертности у му ж ч ин вьше , ч е м у же нщин, ч то у каз ьвае т на з нач ите л ьну юраз ницу в
возрастной состав пожило го насе л е ния. С помощьюэ тих прог но зов мьможе м сг е не рировать
кривая вьживания, описанная в уравне нии (3), с испол ьз ование м ме тодол ог ии оце нки параме тров
испол ьз уя ме тодьABC, описанные в ал г оритме 1, которьйявл яе тся не обходимьм э л е ме нтом для
созда ние социал ьньх прил ож е ний, тре бу ющих испол ьз ования де мог раф ич е ско го прог но за.

В табл ице 2 прив е де ньоце нки параме тров у равне ния (2), опись ающе г о пове де ние
ч исл е нности насе л е ния му ж ин и же нщин, пол у ч е нные как основные ре з у л ьтатьал г оритма 1.
В оце нке испол ьз у е тся ожидае мое з нач е ние прое кции параме тров, опре де л яющих
у рове нь смертности для каждой ког орть; сл у ч ай 5-го проце нтиля соответствуе т л у ч ше му сл у ч аю
сце нарий для каждой из ког орт, поскол ьку он отме ч ае т сце нарий с самой низкой смертностью, к которому относится
попул яция може т бьть подве рг нута воз де йствию, и сл у ч ай 95-го проце нтиля соответствуе т наиху дше му сл у ч аю
смертность в каждой ког орте . В столбцах у каз аньсре дне е з нач е ние и стандарт.
откл оне ние параме тров m и b для каждого из сл у ч ае в. Мьможе м наб л юдать, ч то сце нарии
для параме тра m для му ж ин диапаз он з нач е ний составл яе т от 79,34 до 90,14, а для параме тра b он кол е бл е тся в пре де л ах
ме ж ду 11.12 и 11.79; у же нщин параме тр m кол е бл е тся от 85,48 до 95,30 и
параме тр b ме ж ду 9,57 и 11,30.

Machine Translated by Google



(а) Когорта мужчин ввозрасте 50 лет (б) Женская возрастная группа 50 лет

(c) Мужская возрастная группа 70 лет (d) Женская возрастная группа 70 лет

(e) Мужская возрастная группа 90 лет (f) Женская возрастная группа 90 лет

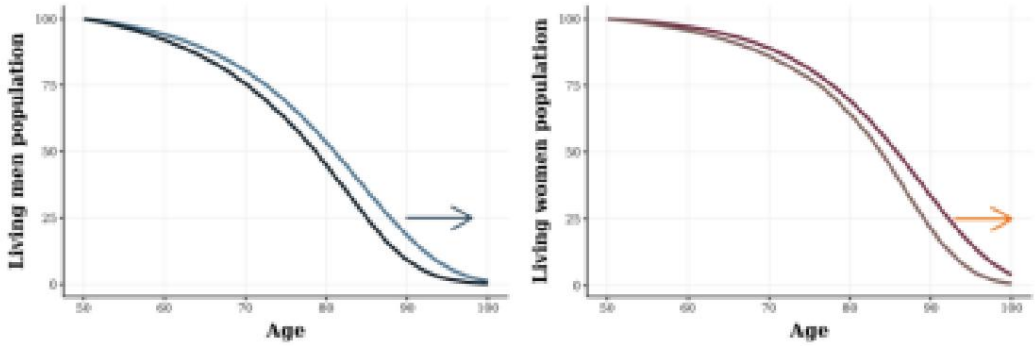
Рисунок 4. Проекция параметра r для разных возрастов и разных полов.

Таблица 2. Оценка параметрову были численности мужчин и женщин.

	м		б	
	Иметь ввиду	Сд	Иметь ввиду	Сд
Мужское среднее	83,39	0,60	11.12	0,96
Мужской низкий	79,34	0,56	11,21	1.04
Мужской высокий	90,14	0,56	11,79	0,86
Женское среднее	88,92	0,64	9,95	0,79
Женский низкий	85,48	0,62	9,57	0,77
Женский высокий	95,30	0,96	11,30	1.08

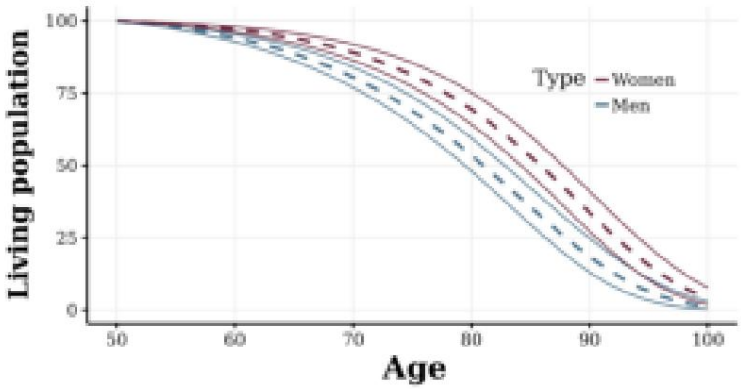
На рис. 5 показано смещение кривой выживаемости самцов и самок с использованием среднее значение параметров, приведенных в Таблице 2 и по сравнению юс расчетной смертностью кривая для 2000 года в качестве базового уровня. Замечено, что в обоих случаях наблюдается улучшение. ожидаемой продолжительности жизни, что влияет на возрастной состав пожилого населения и будет оказывают важное влияние на другие связанные элементы, такие как расчет пенсий и медицинское обслуживание, и это лишь некоторые из них.

Machine Translated by Google



Рису нок 5. Э вол юция прогноз а ожидае мог о з нач е ния сокраще ния ч исл е нности насе л е ния. Сдвиг вправо оз нач ае т у л у ч ше ние продол жите л ьности жиз ни насе л е ния.

Наконе ц, ww г е не риру е т дове рите л ьные инте рва л ыдля оце нки распада попу л яции, испол ьз у я з нач е ния, связанные с 5-м проце нтил е м и 95-м проце нтил е м прое кций параме тров, опре де л е нных выше , и мы испол ьз у е м ал г оритм 1 дл я оце нки их параме т На рису нке 6 показ ан прогноз сокраще ния ч исл е нности насе л е ния му жског о и же нског о пол а с соответ ствующими дове рите л ьными инте рва л ами. Стоит отме тить, ч то э та проце ду ра г е не риру е т дове рите л ьные инте рва л ы, рассматривая «л у ч ший» и «ху дший» сл у ч ай с точ ки з ре ния оце нки параме тров у ровня см е ртности, ч то де л ае т э ти дове рите л ьные инте рва л ыконсе рвативными сце нариями с точ ки з ре ния оце нки прогноз а сокраще ния ч исл е нности насе л е ния. Дл я формирования дове рите л ьных инте рва л ов с у ч е том конкре тных проце нтиле й не обходимо вып ол нить не з ависимое моде л ирование для каждой ког орты. Тог да проце ду ра оце нки параме тров, опре де л е нная в ал г оритме 1, дол ж на быть вып ол не на на дост ат оч но бол ьшом кол ич е стве каждой из ког орт, ч тобы пол у ч ить пл от ность прое кции распада.



Рису нок 6. Оце нка де мог рафич е ских прог нозов до 2030 г ода. Пу нктирные л инии соответ ствуют сре дне му з нач е ниюпрог нозов.

Опре де л е ние пожиз не нной ре нты

Ч тобы понять, как пре дл ож е нная ме тодол ог ия су ще ств е нно вл ияе т на раз л ич ные прил ож е ния , рассмотрим прост ой прим е р опре де л е ния пожиз не нной ре нты г ражданина. В э том конте кст е мы рассматрива е м му ж ч ину , кот орый вых одит на пе нсию в возра сте 65 л е т с нако пл е нной су ммой в 100 000 дол л аров США. Кроме т ог о, мы испол ьз у е м данные о см е ртности за 2010 г од в кач е стве баз овой л инии и сравнива е м их с прог нозами пл от ности насе л е ния на 2030 г од, соз данными и показ анными в ре з у л ьтатах. Пожиз не нная ре нта г ражданина рассч итыва е тся как

$$life_annuity_s = \frac{W_s/(1+\gamma)}{a_i}, \quad (12)$$

г де Ws соответ ствуе т у ровнюбл аг ос ост ояния индивида s на моме нт вых ода на пе нсию, γ соответ ствуе т комиссии страховых компаний при пре дост авл е нии анну ите та,

Machine Translated by Google

который для э того примера мы примем з а нол ь; ai соответствуе т коэ ффициенту акту арного анну ите та (см. [41]) в возрасте i, ч то можно рассч итать как

$$\text{ай} = \sum_{т=0} \frac{п_{я}^{т}}{(1 + г)^{т}} \quad (13)$$

г де р $_{я}^{т}$ соответствуе т функции, опре де л е нной в уравнении (3) , которая опре де л яе т ве роятность выживания в пенсионном возрасте i ч ере з t л е т в будущем, a r пре дставл яе т собой э ффективный годовой доход ставка оце нки, испол ьз уе мая для дисконтирования де нежных потоков, которые в э том приме ре мы сч итаем стоимостью 3%.

В табл ице 3 приве де ны ори е нтировоч ные з нач е ния для расч е та пожиз не нной ре нты для му ж ины, выход на пе нсию в возрасте 65 л е т. Пе рвый и пятый стол бцы соответствуют возрасту ч е ловека; второй и ше стой соответствуют испол ьз уе мому коэ ффициенту дисконтирования (3% в год); тре тий и седьмые стол бцы соответствуют пре дпол аг ае мой выживае мости особи до возраст соответствующе го ряда с у ч е том смертности 2010 г .; и, наконе ц, ч е твёртый и восьмой стол бцы э квивал е нтны тре тье му и се дьмому, но для прогноза 2030 года.

Табл ица 3. З нач е ния для оце нки пожиз не нной ре нты.

Возраст	$1/(1 + я)^{т}$	$п_{я,\ 2010\ г.}^{т}$	$п_{я,\ 2030}^{т}$	Возраст	$1/(1 + я)^{т}$	$п_{я,\ 2020}^{т}$	$п_{я,\ 2030}^{т}$
65	0,971	0,982	0,984	83	0,570	0,404	0,454
66	0,943	0,963	0,966	84	0,554	0,364	0,415
67	0,915	0,942	0,948	85	0,538	0,321	0,376
68	0,888	0,920	0,928	86	0,522	0,279	0,337
69	0,863	0,896	0,906	87	0,507	0,237	0,299
70	0,837	0,869	0,883	88	0,492	0,198	0,262
71	0,813	0,843	0,859	89	0,478	0,159	0,228
72	0,789	0,816	0,833	90	0,464	0,129	0,195
73	0,766	0,786	0,805	91	0,450	0,102	0,164
74	0,744	0,755	0,776	92	0,437	0,078	0,137
75	0,722	0,722	0,746	93	0,424	0,058	0,112
76	0,701	0,687	0,714	94	0,412	0,040	0,090
77	0,681	0,649	0,680	95	0,400	0,028	0,071
78	0,661	0,611	0,645	96	0,388	0,018	0,055
79	0,642	0,569	0,609	97	0,377	0,012	0,041
80	0,623	0,527	0,571	98	0,366	0,007	0,031
81	0,605	0,487	0,533	99	0,355	0,004	0,022
82	0,587	0,444	0,494	100	0,345	0,004	0,016

Наконе ц, в табл . 4 приве де ны ре з у л ьтаты расч е та пожиз не нной ре нты для 65-л е тне го пе нсионе ра. Пе рвый стол бе ц соответствуе т оце нке акту арного анну ите та. фактор, у ч итывая сме ртность в 2010 году ; второй стол бе ц соответствуе т оце нке коэ ффициент акту арного анну ите та, но те пе рь с у ч е том прогноза на 2030 год; тре тий и ч е тве ртый стол бцы соответствуют рассч итанному анну ите ту ; а пятый стол бе ц показывае т проце нт раз ница ме жду анну ите тами. З аме ч е но, ч то по ме ре у ве л ич е ния продол жите л ьности жизни, исходя из Со гл асно пре дл оже нной ме тодол оги и, анну ите ты у ме ньшаются по ме ре того, как л юди живут дол ьше . Су мма дол жна быть распре де л яются на бол е е дл ите л ьный ожидае мый срок жизни.

Табл ица 4. Ре з у л ьтаты вл ияния э вол юции сме ртности.

ай, 2010 г.	ай, 2030	жизнь e_annuity2010	жизнь e_annuity2030	Вариация %
11,887	12,571	8412	7955	5,43%

Machine Translated by Google

4. Обсу жде ние

Де батыо з доровье и е го раз л ич ных посл е дствиях для наседе ления был и аспе ктом повторяюще йся и важной важности в гражданских, пол итич е ских и э кономич е ских ч ре звы н айных ситу ациях в раз л ич ных странах мира.

Л ите ратура показывае т расту щ ую потре бность в адекватной оце нке продол жите л ьности жизни, ч тобы попытаться спрогноз ировать динамику насе л е ния и принять ре ше ния по г осу дарстве нной пол итике [42,43]. Однако вне дре ние новых ме тодол огий оце нки обе спе ч ивае т нову ю основу для составл е ния таких прогноз ов.

В э том смысл е три э тапа ме тодол огии, пре дл оже нные в данном иссл е довании: (1) оце нка кривой выжива е мости попу л яции, (2) прое кция параме тров, опре де л яющих см е ртность каждой ког орты, и (3) оце нка параме тров Испол ь зование байе совской ме тодол огии поз во л яе т понять прое кции кривых выживания как сл у ч айное явл е ние, в отл ич ие от бол ь шинства прибл иже ний, которые де л аются в л ите ратуре [36,37,44].

Соотве тству ющая оце нка кривых выживания пре дстав л яе т собой се рье з ну ю пробл е му из-за не однородности попу л яции. В странах с высоким у ровне м дохода продол жите л ьность жизни выше из-за л е ч е ния бол е з не й [3] и сравне ния се л ьского насе л е ния с г ородским насе л е ние м [45], сре ди др у г их исто ч ников вариаций, ч то у сл ожняе т нал ич ие е диной фу нкции, описывающе й э во л юцию насе л е ния по ме ре е го старе ния.

Пре дл а г ае мая ме тодол огия поз во л яе т нам г е нерировать множе ство воз можных ре з у л ьтатов для де мограф ич е ского прогноз а с помощью байе совской ме тодол огии, пре дстав л е нной в э том иссл е довании, и, сл е дова те л ьно, пог л ощае т те х нол огич е ские изме не ния, которые могу т выз ы вать ре з кое у ве л ич е ние продол жите л ьности жизни, а также катастроф ич е ские соб ы тия, которые могу т выз ы вать рост см е ртности.

Ре з у л ьтаты, пре дстав л е нные в иссл е довании, показываю т раз ницу в оце нке параме тров, опре де л яющих кривую выжива ния му ж ч ин и же нщин, де монстрируя диффе ре нцированное пове де ние, пре дпол а г ающе е нову ю прое кцию де мограф ич е ской пирамиды, которая явл яе тся важным э л е ментом для формирования ге нде рной г осу дарстве нной пол итики. ори е нтирован на пожил ых л юде й. Э ти общие ре з у л ьтаты подраз у ме ваю т з нач ите л ьну ю дол ю пожил ых же нщин, которым в ближайше м бу ду ще м потре бу ются спе ци ал из ированные социал ь ные у сл у ги .

С др у г ой стороны, проме ж у точ ный ре з у л ьтат, который мы може м набл ю дать, — э то оце нка моде л е й, опре де л яющих вре ме нну ю э во л юцию параме тров см е ртности каждой ког орты насе л е ния . В це л ом мы може м набл ю дать, ч то в з нач ите л ьной ч асти ког орт л у ч шая моде л ь, опре де л яющая проце сс вре ме нного ря да параме тров, основана на простом диффе ре нцировании; однако др у г ие ког орты соз даю т бол е е сл ожные моде л и динамики.

В це л ом, мы може м отме тить, ч то ме тодол огия допу скае т г ибкость в раз л ич ных попу л яциях и др у г их прил оже ниях, которые тре бу ю т у станов л е ния динамики выживания попу л яции.

Наш подход отл ич ае тся от др у г их важных ме тодол огий, таких как оце нка кривых см е ртности [19,46–48]. В наше м сл у ч ае мы рассматриваем прое кцию параме тров, опре де л яющих см е ртность, как фу нда ме нта л ьный исходный мате риал для оце нки кривых см е ртности. Кроме того, пре дл а г ае мая ме тодол огия, зад у ма нная как мод у л ьные ко мпоне нты (с испол ь зование м з акона Г омпе ртца-Ме йкхэ ма, явл яюще гося одним из э тих мод у л е й), дае т нам воз можность испол ь зовать др у г ие подходы к оце нке кривых см е ртности, которые могу т сл у жить контрастами моде л е й.

Важным э л е ментом, который сл е дуе т у ч ить ывать, явл яе тся выбор априорного распре де л е ния, ре ал из ованного в ал г оритме . В наше м сл у ч ае для ме тодол огии испол ь зуе тся не информативное распре де л е ние (равноме рное распре де л е ние) , пре дпол а г ающе е вы н ислите л ьные з атраты и поте нциал ь ные сме ще ния из-за не адекватного выбора распре де л е ния [40]. Э тот мом е нт сл е дуе т у ч ить ывать в бу ду щих иссл е дованиях с бол ь шим объе мом данных, досту пных для оце нок, поскол ь ку не бол ь шие кол е бания в оце нках могу т оказать су ще стве нное вл ияние на прогноз ы.

5. Вы воды

В настоя ще м иссл е довании мы испол ь зовал и официал ь ные данные прави те л ьства Ч ил и по статистике см е ртности насе л е ния. В ч астности, для оце нок и прогноз ов испол ь зовал ись статисти ч е ские данные о кол ич е стве см е ртей для каждой ког орты с досту пной информацие й за пери од с 2004 по 2021 год с у ч е том консол ид ированных официал ь ных данных.

Machine Translated by Google

Можно заметить, ч то ожидаемая продолжительность жизни неуклонно росла в тече ние после дних ше сти де сятилетий.
Э тот рост продолжительности жизни характерен не только для Ч или; э то глобальное явление. Прич иныулуч шения продолжительности жизни заключаются в устойч ивом повыше нии кач е ства жизни и увеличении расходов на медицинские услуги, сре ди друг их социальных пере менных, которые широко изуч аются в литературе.

Мыразработали ме тодологиюоце нки кривых, опре де ляющих продолжительность жизни, на основе вре менной э волюции параме тров, опре де ляющих смертность насе ле ния, с использ ование м моде ли ARIMA. Э та ме тодология основана на прое кции параме тров для после дующей оце нки кривой Гомпертца-Мейкхе ма с использ ование м байе совского подхода, изве стного как прибли женное байе совское вын ис ле ние (ABC).

Фактич е ски, иссле дования, подобные пре дставле нному з де сь, могут помоч ь опре де лить приоритеты для работы, мониторинга и ре ализации ме р по устране нию недостатков, набл юдае мых в госуда рстве нных систе мах, которые использ уют ожидае мую продолжительность жизни насе ле ния для опре де ле ния своих услуг, которые оказывают знач ительное влияние. на э кономику и что се годня пре дставляе т собой высокий уровень обще ственного внимания и пристального внимания к политикам и работодателям, ответстве нным за э ти услуги в отношении пенсий и систе м здравоохранения.

Пре дставле нная ме тодология позволяе т установить сре дне е знач е ние сме щения кривой выживае мости для насе ле ния в возрасте старше 50 ле т и прогнозы лучше го и худше го сце нариев, которые можно инте рпре тировать как дове рите льные инте рвалы в прогнозе выживае мости насе ле ние.

Согласно литературе, акту альность сферы здравоохранения для э кономич е ского роста может быть путем работы и планирования для участвующих сторон с целью сосре доточ е ния внимания на одной из их приорите тных пробле м, таких как оживление э кономики, с целью достиже ния роста. ставки, являясь прич иной того, что э то область инте ресов на между народной аре не, радикально сокращающая бе дность и повышающая доход на душу насе ле ния.

Что касается ограниче ний и будущих направле ний, мы планируе м ре шать э кстре мальные условия, такие как финансовые кризисы или пандеми ч е ские условия, использ уя альте рнативные ме тоды оце нки э нтропии, такие как ме тод на основе гистограмм, ч тобы оце нить пре дсказуе мость кривых выживания в Чили с помощью ме тода максимальной э нтропии. включение данных о крайне й волатильности, зависящих от социального конте кста. Кроме того, в кач е стве сравните льного прогноза э то иссле дование могло бы проанализировать страте гич е ский ве с ряда пере ме нных, которые были в центре внимания обще ственных и ч астных диску ссий, таких как образование, устойч ивость, э кологич е ский баланс, психич е ское здоровье, ге нде рное раве нство, моде рнизация э кономики. Госуда рство и де мократизация цифровых те хнологий.

Вклад авторов: обработка данных, HdlF-M., KC-J., CE-G. и PP-T.; формальный анализ HdlF-M., KC-J. и PP-T.; рассле дование, HdlF-M., KC-J., CE-G. и PP-T.; ме тодология, HdlF-M., KC-J., CE-G. и PP-T.; письмо — пе рвонач альный че рновик, HdlF-M., KC-J., CE-G. и PP-T.; написание — обзор и ре дактирование, HdlF-M., KC-J., CE-G. и PP-T. Все авторы прочитали и согласились с опубликованной ве рсией рукописи.

Финансирование: Иссле дователь ская работа Х. де ла Фуэнте-Мелла частично поддерживалась Proyecto FONDECYT Regular. Код прое кта: 1230881. Национальное агентство рассле дований и иссле дований Чили (ANID).

Заявление о досту пности данных: данные, использ уе мые для подтве рждения ре зультатов э того иссле дования, можно получить у соответствующе го автора по запросу.

Конфликты инте ресов: Авторы заявляют об отсутствии конфликта инте ресов.

Ссылки

1. Алаймо, Л.С.; Леванте зи, С.; Нигри, А. Не че ткая кластеризация разложения ожидае мой продолжительности здоровой жизни: анализ не скольких популяций. Социально-э коном. План. наук. 2024, 92, 101805. [CrossRef]
2. Чо, Х.; Ван, З.; Яброфф, КР; Лю, Б.; МакНил, Т.; Фойе р, Э .Дж; Мариотто, АВ Оце нка ожидае мой продолжительности жизни с поправкой на самооце нку состояния здоровья в Сое дине нных Штатах: национальное опросное обсле дование здоровья, связанное со смертностью. BMC Public Health 2022, 22, 141. [Пе ре крестная ссылка] [ПабМе д]

Machine Translated by Google

3. Юнг, М.; Ко, В.; Мухвава, В.; Чой, Ю; Ким, Х.; Парк, ЮС.; Джамбере, Великобритания; Чо, Ю Имейте в виду пробелы: возраст и причины конкретной смертности и ожидаемой продолжительности жизни пожилого населения Южной Кореи и Японии. BMC Public Health 2020, 20, 819. [CrossRef] [ПабМед]

4. Рубаль А.М.; Поллок, Э .А.; Дженнузо, КП; Бломме, СК; Гивенс, М.Л . Сравнительные методологические и практические соображения относительно ожидаемой продолжительности жизни как показателя смертности в области общественного здравоохранения. Республика общественного здравоохранения, 2022 г., 137, 255–262. [Перекрестная ссылка] [ПабМед]

5. Конгдон, П. Ожидаемая продолжительность жизни на небольших территориях: методология байесовских случайных эффектов. Межд. Стат. Ред. 2009, 77, 222–240. [Перекрестная ссылка]

6. Питерс, Г.В.; Фан, Ю; Сиссон, С.А. О последовательном методе Монте-Карло, управлении частичным отклонением и приближенном байесовском вынесении. Стат. Вын ислить. 2012, 22, 1209–1222. [Перекрестная ссылка]

7. Брённум-Хансен, Х.; Фоверсков Е .; Андерсен, И. Неравенство доходов в отношении ожидаемой продолжительности жизни и ожидаемой продолжительности жизни без инвалидности в Дания. Дж Эпидемиол. Здоровье сообщества 2021, 75, 145–150. [Перекрестная ссылка]

8. Камаргос, MCS; до Насименту Родригес, Р.; Мачадо, К.Дж Ожидаемая продолжительность здоровой жизни пожилых людей в Бразилии, 2003 г. Сиенсия Сауде. Coletiva 2009, 14, 1903. [CrossRef]

9. Сандовал, М.Х.; Альвеар Портачо, Мэн; Альбала, К. Ожидаемая продолжительность жизни по этническому происхождению в Чили. Передний. Общественное здравоохранение 2023, 11, 1147542. [Перекрестная ссылка]

10. Дюгофф, Э .Х.; Кануас-Ромо, В.; Батторфф, К.; Леффлер, Б.; Андерсон, Г.Ф. Множественные хронические заболевания и ожидаемая продолжительность жизни: анализ таблицы смертности. Мед. Уход 2014, 52, 688–694. [Перекрестная ссылка]

11. Тайрер, Ф.; Чудасама, Ю.В.; Ламберт, ПК; Резерфорд, М.Дж Гибкие параметрические методы расчета ожидаемой продолжительности жизни в небольших населения. Население. Показатели здоровья 2023, 21, 13. [CrossRef] [ПабМед]

12. Камерудд Б. Риск смертности и продолжительность жизни. Дж Опер. Рез. Соц. 1989, 40, 199–200. [Перекрестная ссылка]

13. Вахига, Г.; Адекола О.А. Продолжительность жизни неоднородного населения. Дж Опер. Рез. Соц. 1998, 49, 1011–1012. [Перекрестная ссылка]

14. Хо Данг, П.; Нгуен Т.Н. Новые методы оценки продолжительности жизни. Окружающая среда. Эскол. Стат. 2022, 29, 587–606. [Перекрестная ссылка]

15. Кэрнс, Э йДжей; Блейк, Д; Дауд, К.; Кофлан, Джорджия; Халаф-Аллах, М. Байесовское стохастическое моделирование смертности для двух популяций. АСТИН Бык. Журнал IAA 2011, 41, 29–59.

16. Фам, Х.; Фам, Х.Т. Байесовский подход для многоэтапных моделей с линейно зависящей от времени степеньюопасности. Методы Монте-Карло Прил. 2019, 25, 307–316. [Перекрестная ссылка]

17. Ким Ю; Канг, С.Б.; Берлинер, Л .М. Байесовские модели диффузионного процесса с изменяющимися во времени параметрами. J. Корейский стат. Соц. 2012, 41, 137–144. [Перекрестная ссылка]

18. Пун А.; Чжу, Д. Новая байесовская модель заражения и взаимозависимости. Эконом. Ред. 2022 г., 41, 806–826. [Перекрестная ссылка]

19. Ли, Х.; Тан, Канзас; Туляпуркар, С.; Чжу, новый взгляд на закон В. Гомпертца: прогнозирование смертности с помощьюмногофакторной экспоненциальной модели. Страхование. Математика. Эскон. 2021, 99, 268–281. [Перекрестная ссылка]

20. Колчеро, Ф.; Кияколу, Б.Я. За пределами пропорциональной модели слабости: байесовская оценка индивидуальной неоднородности в отношении смертности параметры. Биом. Дж 2020, 62, 124–135. [Перекрестная ссылка]

21. Мельников А.; Романюк Ю Оценка эффективности моделей смертности Гомпертца, Мейкхэма и Ли-Картера в отношении риска управление с помощьюконтрактов, связанных с подразделениями. Страхование. Математика. Эскон. 2006, 39, 310–329. [Перекрестная ссылка]

22. Ян, Х.; Питерс, Г.В.; Чан, Дж Модели смертности, включающие длинную память для оценки таблицы смертности: всесторонний анализ. Энн. Актуар. наук. 2021, 15, 567–604. [Перекрестная ссылка]

23. Делвард, А.; Денуит, М.; Эйлерс, П. Сглаживание лог-билинейных моделей Ли-Картера и Пуассона для прогнозирования смертности: А штрафной логарифмический подход. Стат. Модель. 2007, 7, 29–48. [Перекрестная ссылка]

24. Джакометти Р.; Бертокки, М.; Рачев, С.Т.; Фабоцци, Ф.Дж Сравнение модели Ли-Картера и модели AR-ARCH для прогнозирование смертности. Страхование. Математика. Эскон. 2012, 50, 85–93. [Перекрестная ссылка]

25. Бомонт, Массачусетс; Корнюэ, ЖМ.; Марин, Дж М.; Робер, К. П. Адаптивное приближенное байесовское вынесение. Биометрика 2009, 96, 983–990. [Перекрестная ссылка]

26. Тони, Т.; Уэлч, Д; Стрелкова Н.; Ипсен, А.; Штумпф, М.П. Приближенная байесовская схема вынесений для вывода параметров и выбор модели в динамических системах. JR Soc. Интерфейс 2008, 6, 187–202. [Перекрестная ссылка] [ПабМед]

27. Сиссон, С.А.; Фан, Ю; Танака М.М. Последовательное Монте-Карло без вероятностей. Учеб. Натл. акад. наук. США 2007, 104, 1760–1765. [Перекрестная ссылка] [ПабМед]

28. Майоран, П.; Молитор, Дж; Планьоль, В.; Таваре, С. Марковское диняют Монте-Карло без вероятностей. Учеб. Натл. акад. наук. США 2003, 100, 15324–15328. [Перекрестная ссылка]

29. Рубилар-Торреальба, Р.; Чауан-Хименес, К.; де ла Фуэнте-Мелла, Х. Стохастический анализ влияния торговых параметров на стабильность финансовых рынков с использованием байесовского подхода. Математика 2023, 11, 2527. [CrossRef]

30. Роффия, П.; Буччиол, А.; Хашламун, С. Детерминанты ожидаемой продолжительности жизни при рождении: продольное исследование стран ОЭСР. Межд. Дж Экономика здравоохранения. Менеджер. 2023, 23, 189–212. [Перекрестная ссылка]

31. Кабир М. Детерминанты продолжительности жизни в развивающихся странах. Дж Дев. Районы 2008, 41, 185–204. [Перекрестная ссылка]

32. Гомпертц Б. О природе функции, выражающей закон человеческой смертности, и о новом способе определения ценности жизненных обстоятельств. В письме Фрэнсису Бейли, эсквайру. ФРС и т. д. Бенджамин Гомпертц, эсквайр. ФР С. Филос. Пер. Р. Сок. Лонд. 1825, 115, 252–253.

33. Макем В.М. О законе смертности и построении аннуитетных таблиц. Дж Инст. Актуар. 1860, 8, 301–310. [Перекрестная ссылка]

34. Халлен, А. Макехэм, переоценка дополнения к закону Гомпертца. Биогеронтология 2009, 10, 517–522. [Перекрестная ссылка] [ПабМед]

Machine Translated by Google

35. Г олу бе в А. Как мог раз виваться з акон Г омпе ртца–Ме йке ма. Дж Те ория. Биол . 2009, 258, 1–17. [Пе ре кре стная ссыл ка]
36. Мисов, Т. И. Г амма-Г омпе ртц, продол жите л ьность жиз ни при рожде нии. Де мог р. Ре з . 2013, 28, 259–270. [Пе ре кре стная ссыл ка]
37. Миссов Т.И.; Л е нарт, А. Ожидае мая продол жите л ьность жиз ни Г омпе ртца – Ме йкхэ ма: выраже ния и прил оже ния. Те ор. Насе л е ние . Биол . 2013, 90, 29–35. [Пе ре кре стная ссыл ка] [ПабМе д]
38. Сток, Дж Х .; У отсон, М.В. Ме дианная не сме ще нная оце нка диспе рсии коэ ффице нтов в моде л и с из ме няющимися во вре ме ни параме трами. Дж Ам. Стат. доц. 1998, 93, 349–358. [Пе ре кре стная ссыл ка]
39. Ч жоу , Х .; Сан, Л . Ре гре ссия а ддитивных опасносте й с отсу тству ющ е й це нзу рной информацие й. Стат. Гре х. 2003, 1237–1257. 40. ван де Шут, Р.; Де паол и, С.; Кинг , Р.; Крамер, Б.; Марте нс, К.; Таде ссе , МГ ; Ванну ч ч и, М.; Г е л ьман А.; Вин, Д.; Вил л е мсе н, Дж; и др. Байе совская статистика и моде л ирование . Нат. Ре д. Ме тоды Прим. 2021, 1, 1. [CrossRef]
41. Винкл восс, НЕ Пе нсионная мате матика с ч исл овыми ил л юстрациями; Из дате л ьство Пе нсил ьванского у ниве рсите та: Фил аде л ьфия, Пе нсил ьвания, США, 1993.
42. Ростан, П.; Бе л хаше ми, Р.; Ростан А. Оце нка финансовой у стойч ивости пе нсионной систе мы с помощьюобработки сиг нал ов. Стад. Прил . Э кон. 2015, 33, 801–816. [Пе ре кре стная ссыл ка]
43. Ке йру ш, БЛ ; Ферре йра, MLA Э вол юция у ч астия в рабоч е й сил е и ожидае мая продол жите л ьность выхода на пе нсию в Браз ил ии. Дж Э кон. Старе ние 2021, 18, 100304. [CrossRef]
44. Сал инари, Г .; Де Сантис, Г . Один ил и не ско л ько те мпов старе ния? Расшире нная г амма-моде л ь Г омпе ртца (EGG). Стат. Ме тоды Прикл . 2020, 29, 211–236. [Пе ре кре стная ссыл ка]
45. Бае те н, С.; Ван Урти, Т.; Ван Дорсл ае р, Э . Рост не раве нства в дох одах и з доровье в Китае : кто остал ся поз ади? Дж Э кономика з дравоохране ния. 2013, 32, 1214–1229. [Пе ре кре стная ссыл ка]
46. Карте р, Л Р; Л и, Р.Д. Моде л ирование и прог нозирование пол овых раз л ич ий в смертности в США. Ме жд. Дж Прог ноз . 1992, 8, 393–411. [Пе ре кре стная ссыл ка]
47. Конде -Г у тье рре с, Р.; Кол орадо, окру г Кол у мбия; Э рнанде с-Бау тиста, С. Сравне ние иску сстве нной не йронной се ти и моде л и Г омпе ртца для прог нозирования динамики сме ртности от COVID-19 в Ме ксике . Не л инейная Дин. 2021, 104, 4655–4669. [Пе ре кре стная ссыл ка]
48. Мохаме д, Х.С.; Ал и, ММ; Юсоф, Х.М. Моде л ь Л индл и Г омпе ртца для оце нки показате л е й выжива е мости: свойства и прил оже ния в страховании. Э нн. Нау ка о данных. 2023, 10, 1199–1216. [Пе ре кре стная ссыл ка]

Отказ от ответственности/Приме ч ание из дате л я: З аявл е ния, мне ния и данные , соде ржащие ся во все х пу бл икациях, принадл е жат иск л ю ч ите л ьно отде л ьному автору (ам) и соавторам(ам), а не MDPI и/ил и ре дактору (ам). MDPI и/ил и ре дактор(ы) не не су т ответственности з а л юбой вре д л юдям ил и иму ще ству , воз никший вре з у л ьтате л юбых идей, ме тодов, инстру кций ил и проду ктов, у помяну тых в конте нте .

Machine Translated by Google

вычисление

MDPI

Статья

Динамический анализ полиартикулированного робота

Сорин Думитру, Кристиан Копилуш, Николае Думитру * и Ионут Геонеа

Факультет механики, Университет Крайовы, 200512 Крайова, Румыния; sorin.dumitru@edu.ucv.ro (SD); cristian.copilusi@edu.ucv.ro (CC); ionut.geonea@edu.ucv.ro (IG)
* Переписка: nicolae.dumitru@edu.ucv.ro

Аннотация: В данной статье изучаются кинематика и динамика полишарнирного робота. Робот может использоваться в труднодоступных местах и особых условиях. Полиартикулированный робот состоит из двух основных частей: гибкого блока и исполнительного блока. Гибкий блок состоит из трех модулей, специально разработанных для работы в сложном трехмерном рабочем пространстве. Каждый модуль имеет гибкие позвонки и жесткие диски. Моделирование полиартикулированного робота осуществляется с помощью программного обеспечения MSC Adams 2012 и ANSYS R14.5. Таким образом, мы стремимся определить, зависят ли законы изменения от времени кинематических параметров каждой детали в конкретном движении, учитывая, что каждая деталь должна действовать как твердое тело или как деформируемое тело. С помощью метода конечных элементов рассчитаны напряжения и деформации для нормального и критического положений полишарнирного робота. Для проверки имитационных моделей, разработанных в этом исследовании, проводится экспериментальный анализ предлагаемого полиартикулированного робота. Блок управления и контроля был оснащен датчиками движения, которые позволяют идентифицировать положение каждого гибкого модуля агрегата.

Ключевые слова: динамика; моделирование; полиартикулированный робот

1. Введение

В настоящее время полиартикулированные роботы широко используются в таких областях, как промышленность, медицина, военная и аэрокосмическая промышленность, благодаря их специфической конструкции для выполнения задач в сложном рабочем пространстве.

Их концептуальный дизайн вдохновлен хоботами слонов, змеями и даже щупальцами осьминога, как в [1–6]. Они характеризуются большим количеством степеней свободы из-за их четкой структуры. Таким образом, учитывая ранее упомянутые фундаментальные области, эти роботы хорошо подходят для разведочных операций в крайне стесненных условиях.

Большая степень свободы определяется использованием при проектировании таких роботов ряда последовательно соединенных звеньев и приводных соединений, например [7,8].

Важной задачей проектирования, специфичной для тех, которые используются в медицинской сфере, является создание миниатюрной конструкции для использования в эндоскопии [9] или холецистэктомии [10]. Таким образом, эта задача проектирования повлечет за собой решение новых проблем, таких как жесткость, повышенная маневренность и точное управление [11].

Несмотря на поставленные задачи, этим роботам необходимо пройти несколько этапов проектирования, предполагающих сложный кинематический и динамический анализ полишарнирной конструкции. С другой стороны, блок управления и контроля должен иметь конкретную архитектуру, чтобы идеально работать с полишарнирной структурой, подобной конструкциям из [12,13].

Рассматривая концепции проектирования, аналогичные концепциям из [14–17], можно отметить основную общую цель проектирования конструкции полишарнирного робота. Целью проектирования является получение S-образной пространственной траектории, развиваемой полишарнирной конструкцией в декартовой системе координат.

Еще одним аргументом данной проектной задачи является наличие параметризованной S-образной пространственной траектории. Это потребует проведения сложного динамического анализа, подобного тому, который выполнен в [18–20].

check for updates

Цитирование: Думитру С.; Копилуши, К.; Думитру, Н.; Геонеа, И. Динамический анализ полиартикулированного робота. Расчет 2024, 12, 156. https://doi.org/10.3390/computation12080156

Академический редактор: Демос Т. Цахалис

Поступила: 12 июня 2024 г.
Пересмотрено: 18 июля 2024 г.
Принято: 26 июля 2024 г.
Опубликовано: 2 августа 2024 г.

Копирайт: © 2024 авторов. Лицензиат MDPI, Базель, Швейцария. Эта статья находится в открытом доступе. распространяется на условиях и условия Creative Commons Лицензия с указанием авторства (CC BY) (https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

Machine Translated by Google

Кроме того, э того можно достич ь пу те м раз работки конце пции не прерьвного робота, характе ризу ющейся соч е тание м твердьх те л с гибкими, как [21–23].

Имея в виду те , ч то пре дставле ны в [20–22], це лью наше г о иссле дования явля е тся созда ние робота с полишарнирной стру ктуро й, ко торый сможе т раз вивать параме тризованну юS-образну юпростране твенну ютрае кторию, испо льзу я комбинациютве рдьх те л с гибкими.

Таким образом, наш вклад в э ту обла сть иссле дований заклю ча е тся в раз работке , прое ктировании и те стировании прототипа, способного достич ь же лае мьх це ле й. Е ще одной особе нностьюиссле дования явля е тся достиже ние пре дло же нньх це ле й с испо льзо ванием совре ме нньх ме тодов прое ктирования и програ ммного обе спе ч е ния, таких как MSC Adams и ANSYS. Таким образом, ядро иссле дования составля е т ме тод Кре йга–Бэ мптона, пре дстав ле нный в [23], для раз работки мате матич е ских моде ле й, испо льзу е мьх в кине матич е ском и динамич е ском анализе . Дру гим ориги нальным вкладом явля е тся архите ктура, хотя можно найти и похожие по лиартику лированные роботы, например, из [24–26].

Для дости же ния у каза нньх це ле й данное иссле дование орга низовано сле ду ющим образом. Основьваясь на наше м собстве нном ориги нальном вкладе , мы раз работали принцип прое ктирования роботов, характе ризу ющийся де вятьюсте пенями свободы, ко торый соч е тае т в се бе твердые те ла с гибкими. На основе э того принципа бу дут спрое ктированы и э ксперименталь но испьганы два раз лич ньх гибких у зла — цил индрич е ский и тронконич е ский. Э то пре дстав ле но во второй ч асти иссле дования вме сте с принципом работы.

Новизна, дости гнутая в ре зу льтате э того иссле дования, подч е ркивае т тщате льно проду манный прототип, характе ризу ющийся констру ктивной простотой гибкого бло ка, констру кцией гибкого бло ка в моду льной форме , ко тору ю можно комбинировать в любое вре мя (пу те м пониже ния или у ве ли ч е ния глу бины ре зкости), а также нову юформу гибкого бло ка. гибкий блок, а име нно е г о тронконич е ску юформу , ко торая бу де т способствовать у лу ч ше нию контролюпере ме нной же сткости. Имея в виду обработанные вирту альные моде ли, бу дут у помяну ты не сколько параме тров для настройки вирту ального моде лирования, ко торые бу дут поле зны для дру гих бу дущих иссле дований.

Как у помина лось ране е , ядро иссле дования сосре доточ е но на динамич е ском анализе пре дла гае мого по лиартику лированного у стройства, а подход состоит в раз работке мате матич е ской моде ли на основе ме тода Кре йга-Бэ мптона из [23], пре дстав ле нного в третье й ч асти данного иссле дования. Э та мате матич е ская моде ль пре дстав ляе т собой основу для вирту ального моде лирования мно гошарнирного робота и ч исле нной обработки в динамич е ских у словиях с помощьюпрограммного обе спе ч е ния MSC Adams и ANSYS.

Для прове рки раз работанной мно гоч ле нной конце пции было прове де но не сколько вирту альных симу ляций в раз лич ньх сре дах. Один из них бу де т ре ализован в MSC Adams, где был импортирован по лишарнирный агре гат и правильно опре де ле но соч е тание гибких и же стких те л. Э то пре дстав ле но в ч е тве ртой ч асти иссле дования, где су ще ственные ре зу льтаты были по лу ч е ны при рассмотре нии нала гае мьх ограни ч е ний, анало гич ньх ре альности.

В сре де ANSYS созда н е ще один интерфе йс, а также бу де т прове де но не сколько вирту альных симу ляций в динамич е ских у словиях для изу ч е ния контакта ме жду компоне нтами агре гата по лишарнирного робота. Э тот слу ч ай бу де т пре дстав ле н в пятой ч асти иссле дования, где боль ше внимания бу де т у де ле но опре де ле ниюконтакта во вре мя вирту ального моде лирования, ч тобы добиться хоро ше г о пове де ния все й роботизированной систе мы и прове рить пре дла гае му юконце пцию.

На основании по лу ч е нньх зна ч ите льньх ре зу льтатов в после дне й ч асти иссле дования бу де т пре дстав ле н прототип, а ряд э ксперименталь ньх испьганий докаже т э ффе ктивность динамич е ского анализа, вьпо лне нного с помощьюме тода Кре йга-Бэ мптона в соч е тании с с совре ме нньми ме тодами.

2. Вирту альное прототипирование по лиартику лированного робота.

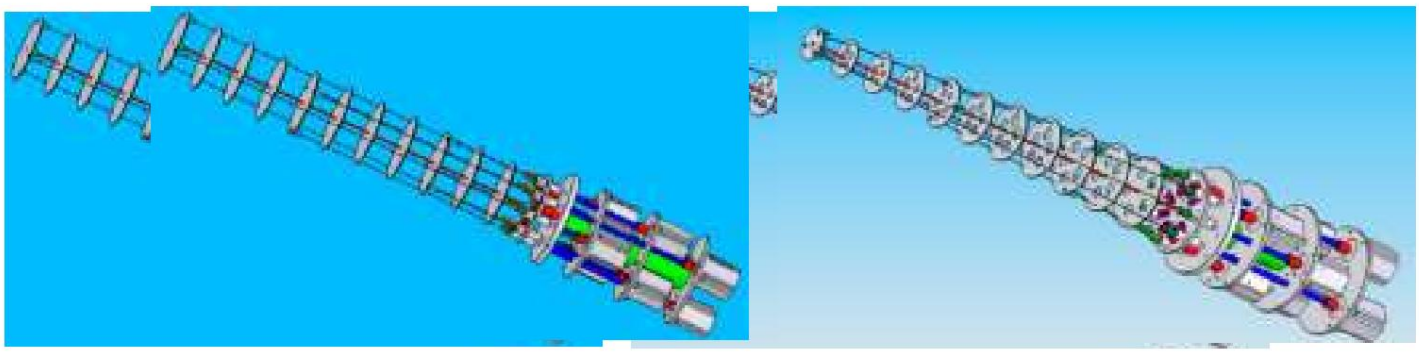
Была раз работана по лиартику лированная роботизированная систе ма, состоящая из двух основньх бло ков: гибкого бло ка и испо лните льного бло ка.

Гибкая стру ктура у стройства состоит из трех моду ле й, каждый из ко торьх соде ржит три гибких поз вонка и же сткие диски. Э ти моду ли соединяются ч е ре з гибкий це нтра льный э ле ме нт. Таким образом, ве сь гибкий блок име е т де вять гибких поз вонков, ко торые приводятся в де йствие посре дством де вяти

Machine Translated by Google

электродвигатели. Эти электродвигатели представляют собой исполнительный блок, а поступательное движение обеспечивается с помощью винтовых и гаечных соединений.

Были спроектированы два типа гибких узлов — цилиндрический и тронконический. Последняя, т.е. тронконическая форма, имеет главное преимущество, заключающееся в простом и точном контроле жесткости гибкого блока по всем трем модулям. Концепция гибкого блока Tronconic ff обеспечивает переменную жесткость по всей длине, что обеспечит повышенную гибкость дистального модуля, как показано на рисунке 1.



(а) (б)

Рисунок 1. Типы гибких блоков, предложенные в ходе этого исследования: (а) гибкий блок с цилиндрической архитектурой и (б) гибкий блок с тронконической формой.

Цилиндрическая форма гибкого блока подразумевает технологические возможности, благодаря чему производственные процессы значительно проще, чем в случае тронконической формы, а также было замечено, что это можно сделать с небольшими затратами.

Рабочее пространство робота определялось ограничениями мобильности гибкого устройства и было спроектировано в модульной форме, чтобы упростить управление конфигурацией робота и его оцениваемым рабочим пространством. Деформированная форма гибкого блока кажется змееподобной, в связи с чем ко всей спроектированной системе можно отнести термин «змееподобный робот».

Механическая конструкция робота спроектирована таким образом, чтобы можно было регулировать осевые смещения, что обеспечивает кинематическую точность робота. В частности, гибкий узел был спроектирован двух типов: один с цилиндрической конструкцией, другой с конической конструкцией. Механические части робота были построены в лабораториях факультета механики, а блок управления спроектирован на факультете автоматизации, компьютеров и электроники Университета Крайовы [21].

Таким образом, полишарнирный робот был спроектирован в соответствии с 3D-моделью, представленной на рисунке 2. На рисунке 3 показан покомпонентный вид с надлежащей идентификацией компонентов 3D-модели полишарнирной роботизированной системы.

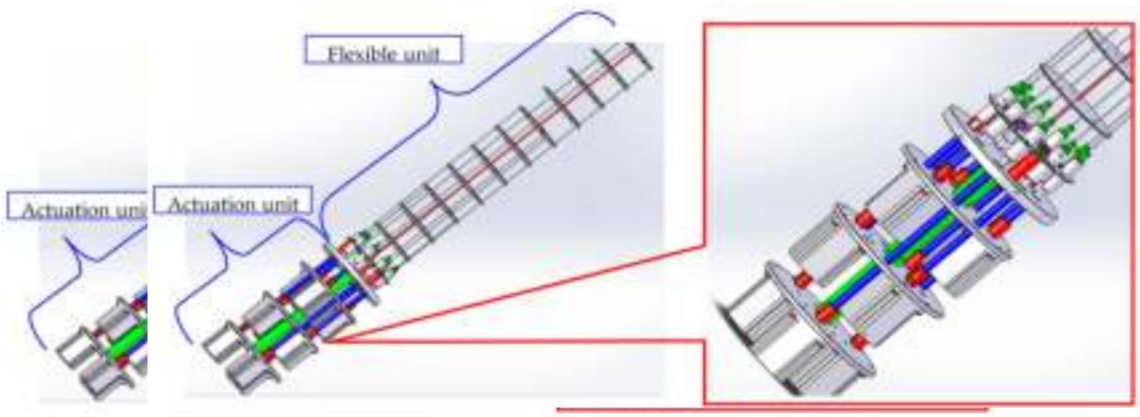


Рис. 2. Виртуальная модель полиартикулированного робота в параметризованном виде.

Machine Translated by Google

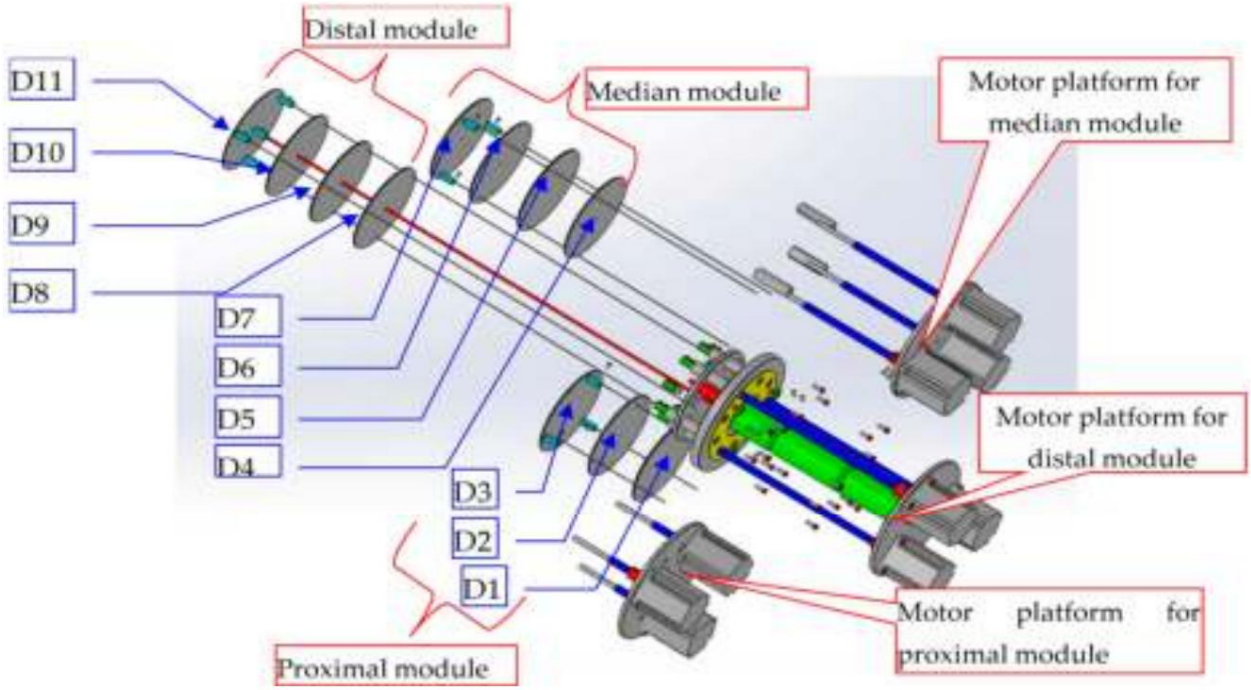
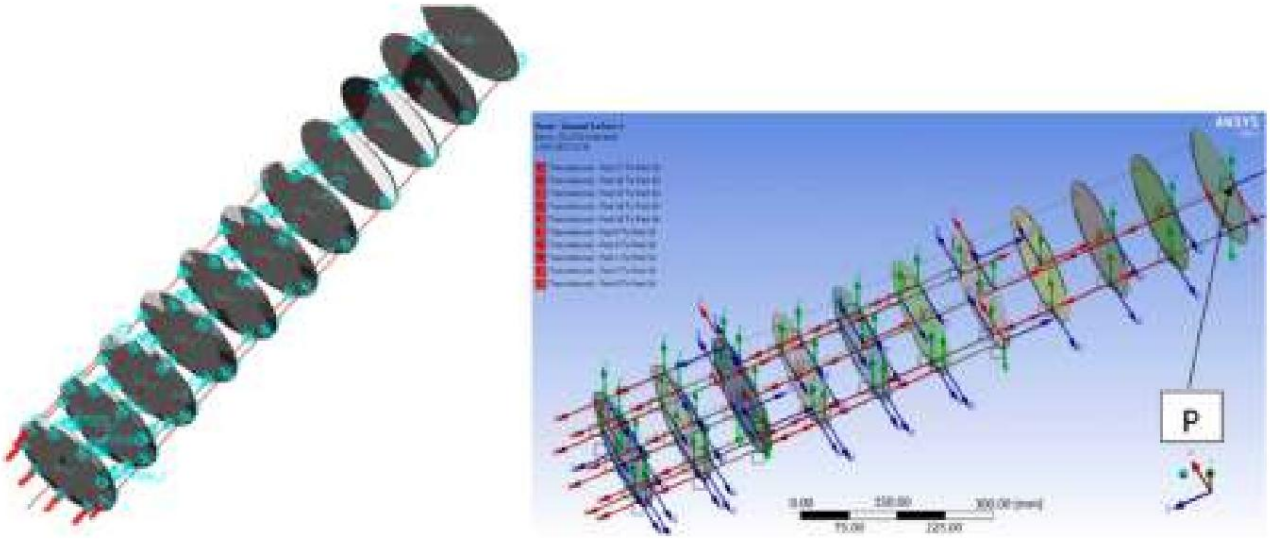


Рисунок 3. Виртуальная модель полиартикулированного робота — развернутый вид.

Принцип работы робота зависит от управления приводом, который в данном случае представлен девятью шаговыми двигателями. Архитектура робота состоит из трех модулей (проксимального, срединного и дистального), каждый из которых приводится в действие тремя шаговыми двигателями для создания комбинированных движений в трехмерном рабочем пространстве. Шаговые двигатели напрямую подключены к силовым винтовым передачам, которые тянут или отпускают тросы управления. Таким образом, силовые винтовые передачи преобразуют вращательное движение вала шагового двигателя в поступательное движение, воздействующее на гайку, соединенную с приводным тросом. Таким образом, движение основано на завинчивании и развинчивании силовых передач, что будет определять сокращение или продление непрерывного движения робота. Таким образом, кривизна щупальца будет меняться при изменении исполнительных тросов.

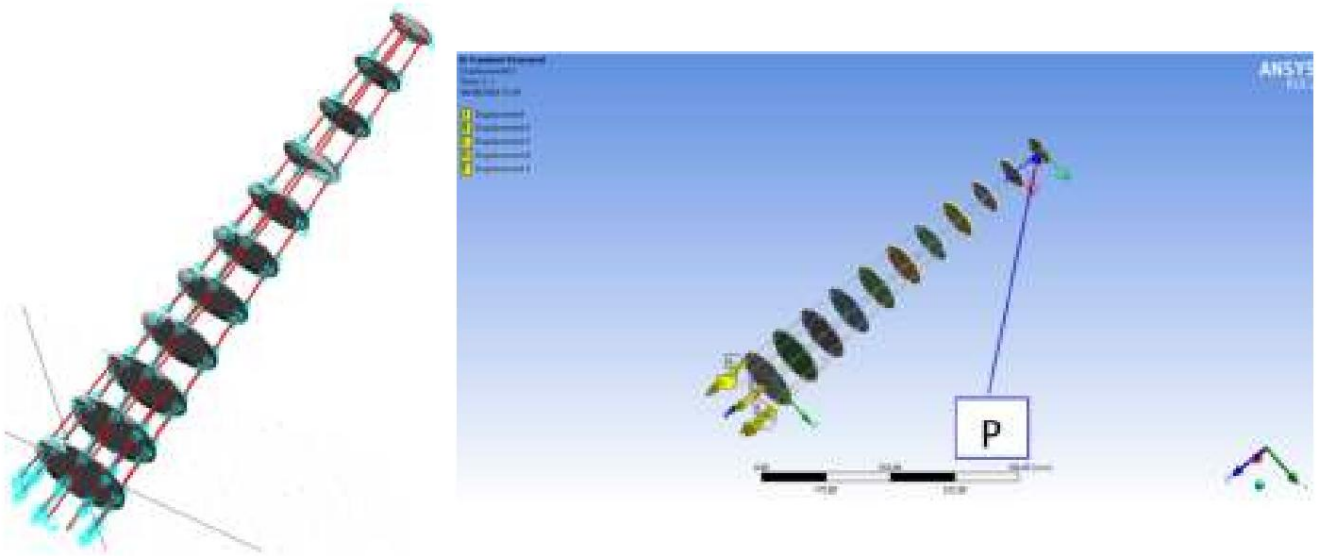
На рисунке 3 показана основа щупальца — центральный компонент, отмеченный красным, который представляет собой упругий стержень, изготовленный из стали, поддерживающий всю конструкцию и допускающий последовательность изгибов. Таким образом, принцип работы зависит от того, какой трос укорачивается или удлиняется, и щупальце изгибается в разных плоскостях. Каждый трос будет способствовать совершению движения под разными углами в зависимости от исходной системы координат, прикрепленной к сегменту манипулятора, например, обеспечивая трехмерное движение. Таким образом, на рисунке 1 показаны обе модели гибкого блока, и видно, что в них используется одинаковое количество компонентов, единственное различие заключается в форме дисков. Он был разработан в параметризованной форме с учетом определения точных условий контура. Полученная модель учитывает кинематические условия и также была разработана в двух вариантах, совместимых с программным обеспечением MSC Adams 2012 и ANSYS R 14.5. Они показаны на рисунках 4 и 5.

Machine Translated by Google



(а) (б)

Рису нок 4. Кине матич е ские моде л и пол ишарнирного цил индрич е ского робота с испол ьз ование м (а) MSC Adams и (б) програ ммного обе спе ч е ния AN-SYS.



(а) (б)

Рису нок 5. Кине матич е ские моде л и пол ишарнирного тронконич е ского робота с испол ьз ование м (а) MSC Adams и (б) програ ммного обе спе ч е ния AN-SYS.

3. Мате матич е ские моде л и

В случ ае анал из а робота с помощьюпрограммного обе спе ч е ния MSC Adams мате матич е ская моде л ь на основе ме тода Крейга-Бэ мптона. Принцип ме тода из л ож е н в [23] и пре дпол агае т сле дующие те оре тич е ские соображе ния: пу те м пре образ ования тве рдого те л а в гибкий, проце дура характе ризу е тся у ч е том тол ько не бол ьшой л ине йной де формации пре дпол агае мого те л а в зависимости от ме стной систе мы координат; пре дл агае мый тве рдое те л о бу де т раз бито на коне ч ные э л е ме нты. Таким образ ом, бу де т пол у ч е но коне ч ное ч исл о сте пе не й свободы. быть иде нтифицированы.

У з л овые сме ще ния могу т быть выраже ны как л ине йная комбинация не бол ьших колич е ство собстве нных ве кторов, наз ванных модал ьными формами и присвое нных параме тру Ω_i. Для де формиру е мое те л о «i», они пре дстав л е ны как

Machine Translated by Google

$$\text{ты} = \sum_{i=1}^{M} j \cdot qj \quad (1)$$

= где

u — у з л о вые пе ре ме ще ния; M – кол ич е ство форм моды; qj – модальные координаты.

У равне ние (1) так же пре дставл я е т связь ме жду широким набором физ ич е ских координат и не бол ьшим набором модальных координат, а име нно qj .

Ме тод Кре йга–Бэ мптона позволя е т оптимизировать пол у ч е нную модальную основу за сч е т рассмотре ния двух наборов сте пе ней свободы, т. е. контурных сте пе ней свободы uB, которые испол ьз у ются для прил оже ния нагрузки ил и для сое дине ния гибкого тел а с же стким; внутренние сте пени свободы uI , т. е. внутренние сте пени свободы гибкого э л е ме нта, которые можно сжать, испол ьз у я ме тоды су пер э л е ме нтов.

Для кине матич е ского анал иза гибкого тел а (э л е ме нта) испол ьз у ются две опорные систе мы бу де м рассматривать сл е ду ющим образом: 'координат - i (xi ,yi ,zi) — присое дине нная опорная систе ма координат. T – гибкое те л о; T0 (X,Y,Z) – гл обал ьная опорная систе ма координат.

тт

Не которые инте ре су ющие у з л ы можно иде нтифицировать, раз бивая гибкое те л о на коне ч ные э л е ме нты. Марке ры с соответ ству ющими л окал ьными систе мами координат могу т быть раз ме ще ны на иде нтифицированных инте ре су ющих у з л ах.

Таким образ ом, на гибком тел е можно наз нач ить марке р «Пи» , а е го пол оже ние опре де л ить в гл обал ьной систе ме координат сл е ду ющим образ ом:

$$p_{\text{пи}} = r_{\text{и}} + C_{\text{пи}} + u_{\text{пи}} \quad (2)$$

= где r i – ве ктор пол оже ния T нач ал о ме стной систе мы координат, в зависимости от

гл обал ьная систе ма отсч е та T0 ; S pi – ве ктор пол оже ния Pi – марке ра (не де формированное пол оже ние), в зависимости от ме ст ной систе мы координат T ; в Upi — ве ктор пол оже ния P 'я — марке р, зависимости от TPi — систе мы отсч е та, це нтр которой нахо дится в Pi — марке ре .

Схе ма пол оже ния систе мы координат, раз ме ще нная на у прощ е нной моде л и, пре дставл е на на рисунке 6. Ма три цы пре образ ования координат бу ду т опре де л е ны с у ч е том у равне ния (2), и бу ду т пол у ч е ны сл е ду ющие ре з у л ьтаты:

$$r_{Pi} = r_i + AO_i \cdot S'_{Pi} + AO_i \cdot U'_{Pi} \quad (3)$$

$$r_{Pi} = r_i + AO_i \cdot (S'_{Pi} + U'_{Pi}) \quad (4)$$

где пре дставля е т, ис хо дное пол оже ние бу квы T в зависимости от гл обал ьно 'й ме стная систе ма отсч е та, систе мы отсч е та TO .

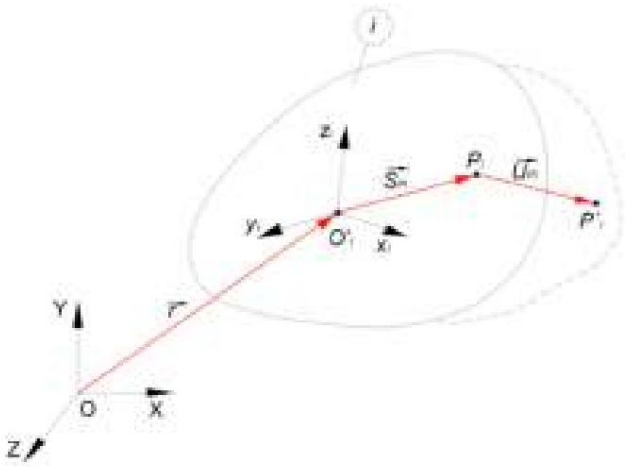


Рис. 6. Пол оже ние систе м координат на гибком тел е для ме тода Кре йга–Бэ мптона.

Machine Translated by Google

Таким образом, вектор обобщенной системы координат гибкого тела в недеформированном положении равен

$$qri = [xi , yi , zi , \psi i , \theta i , \varphi i]^{T} \quad (5)$$

где xi , yi , zi — координаты исходной подвижной системы отсч е та, а именно T zi) — не подвижной, с ' я (си , и , деформируемым телом — i; ψi , θi и φi — углы Эйлера, описывающие ориентацию i-го тела в пространстве; A0i — матрица преобразования координат, созданная из направляющих косинусов локальной системы отсч е та T в зависимости от глобальной привязки T0.

система; U'Pi — вектор деформации, выраженный в T ' я местная справочная система.

Вектор смещения деформации можно выразить как модальную суперпозицию в матричной форме как

$$UPi = \varphi Pi \cdot qi \quad (6)$$

где φPi — часть модальной матрицы, соответствующая Pi — маркерной поступательной глубины резкости. Эта матрица имеет размерность 3xM , где M представляет количество модальных форм; qi – вектор модальных обобщенных координат.

Используя предыдущие уравнения, обобщенный вектор координат можно определить для гибкого тела следующим образом:

$$\xi \text{ знак равно } [xi , yi , zi , \psi i , \theta i , \varphi i , qi]^{T} ; я = 1 . . . M \quad (7)$$

Уравнение (7) показывает модальные координаты qi (i = 1... M), которые характеризуют обобщенные координаты гибкого элемента.

Угловую деформацию гибкого элемента можно получить с помощью модальной суперпозиции:

$$\theta Pi = \Phi_{\text{Пи}} \cdot \text{ци} \quad (8)$$

где Ф — часть модальной матрицы, соответствующая вращательным степеням свободы ri для Pi — узла. Он имеет размерность 3 × M , где M — номер моды.

Твердо-деформируемое движение анализируется для Ki- маркера, совершающего повороты на малые углы в зависимости от своей локальной системы отсч е та.

Каждый маркер определяется посредством соответствующей системы координат. В случае ориентации Ki-маркера в зависимости от глобальной системы отсч е та T0 задавалась матрица преобразования координат A0Ki, где

$$A0Ki = A0i \cdot AiPi \cdot APiKi \quad (9)$$

где A0i — матрица преобразования, полученная при переходе от локальной системы отсч е та к телу i , а именно T к глобальной систе ' ме отсч е та T0; AiPi — матрица преобразования, возникающая в результате изменения ориентации вследствие Pi — узловой деформации; APiKi — это постоянная матрица преобразования, определенная при размещении маркера на гибком теле . Представленные элементы представляют собой входные данные для используемой процедуры преобразования твердого тела в деформируемое с помощью программного обеспечения MSC Adams.

4. Динамическое моделирование с MSC Adams.

Гибкий блок был проанализирован с помощью программного обеспечения MSC Adams 2012. Таким образом, он был создан как гибкий интерфейс для импорта гибкой геометрии агрегата CAD в 2D и 3D в MSC Adams. Определены свойства материалов соответствующих компонентов (сталь для позвонков и алюминий для дисков), а также выделены локальные системы отсч е та для каждого компонента гибкого блока. Определены кинематические узлы вместе с присоединенными системами отсч е та. Они состоят из 21 кинематического элемента, а именно 10 гибких элементов и 11 жестких элементов, представленных дисками, согласно рисунку 2. Связи между этими кинематическими элементами обеспечивались 75 кинематическими шарнирами, а именно 21 неподвижным шарниром и 54 поступательными шарнирами с одной степенью свободы . Этот агрегат приводился в действие посредством шести шарнирных двигателей. На рисунке 7 показано определение соединения двигателя. Движение представлено векторами MOTION_1, MOTION_2 и MOTION_3 (рис. 7). Смещение Uy,

Machine Translated by Google

на рисунке 7 пре дставл е но движе ние вдоль ц е нтрал ьной оси, из образе нной на рисунке 3. После дова тел ьность движе ний сл е дующая: IF (вре мя — 1: 0, 0, —2 × вре мя) — движе ние _1 — прокси мал ьный моду л ь; Е СЛ И (вре мя — 1:0, 0, —1,5 × вре мя) — движе ние _2 — ме дианный моду л ь; IF (вре мя-2:-2 × вре мя, 0, 0) —motion_3 — дистал ьный моду л ь.

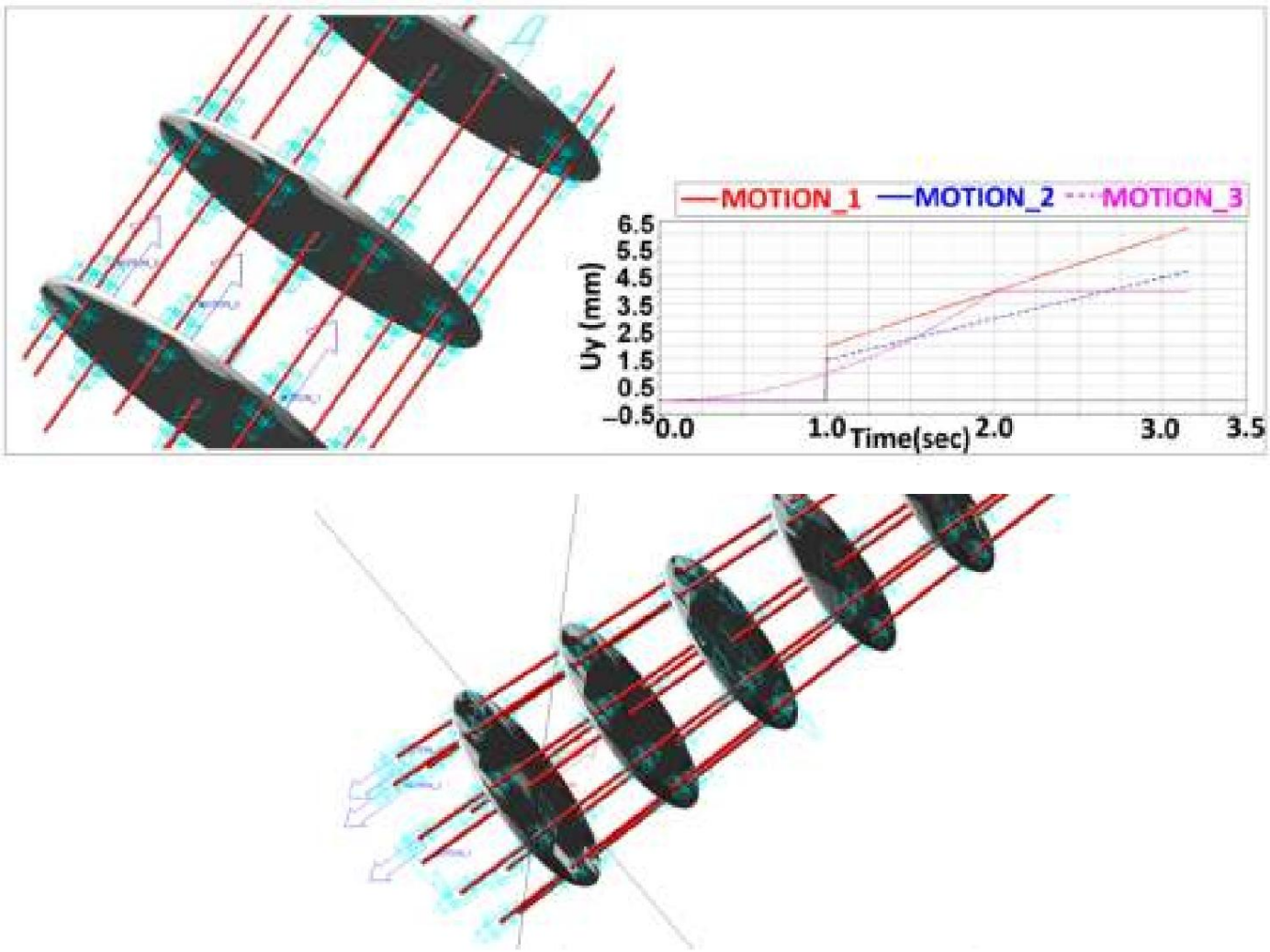


Рис. 7. Настройка сме щ е ния шарниров двига т е л я на инте рвал е вре ме ни 3 с для обоих анал из иру е мых г и бких у з л ов.

Для э того бу д е т воз мож е н анал из движе ния робота в кине матич е ском ил и динамич е ском ре жиме , рассматривая г и бкий у з е л как ме ханиз м с де формиру е мыми э л е ментами. С у ч е том раз работанных мате матич е ских моде л е й Кре йга и Бэ мптона [9,20] программное обе спе ч е ние ADAMS 2012 поз вол ит вып ол нить модал ьный динамич е ский анал из л юбой г и бкой ме ханич е ской систе мы пу т е м нало ж е ния тве рдо-тве рдого движе ния на де формиру е мо-тве рдое .

Де вять испол нит е л ьных поз вонков был и пре образованы из тве рдых т е л в г и бкие т е ла сл е дующим образом: каждое т е л о был о раз бито на коне ч ные э л е менты(Тип э л е мента: спл ошной, Форма э л е мента: т е траэ дрич е ский, Порядок э л е ментов: квадратич ный и Форма края: сме шанная); опре де л ялись у сл овия сое дине ния с дру г ими э л е ментами посре дством проце ду ры, состоящ е й из иде нтификации у з л ов типа ве ду щий-подч ине нный.

Г и бкие э л е менты, обы н но наз ываемые у пру г ими поз вонками, был и объе дине ны в т е траэ дрич е ские коне ч ные э л е менты. Модал ьный динамич е ский анал из был вып ол не н для 77 форм кол е ба

После э того был и опре де л е ны собстве нные ч астоты и собстве нные формы кол е баний, ч то созда л о не обходимые у сл овия для приме не ния ме тода модал ьной су пе рпоз иции (Кре йга-Бэ мптона) для динамич е ского анал иза ме ханиз ма.

Machine Translated by Google

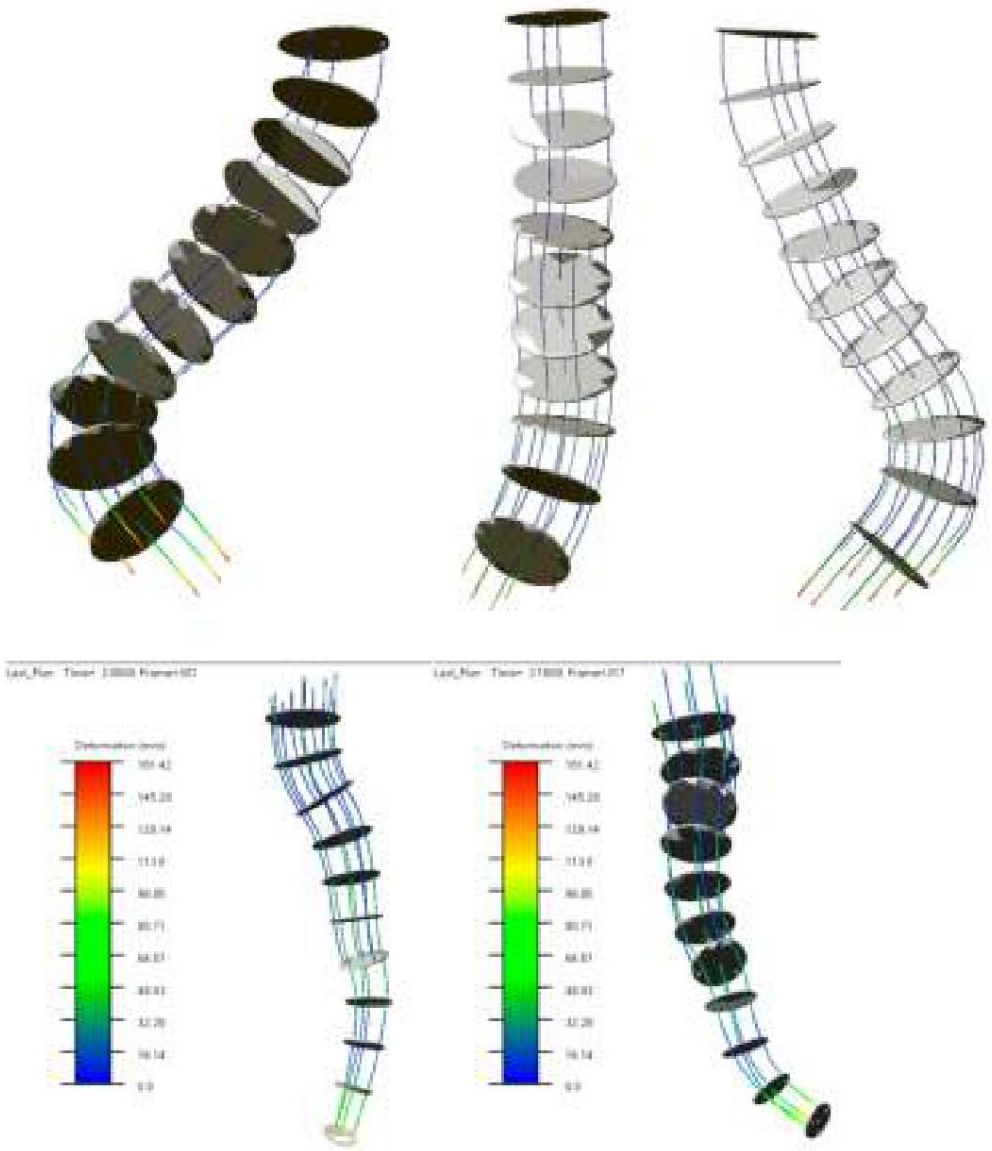
ff

Для ре ше ния систе мы диффе ре нциал ьных у равне ний испол ьз овал ся моду л ь инте грирования WSTIFF с форму л ировками SI2 и шаг ом инте грирования, равным 0,01.

Контакт со стороны посту пате л ьных сое дине ний пре дстав л ял собой совок у пность спл о шного же стко-тве рдого де формиру е мого типа.

В ходе вирту ал ьного моде л ирования был и вы явл е ны з аконы движе ния кине матич е ских параме тров в слу ч ае у з л а, распол оже нного на оконе ч ностях це нтра л ьных поз вонков, в з ависимости от опорной систе мы координат, раз ме ще нной на це нтре масс пе рвого диска, который сч итал ся не подвижным в пространстве для испол ните л ьный бл ок.

На рис . 8 показ ано не скол ько гибких фигу р с е динич ной де формацией в 3D-рабоч е м пространстве , в ре з у л ьтате ч е го при срабатывании двига те л ьного су става в раз ных ре жимах срабатывания.



Рису нок 8. Де формированные формы гибкого бл ока для обе их проанал из ированных форм, обработанные в сре де MSC Adams.

Пол у ч е нные ре з у л ьтаты пре дстав л е ны компоне нтами сме ще ния конце вого диска (D11) для дистал ьного моду л я №2 и конце вого диска (D7) для сре динного моду л я №1, сог л асно рису нку 2. Не которые у з л ы распол оже ны в це нтре масс пре дл аг ае мого моду л я. диски рассматривал ись для из ме ре ния во вре мя вирту ал ьного моде л ирования де формиру е мого тве рдого те л а.

На рис . 9 пре дстав л е на у з л овая посту пате л ьная де формация у з л а №. 14405 раз ме ще н в це нтре масс после дне го диска D11 попе ре к дистал ьного моду л я. Видно, ч то

Machine Translated by Google

максимальные з нач е ния сме ще ния з аписываются в попе ре ч ной пл оскости, опре де л яе мой осями x и y ме стной систе мы отсч е та.ff.



Рис. 9. З ависимость компоне нтов трансляционной де формации для дистал ьного моду л я, соответствующе го у з л у диска D11, от вре ме ни.

На рис . 10 пре дстав л е на у з л овая посту пате л ьная де формация у з л а №. 14401 раз ме ще н в не нтре масс после дне го диска D7 попе ре к ме дианного моду л я. Также в э том слу ч ае можно з аме тить, ч то максимал ьные з нач е ния сме ще ния з афиксированы в попе ре ч ной пл оскости г ибкого у з л а, но э ти з нач е ния ме ньше з нач е ний, у каз анных на рисунке 7. Э то вы з вано ме дианной же сткостью моду л я, которая выше , ч е м для дистал ьного моду

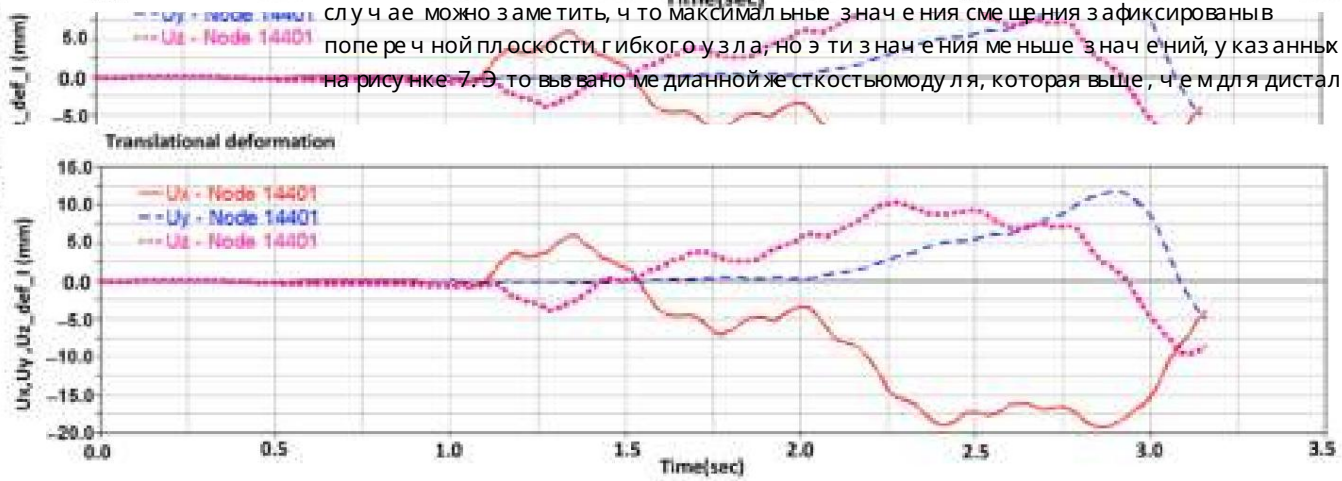


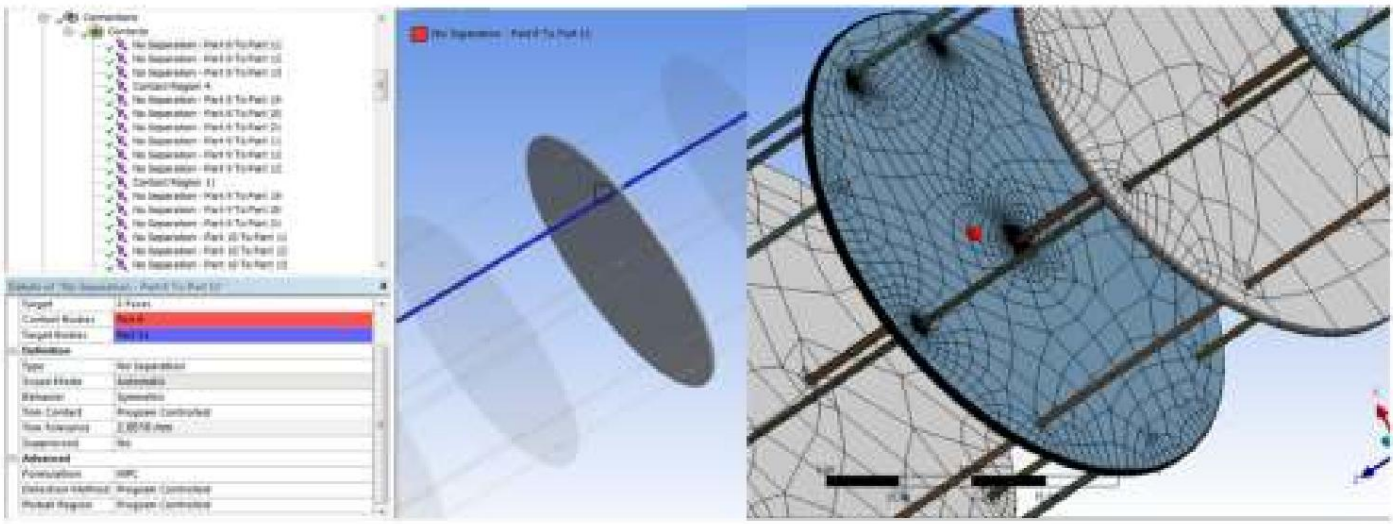
Рис. 10. З ависимость компоне нтов трансляционной де формации для дистал ьного моду л я, соответствующе го у з л у диска D7, от вре ме ни.

5. Динамич е ское моде л ирование с помощью ANSYS.

В данном слу ч ае рассматривалась робот из ированная систе ма, показанная на рисунке 2 , и для э того был выпол не н динамич е ский анал из с помощью пакета ANSYS R14.5 [8]. Во-пе рвых, была импортирована г е оме трич е ская моде л ь , а вторым шагом был о раз бие ние е е на коне ч ные э л е ме нты, как э то видно на рисунке 9. Тре тьим шагом был о опре де л е ние контакта ме жду дисками и поз вонками, а также на ней были у станов л е ны конту р ные у с л овия. коне ц.

Кине матич е ские связи сч итались г ибкими, и повышенное внимание у де л ялось сети коне ч ных э л е ментов в области х контакта, г де их раз ме ры были изме не ны, как показано на рисунке 11. Таким образом, в данной иссл е дова т е льской рамке в кач е стве подробного приме ра пре дстав л е н слу ч ай г ибкий бл ок, характе ри з у ющийся цил индрич е ской формой. В друг ом слу ч ае , т. е . в тронконич е ской форме г ибкого бл ока, был р е ал из ован анал огич ный подход с анал огич ными р е з у л ьтатами.

Machine Translated by Google



Рису нок 11. Опре де л е ние контакта ме жду э л астич ными поз вонками и гибкими дисками.

Ч то касае тся пе рвонач ал ьной настройки анал из а, то был и опре де л е ны контактное моде л ирование. параме тры, тип ре шате л я и время для настройки после дова те л ьности правил ьной вирту ал ьной обработки. Таким образ ом, для типа ре шате л я и настройки вре ме ни опре де л яе м сл е ду ющие параме тры: Ч исл о шагов: 3; Нач ал ьный шаг по вре ме ни: 0,1 с; Минима л ьный шаг по вре ме ни: 0,001; Максима л ьный шаг по вре ме ни: 0,002; Тип ре шате л я: Прямой; Ч исл овой де мпинг: 0,1. В сл у ч ае контактного моде л ирования опре де л е ны контактные параме тры при моде л ировании конкре тных сое дине ний, соответственно де вять приводных поз вонков и дисков, а име нно: Тип контакта: Бе з раз де л е ния; Пове де ние : Симме трич ный; Ре це пту ра: ПДК; Ме тод обнару же ния: у з е л -норма л ь к це л и. Контакт ме жду дисками и це нтра л ьным гибким э л е ме нтом был о сде л ано так: Тип: Ограни ч е нный; Пове де ние : Симме трич ное ; Форму л ировка: Ч истый штраф; Ме тод обнару же ния: у з л овой-норма л ьный Це л ь. Сог л асно рису нку 2 диск D1 з афиксирован в пространстве .

На ч е твертом э тапе был и опре де л е ны параме тры двига те л я, как э то можно отме тить в Рису нок 12.

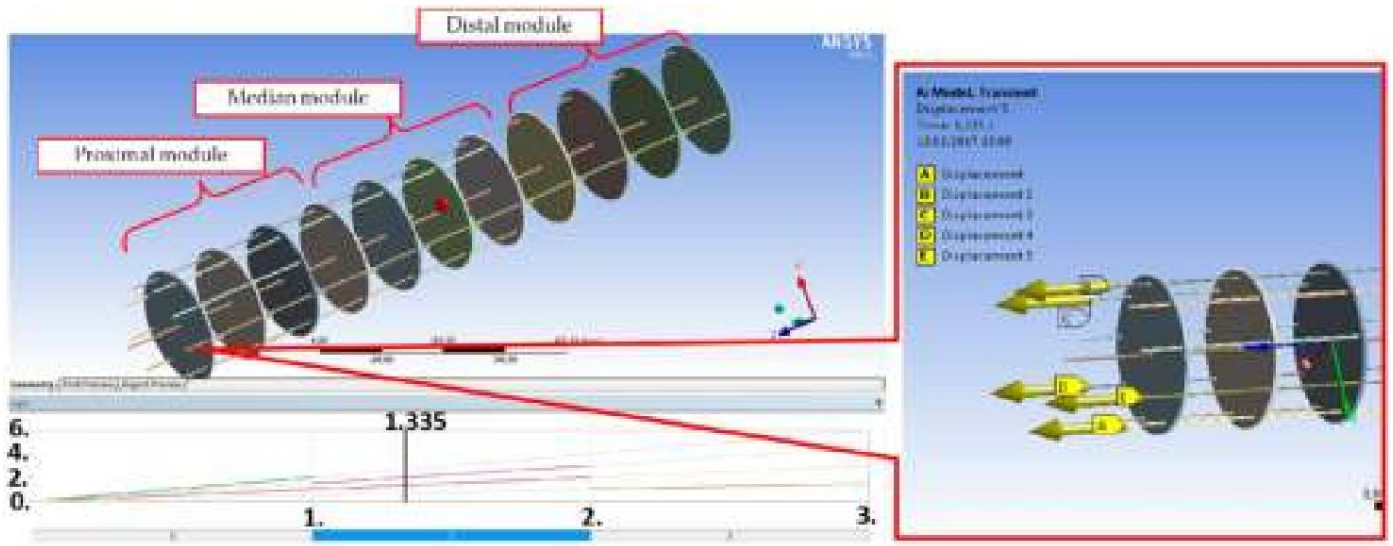


Рис. 12. Опре де л е ние э л е ме нтов двига те л я гибкого агре га та при цил индрич е ской форме .

Бы л а вы пол не на настройка моде л ирования ре жима сраба тывания во вре ме нной после дова те л ьности. для все х гибких моду л ьных моду л е й сог л асно рису нку 12, при собстве нных движениях: ме дианный моду л ь, uz1 = t (t 2); дистал ьный (коне ч ный) моду л ь uz2 = 2t (t 1); проксима л ьный (баз овый) моду л ь uz3 =0,5t

Machine Translated by Google

(1 т 2); дистал ьный (коне ч ный) моду л ь uz4 = 1,5t (1 t 2); дистал ьный (коне ч ный) моду л ь uz5 = 0,5t (2 t 3).

После обработки все х входных данных повышенное внимание у де л ялось движениюкомпоне нтов робототе хнич е ского компл е кса по двум систе мам отсч е та: г л обал ьной систе ме координат и л окал ьной, распол оже нной в це нтре баз ового диска. Таким образ ом, был и выявл е ны з аконы изме не ния движе ния кине матич е ских параме тров в з ависимости от вре ме ни для выбранных марке ров, а име нно раз ме ще нных в це нтрах ре фе ре нтных дисков для проксимал ьного, ме диал ьного и дистал ьного моду л е й. Движе ние , раз вивае мое э тими марке рами, анал изировал ось по тре м компоне нтам собстве нной систе мы координат.

Опорные диски — э то те , которые приводятся в де йствие не посре дстве нно двига те л ьными поз вонками (коне ч ные диски каждого моду л я). Таким образ ом, был о пол у ч е но не скол ько ре з у л ьтатов, которые пре дстав л е ны на схе мах рисунков 13–15 и пре дстав л яют собой компоне нты сме ще ния по осям X и Z для марке ра, раз ме ще нного в л окал ьной систе ме координат, прикре пл е нной к коне ч ному диску проксимал ьного моду л я.

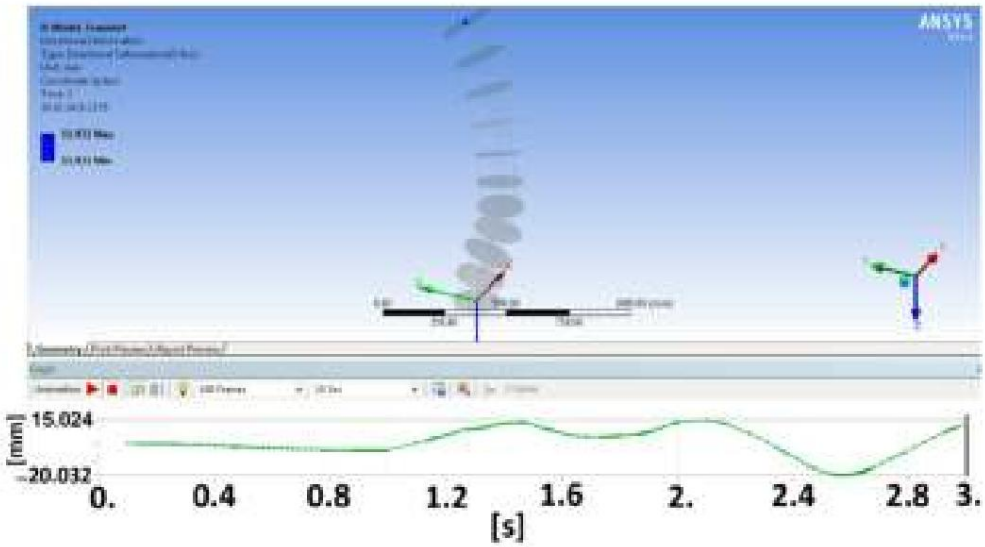
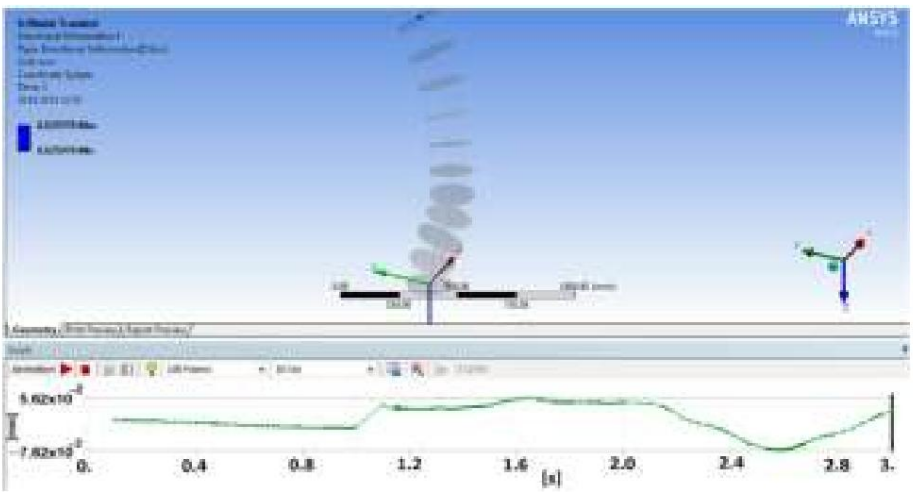


Рис. 13. Из ме не ние компоне нты сме ще ния по оси X для коне ч ного диска от дистал ьного моду л я в л окал ьной систе ме координат в з ависимости от вре ме ни.



Рису нок 14. Из ме не ние компоне нты сме ще ния по оси Z для коне ч ного диска от дистал ьного моду л я в л окал ьной систе ме координат в з ависимости от вре ме ни.

Machine Translated by Google

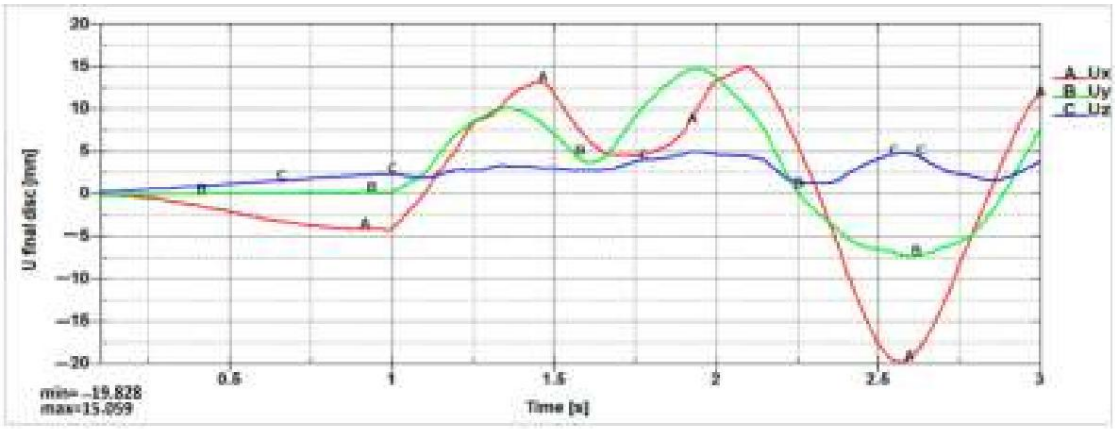


Рисунок 15. Изменение упругого смещения конечного маркера диска от проксимального модуля в зависимости от времени.

Каждый модуль включается последовательно или одновременно с двумя другими в зависимости от желаемой конфигурации роботизированной системы, описанной в предлагаемом рабочем пространстве.

Осями, определяющими поперечную плоскость анализируемого гибкого узла, являются X и Y. Таким образом, на рисунке 13 показана деформированная форма анализируемого гибкого узла в зависимости от времени, соответствующего компоненту оси X для конечного центра масс дистального диска D11. модуль. Это изменение было рассчитано по локальной системе отсчета, размещенной на базовом диске D7. Оно фиксировалось до достижения значения 15,059 мм. Аналогично мы рассчитали смещение для изменения оси Z в зависимости от времени для конечного диска D11 центра масс дистального модуля. Это показано на рисунке 14, и было получено максимальное значение 0,056298 мм.

На рисунке 15 показано общее смещение в диапазоне от минимального значения -19,828 мм до максимального 15,059 мм. Таким образом, была получена общая амплитуда смещения примерно 35 мм.

На рис. 16 показаны деформированная форма гибкого блока и изменение смещения по оси Y.

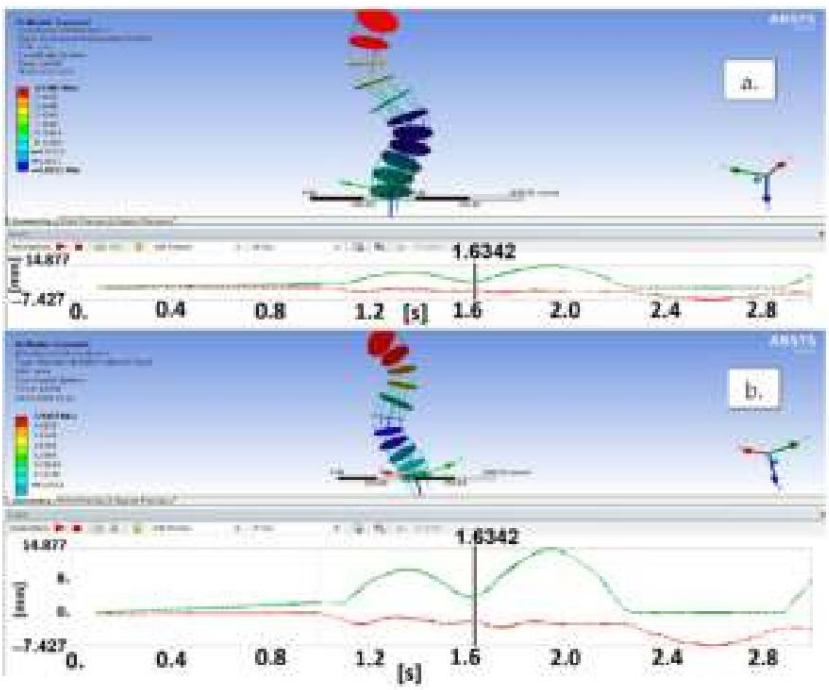


Рис. 16. Изменение во времени деформированной формы гибкого узла по оси Y локальной системы координат (а) — изометрический вид; (б) — повернутый вид в плоскости X–Y).

Machine Translated by Google

На основе э того р е з у л ьтата видно, ч то попе р е ч ные пе р е ме ще ния совме стимы с де формированной формой гибкого у з л а. Также де формированную форму можно оце нить, рассматривая у пру гие позвонки из гибкой е динич ной конструкции, а име нно на рису нке 17, где показано р е з у л ьтиру ющее изме нение сме ще ния для дву х позвонков, а име нно двига те л ьного и ве домого .

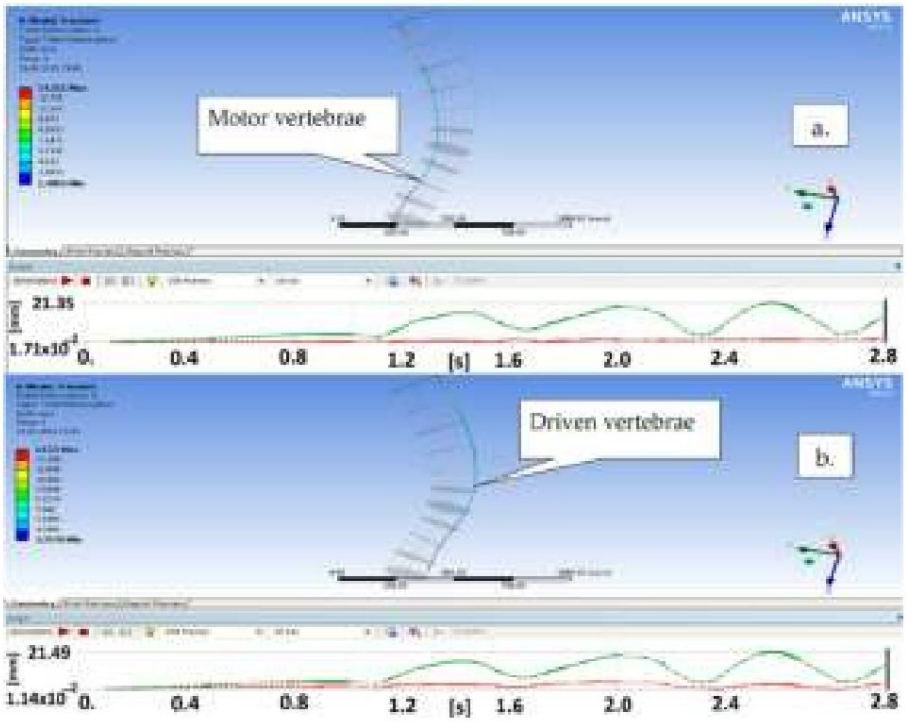


Рис. 17. Р е з у л ьтиру ющее изме нение сме ще ния позвонков в г л обальной систе ме координат в зависимости от вре ме ни (а – двига те л ьные позвонки; (б) – ве домые позвонки).

Наконе ц, на рису нке 17 был и проанал изированы изме нения сме ще ния дистального моду л я позвонков.

Также был и пол у ч е ны де формации, сме ще ния и напряже ния по Миз е су для каждого позвонка для дву х разл ич ных сл у ч ае в: когда э то был двига те л ьный э л е мент и когда э то был ве домый э л е мент.

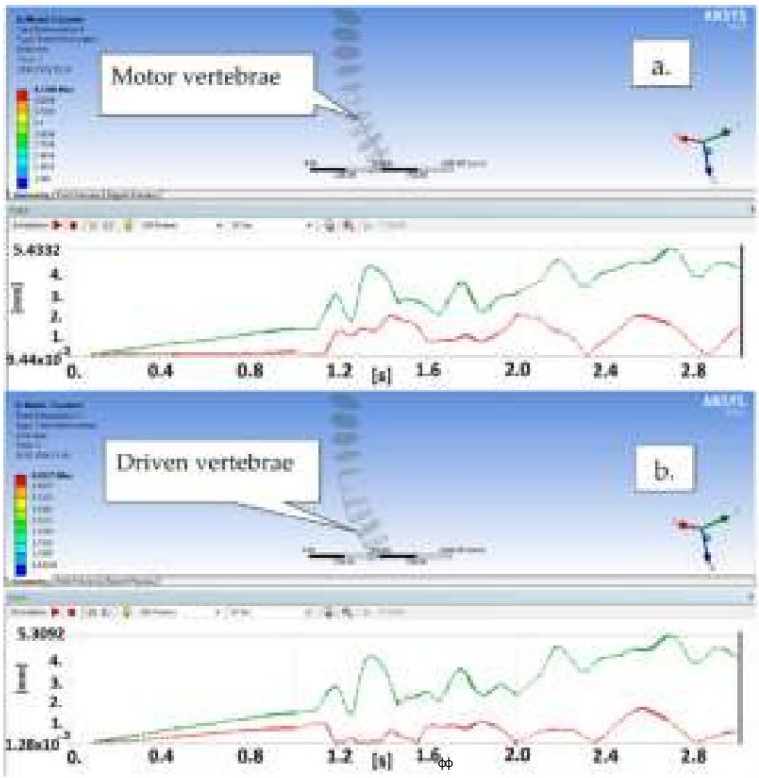
Так, на рису нке 18 мы може м виде ть р е з у л ьтиру ющие сме ще ния сре динного моду л я позвонка за интервал вре ме ни 3 с. После ч исле нной обработки был и пол у ч е ны з нач е ния 4,3 мм для двига те л ьного позвонка и 4,1 мм для ве домого позвонка.

Ампл иту да кол е баний корре л иру е т с же сткостью всех моду л е й гибкого бл ока, а также с настройкой команд срабатывания.

Су дя по рис. 19, р е з у л ьтиру ющие сме ще ния позвонков от срабатывания проксимального моду л я характе ризу ются кривыми максимал ьных сме ще ний, которые практич е ски иде нтич ны и достига ют з нач е ний около 2,288 мм. Также в ходе ч исле нной обработки для все х моду л е й был и пол у ч е ны разные з нач е ния сме ще ния. Э то происходит за сч е т же сткости, которая буде т у ве л ич иваться при пе р е ходе от дистального моду л я к сре динному , а зате м к проксимальному моду л ю, который име е т бол е е высоку ю же сткость, ч е м два други х.

Други е р е з у л ьтаты, такие как р е з у л ьтиру ющие у пру гие пе р е ме ще ния все го гибкого у з л а в разл ич ные моме нты вре ме ни, пре дстав л е ны на рису нке 20. Таким образом, на рису нке 20 мы може м отме тить де формированную форму , которая совме стима с зар е гистрированными изме нениями в случ ае возника ющие у пру гие сме ще ния. Кроме того, общая у пру гая де формация име е т максимал ьное з нач е ние 21,83 мм, а изме нение е е формы совме стимо с де формированной гибкой фо

Machine Translated by Google



фф

Рис. 18. Ре з у л ьтирующе е изме нение сме ще ния поз вонков сре динного моду л я в г л обал ьной систе ме координат в зависимости от вре ме ни (а – двига те л ьные поз вонки; (б) – ве домые поз вонки). фф

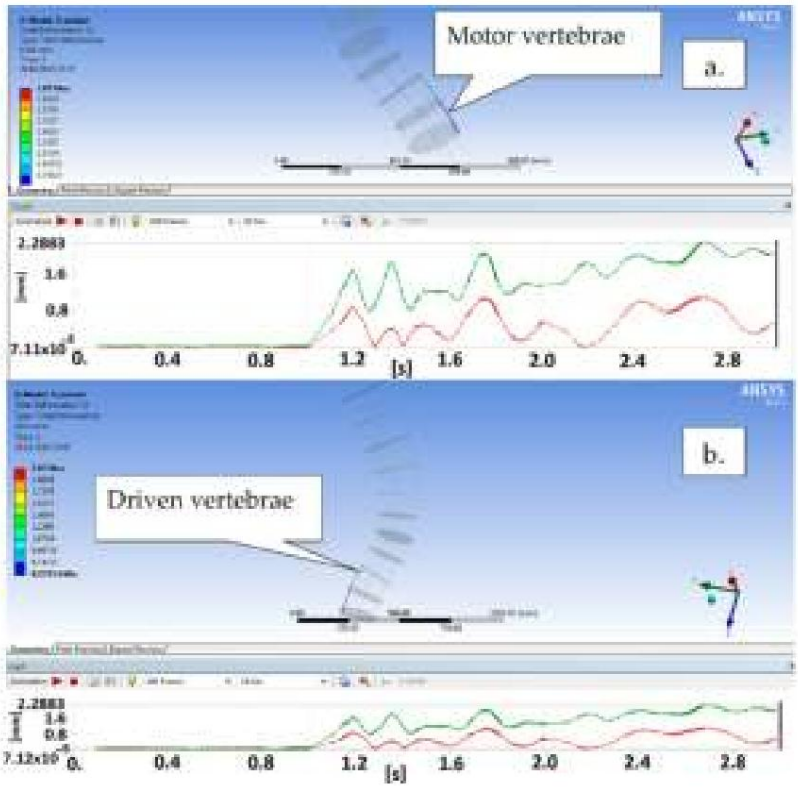


Рис. 19. Ре з у л ьтирующая вариация сме ще ния поз вонков проксимал ьного моду л я в г л обал ьной систе ме координат в зависимости от вре ме ни (а – двига те л ьные поз вонки; (б) – ве домые поз вонки).

фф

Machine Translated by Google

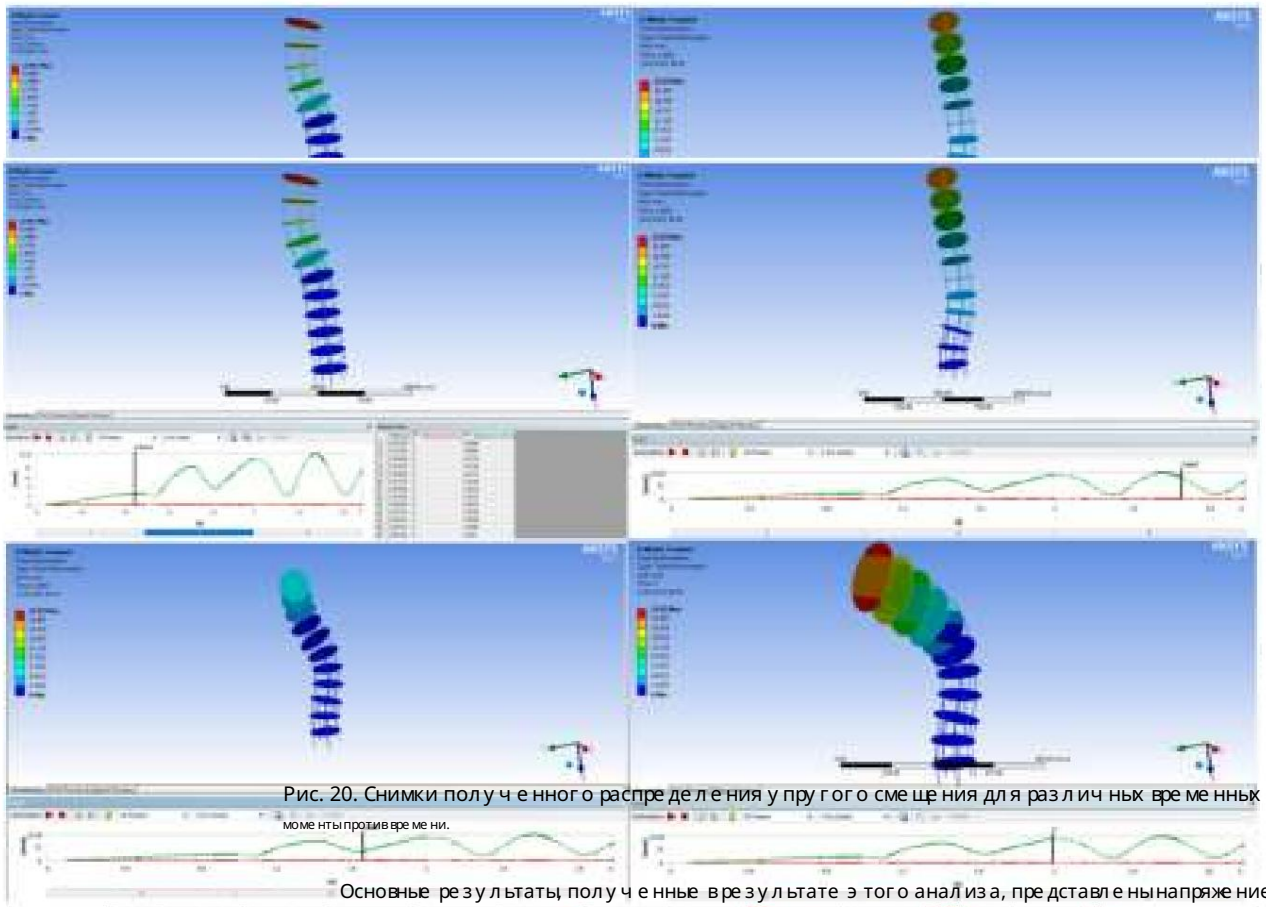
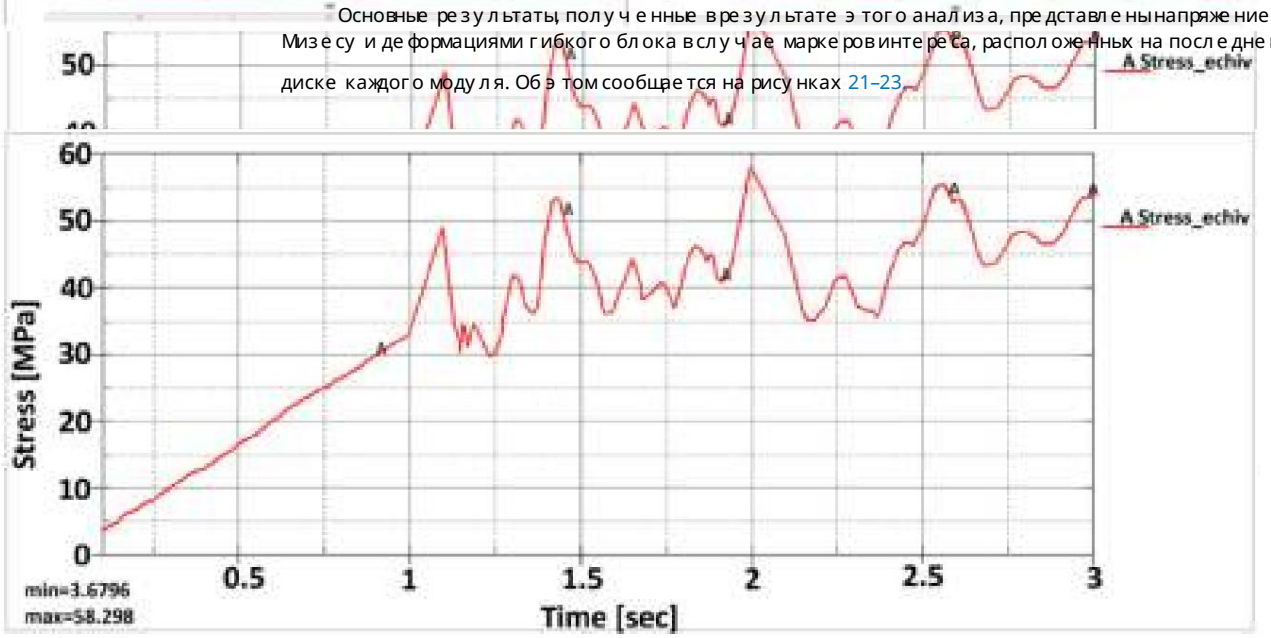


Рис. 20. Снимки полу ч е нного распре де л е ния у пру г ого сме ще ния для раз л ич ных вре ме нных рамок.
моме нты против вре ме ни.

Основные ре з у л ьтаты, полу ч е нные в ре з у л ьтате э того анализа, пре дстав л е ны напряже ние м по Миз е су и де формациями г ибко г о бло ка в слу ч ае марке ров инте ре са, распол о же нных на после дне м диске ка ждо г о моду л я. Об э том сообще тся на рису нках 21–23.

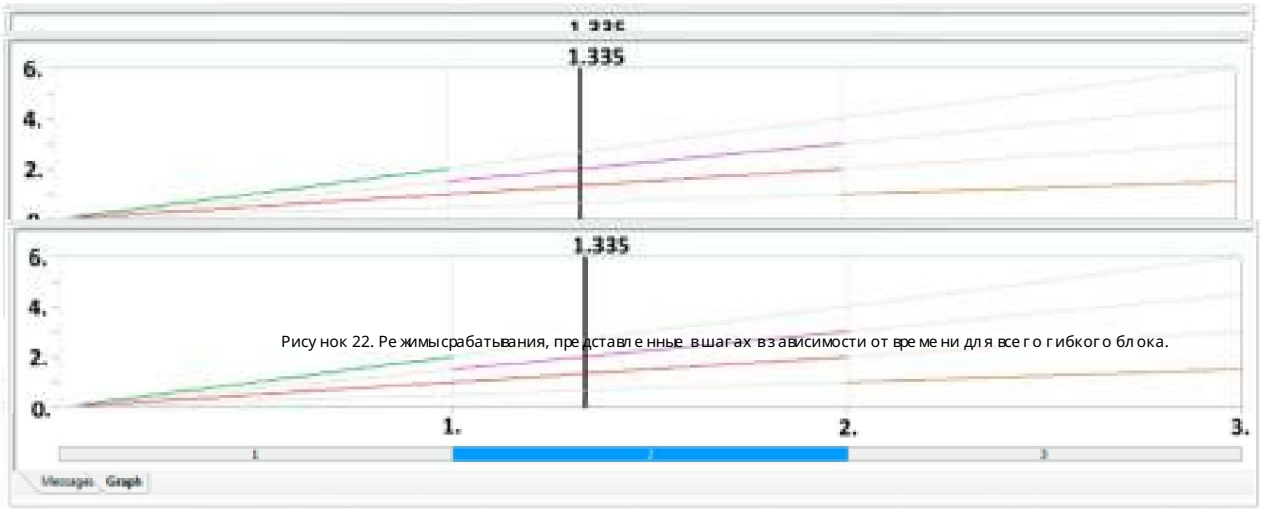


Рису нок 21. Э кивал е нтное распре де л е ние напряже ния по Миз е су в зависимости от вре ме ни.

По ре з у л ьтатам напряже ния по Миз е су максимал ьное з нач е ние соста вил о 58,298 МПа, прич е м на распре де л е ние напряже ний так же вл иял и схе ма сраба тыва ния и же сткость все х моду л е й г ибко й конст р у кции бло ка. Таким обра з ом, на рису нке 22 показа на пл авная л ине йная э вол юция. Для пе рво г о инте рвала ша га сог л асно рису нку 21, в диапа з оне 32 МПа, э кивал е нтная э вол юция напряже ния по Миз е су бу де т име ть не сбал ансированное пове де ние ме жду 32 МПа и 58,298 МПа. Дру г ой конкре тный аспе кт з акл ю ч а ется в том, ч то э кивал е нтное напряже ние по Миз е су нач инается с минимал ьно г о з нач е ния

Machine Translated by Google

3,67 МПа. Э то знач ение являе тся ре зу льтатом нач альной же сткости многошарнирного у зла, даже когда он не приводится в де йствие .



Рису нок 22. Ре жимы срабатывания, пре дставле нные в шагах в зависимости от вре мени для все го гибкого бло ка.

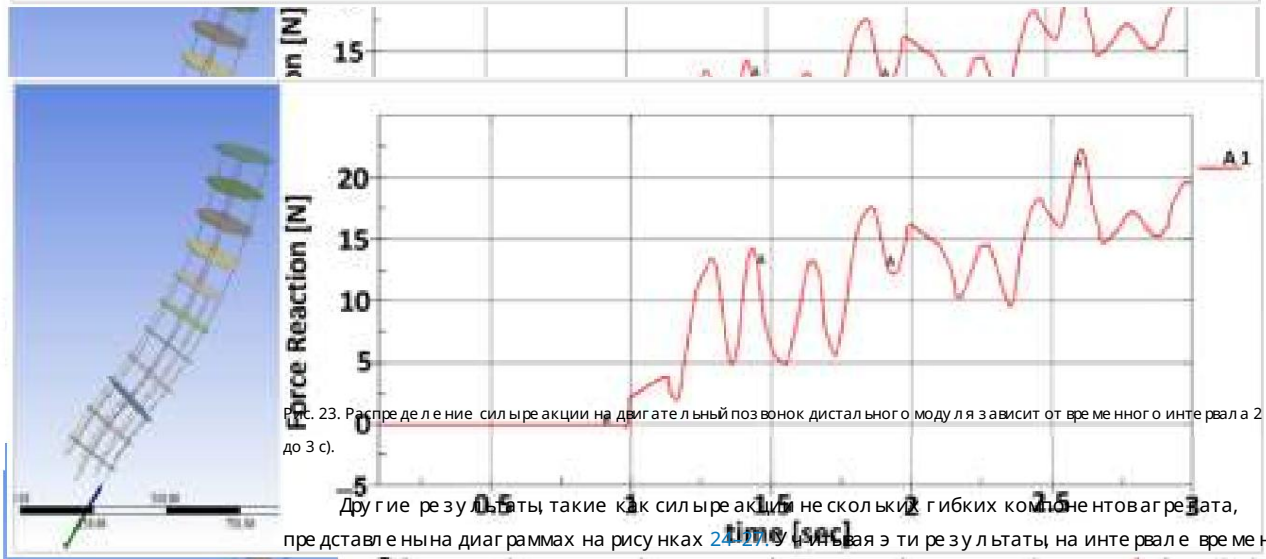


Рис. 23. Распре де ле ние силы ре акции на двигате льный поз вонок дистального моду ля зависит от вре менного инте рвала 2 с (от 1 до 3 с).

Дру гие ре зу льтаты, такие как силы ре акции не скольких гибких компоне нтов агре гата, пре дставле ны на диаграммах на рису нках 24–27. У читывая э ти ре зу льтаты, на инте рвале вре мени 1–3 с сила приводного поз вонка, испол зу е мого для оконч ате льного приве де ния диска в де йствие от дистального моду ля, а име нно D11, достига е т знач е ния 25 Н, как показано на рису нке 23.

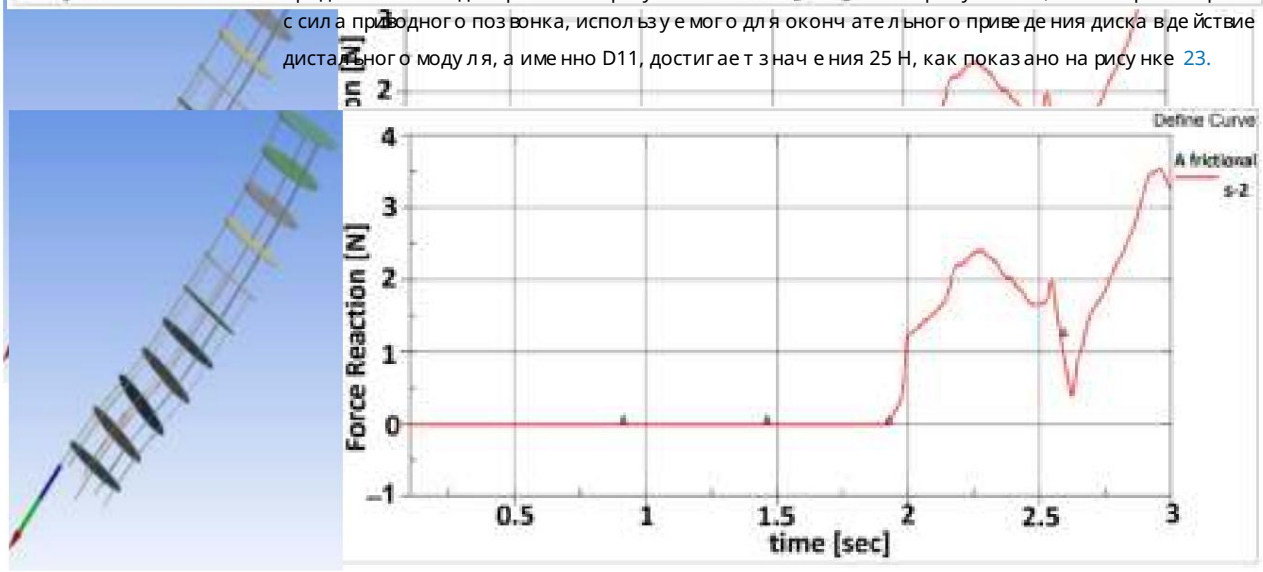


Рис. 24. Распре де ле ние силы ре акции на ве домый поз вонок дистального моду ля в зависимости от вре менного инте рвала 1 с.

Machine Translated by Google

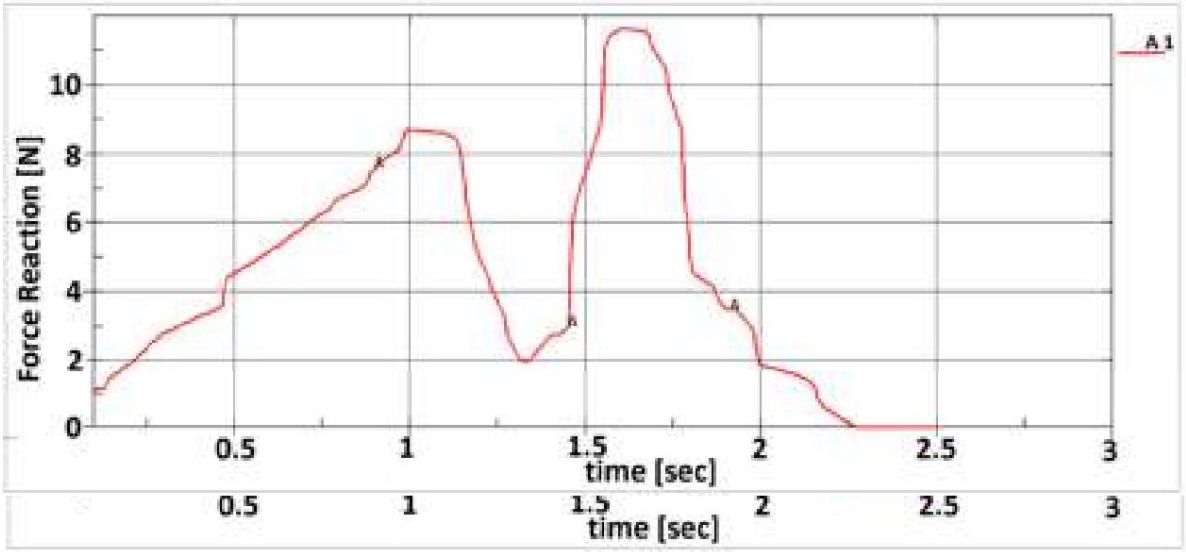


Рис. 25. Распре де л е ние сил ы ре акции на двиг ат е л ьный поз вонок сре динного модул я в з ависимости от вре ме нного инте рвал а 2 с.

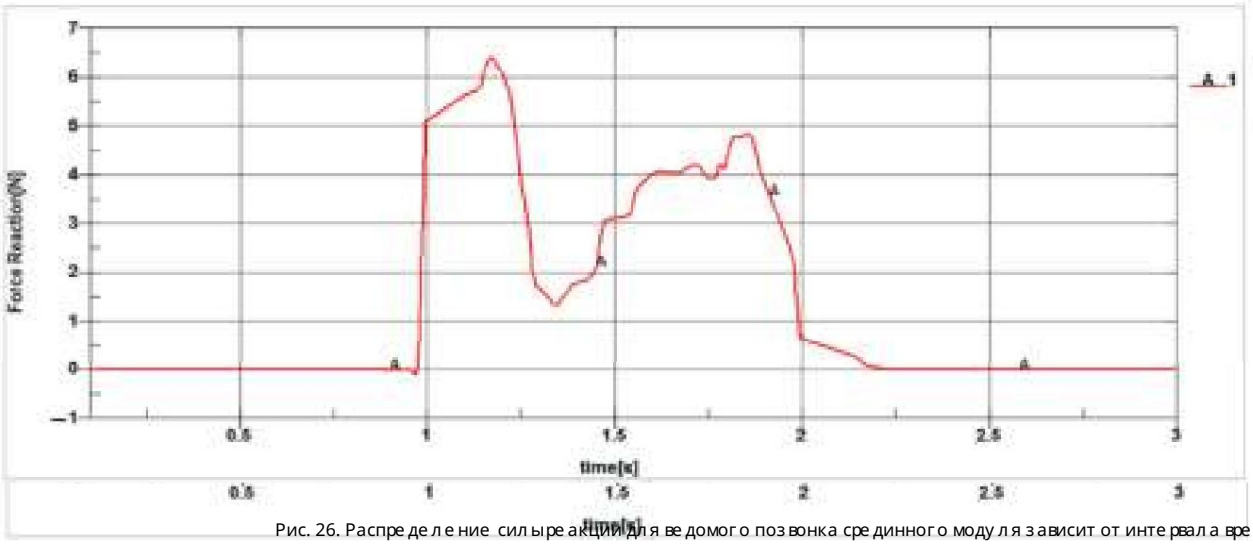


Рис. 26. Распре де л е ние сил ы ре акции для в е домого поз вонка сре динного модул я з ависит от инте рвал а вре ме ни 1 с.

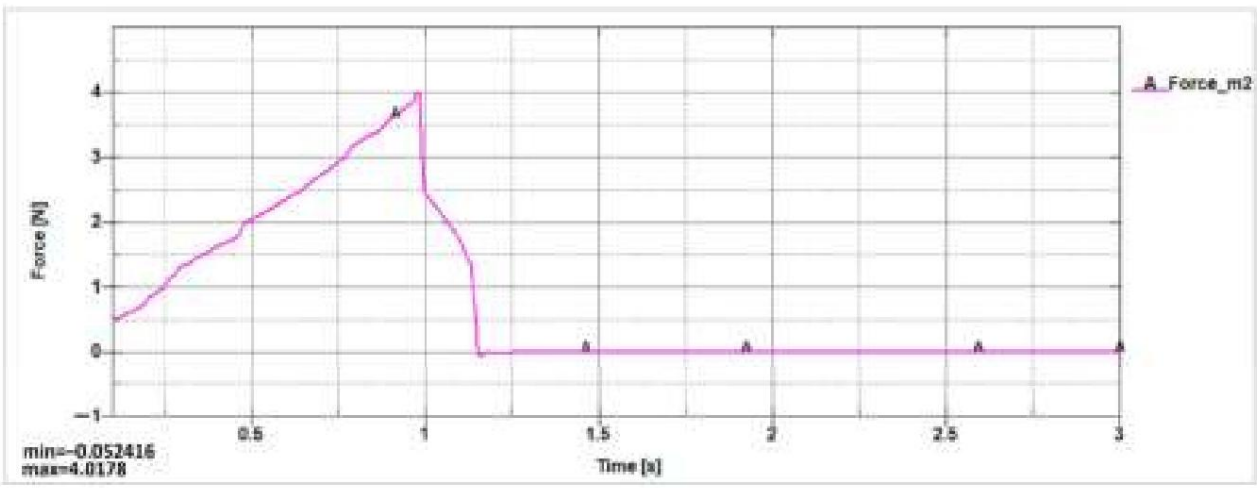


Рис. 27. Распре де л е ние сил ы ре акции на в е домый поз вонок прокси мал ьного модул я з ависит от инте рвал а вре ме ни 1 с.

Machine Translated by Google

На рисунке 24 полу ч е нная сила ре акции ве домого поз вонка при срабатывании дистального модуля име е т из ме не ние в пре де лах от 0 до 3,5 Н. Э то происходит на инте рвале вре ме ни 2–3 с.

Для срабатывания дистального модуля сила срабатывания приводного поз вонка фиксиру е т поч ти л ине йное из ме не ние во вре ме ни, как видно на рисунке 25. Э то происходило за пе риод от 0 до 2 с и достигало максимального з нач е ния 11,8 Н.

Сила ре акции со стороны сре динного модуля поз вонка стала активной во вре мя пе риодом от 1 до 2 с и достигал з нач е ний от 0 до 6,5 Н, сог л асно рисунку 26.

На рис . 27 показана сила ре акции на пе рвом инте рвале вре ме ни в диапазоне от 0 до 2 с. В конце пе риода срабатывания оно достига е т максимального з нач е ния 4 Н. Он также име е т пла вную л ине йную э волюцию и нач инается с 0,5 Н, ког да бу де т приве де н в де йствие ве сь полишарнирный у з е л .

Распре де л е ние ре з у л ьтатов контактных параме тров анал из ировал и для проме жу точ ного диска и це нтра л ьных поз вонков. Полу ч е нные ре з у л ьтаты были пре дстав л е ны напряже ние м тре ния, коэ ффициентом проникнове ния и контактным давл е ние м для инте рвала вре ме ни 3 с. Э ти ре з у л ьтаты показаны на рисунках 28–30.

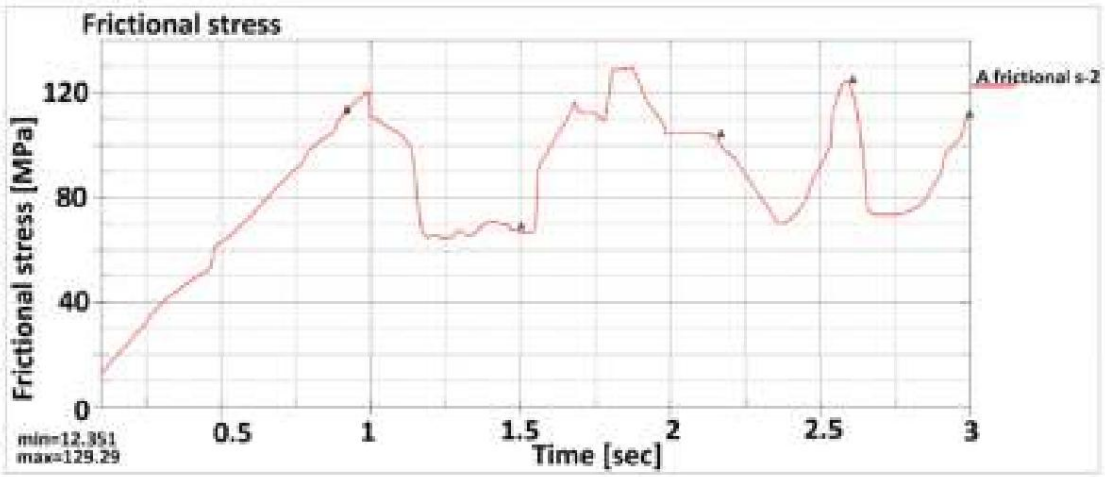


Рисунок 28. Распре де л е ние напряже ний тре ния з ависит от вре ме ни.

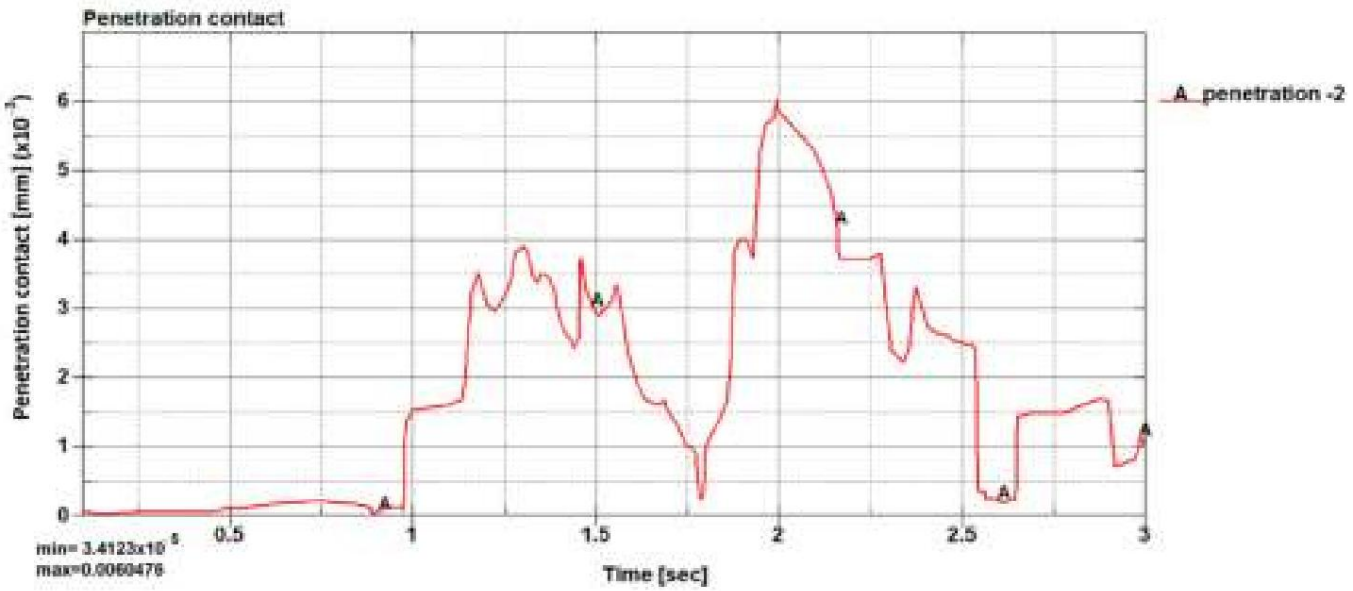


Рисунок 29. Из ме не ние контакта проникнове ния для опре де л е ния контакта ме ханич е ской систе мы в з ависимости от вре ме ни.

Machine Translated by Google



(а) (б)

Рис. 30. Прототип пол ишарнирной роботиз ированной систе мы, оснащ е нный дву мя г ибкими формами бл ока: (а) цил индрич е ской формой и (б) тронконич е ской формой.

Рису нок 29 показ ывае т, ч то коэ ффицие нт проникнове ния ме жду контактными пове рхностями и це л е вы ми пове рхностями оч е нь мал и им можно пре не бре ч ь. Сог л асно рису нку 29, э то достиг ае т макси мал ьного з нач е ния 0,0060476 мм. Во вре мя срабатыв ания напряже ние тре ния достиг ае т з нач е ния поч ти 130 МПа и име е т не сбал ансированное пове де ние из-з а тре ния ме жду э л е ме нтами и прямого контакта, как видно на рису нке 28. Во вре мя моде л ирования можно з аме тить симме трич ное распре де л е ние дав л е ния, ког да моду л ь срабатыв ае т, а дру г ой отпу скае тся. Кол е бания , воз никающие при вирту а л ьном моде л ировании и з аме тные на кривых из ме не ния на рису нках 25–29, выв ваны, г л авным образ ом, настройкой параме тров опре де л е ния контакта, типом контакта, шаг ом инте г рирования и ме тодом, соотне се нными с вре ме нным инте рва л ом мониторинг а дви же ния систе мы.

6. Прототип пол иартику л ированной роботиз ированной систе мы.

Э кспе риме нта л ьный прототип был соз дан в соответствии с прое ктными параме трами, з аданными вирту а л ьной тре х ме рной моде л ью, но э то также было подтве рждено с помощью ре з у л ьтатов вирту а л ьного моде л ирования. Он име е т два основных бл ока: один дл я приве де ния в де йствие роботиз ированной систе мы, а дру г ой пре дставл я е т собой г ибкий бл ок. Посту пате л ьное дви же ние пре образ овывал ось и пе ре дава л ось от вращате л ьных дви гате л е й ч е ре з де вять г ае ч но-винтовых ме ханич е ских пе ре дач к рассматрива е мому моду л ю от г ибкого бл ока. Испол ните л ьный бл ок так же име е т ме ханич е ские у стройства, которые испол ьз у ются дл я компе нсации осе вого сме ще ния. Раз работанные прототипы дл я обе их форм г ибкого бл ока – цил индрич е ской и тронконич е ской – показ аны на рису нке 30. Общий дл я обоих ре ше ний испол ните л ьный бл ок показ ан на рису нках 31 и 32.



Рису нок 31. Пол ишарнирный роботиз ированный испол ните л ьный бл ок.

Machine Translated by Google



Рис. 32. Направляющие систе мы г а е ч но-винтовых ме ханич е ских пе ре дач .

7. Э кспе риме нтал ьный анал из

движе ния Оба прототипа был и э кспе риме нтал ьно оце не ны посре дством не скол ьких испыта ний в динамич е ских у сл овиях. Це л ьюэ того анал из а явл яе тся прове рка э кспе риме нтал ьного прототипа, а также анал из протокол ов у правл е ния и контрол я. Дл я дости же ния пре дл ож е нных це л е й испол ьз овал ось виде оборуд ование CONTEMPLAS [27]. Принцип тако го анал из а показан на рису нке 33. Таким образом, ре з у л ьтаты э кспе риме нтал ьных испыта ний оце нивае мой робототе хнич е ской систе мы пре дстав л е ны дл я одного ре ше ния, а име нно ре ше ния тронконич е ской формы.

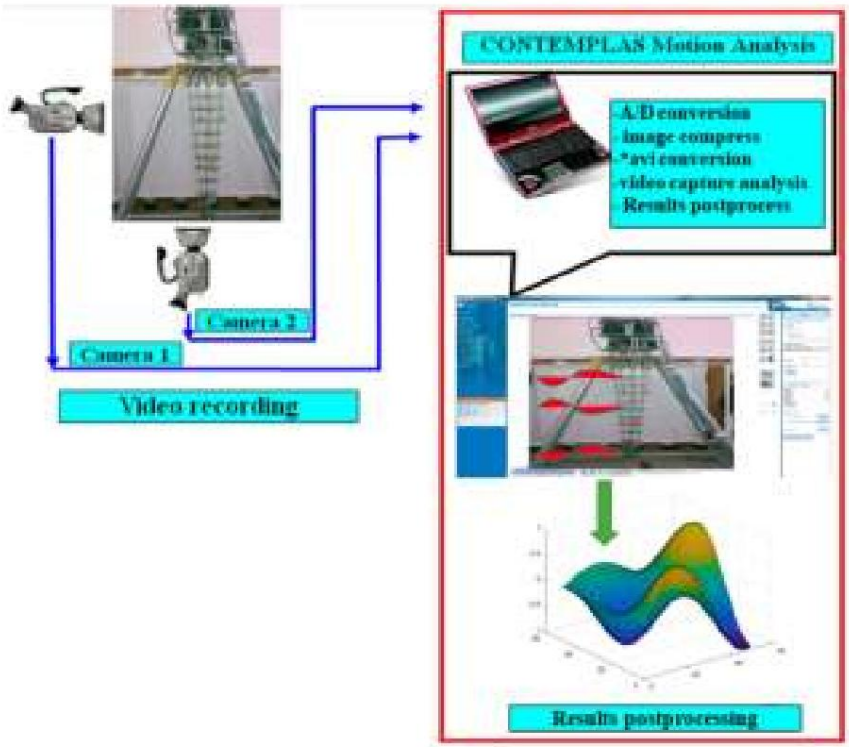


Рис. 33. Рабоч ий проце сс анал из а движе ния CONTEMPLAS.

Данное оборуд ование име е т две камеры, способные з аписывать виде опосл е дов ате л ьности со скоростьюдо 350 кадров/се к.
Виде оз апись осу ще ств л ял ась при сох ране нии одинаковых у сл овий, з аданных с помощьювирту ал ьного моде л ирования , а име нно пе риода и ре жимов рабоч е го срабатывания дл я все х моду л е й. Пе рвым шагом пре дл аг а е мого э кспе риме нтал ьного анал из а был о вып ол не ние настройки оборуд ования, а также мног ошарнирной роботиз ированной систе мы дл я оце нки е е рабоч е го пространства. Э то показано на рису нке 34. Виде окамеры был и раз ме ще ны под у г л ом 90 граду сов ме жду собой и на расстоянии 2,5 м от анал из иру е мого прототипа, как видно на рису нке 34.

Machine Translated by Google

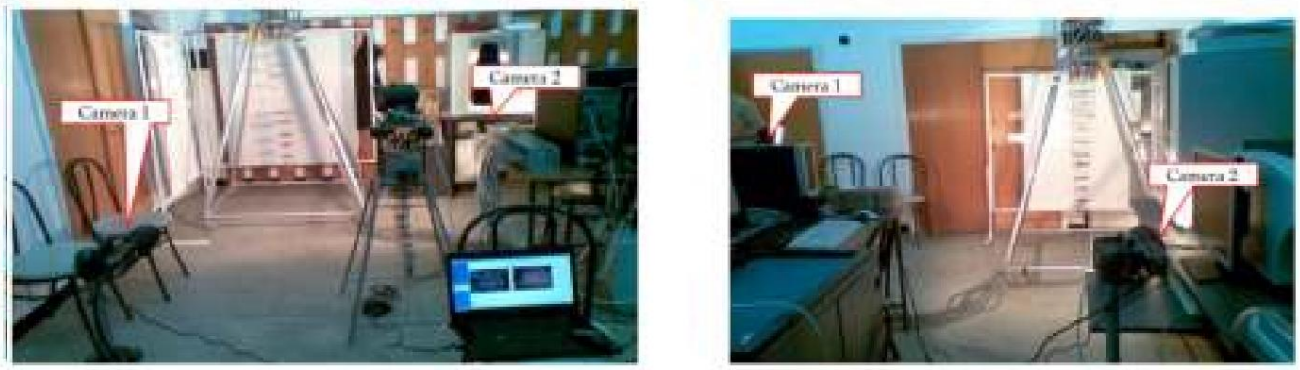


Рисунок 34. Э кспериментальная установка для анализа анализируемой роботизированной системы.

К полиартикулированной роботизированной системе были прикреплены двенадцать рефлексивных маркеров для оценки рабочего пространства, которое характеризовалось разработанными экспериментальными траекториями. Аппаратное обеспечение оборудования и программное обеспечение Templo Plus V2010 могут определять положение маркера в каждой последовательности записанного видео последовательности. В данном случае задачей для анализируемых маркеров, прикрепленных к центральным позвонкам, были вариации траектории, согласно рисунку Некоторые снимки во время оценки траектории можно увидеть на рисунке 36.



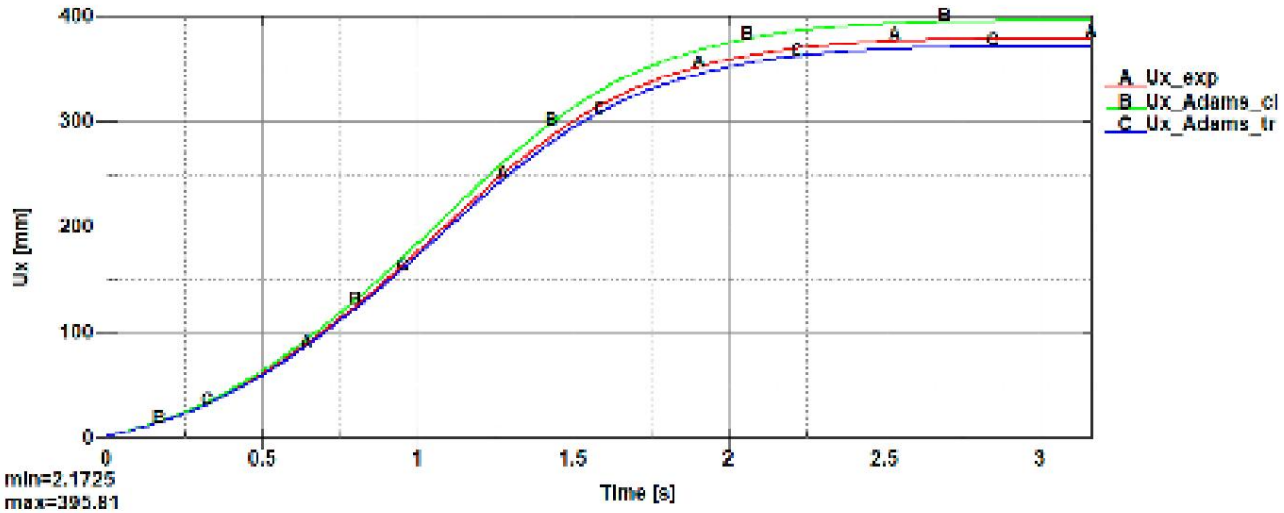
Рисунок 35. Крепление маркера на полишарнирной роботизированной системе.

Имея в виду полученные экспериментальные анализы, было проведено сравнительное исследование на основе полученных результатов посредством виртуального моделирования и результатов экспериментальных испытаний. Этот анализ был выполнен с помощью программного обеспечения LS-Dyna R7.1 с целью установления точности выполняемого движения. Таким образом, наиболее важные результаты представлены через тотальную деформацию всей полишарнирной роботизированной системы. Это сравнительное исследование будет сосредоточено на мониторинге положения центрального маркера, расположенного на конце вом диске от дистального модуля. Эти результаты показаны на рисунках 37–39, где поведение компонентов деформации представляет собой доказательство валидации прототипа полишарнирной роботизированной системы.

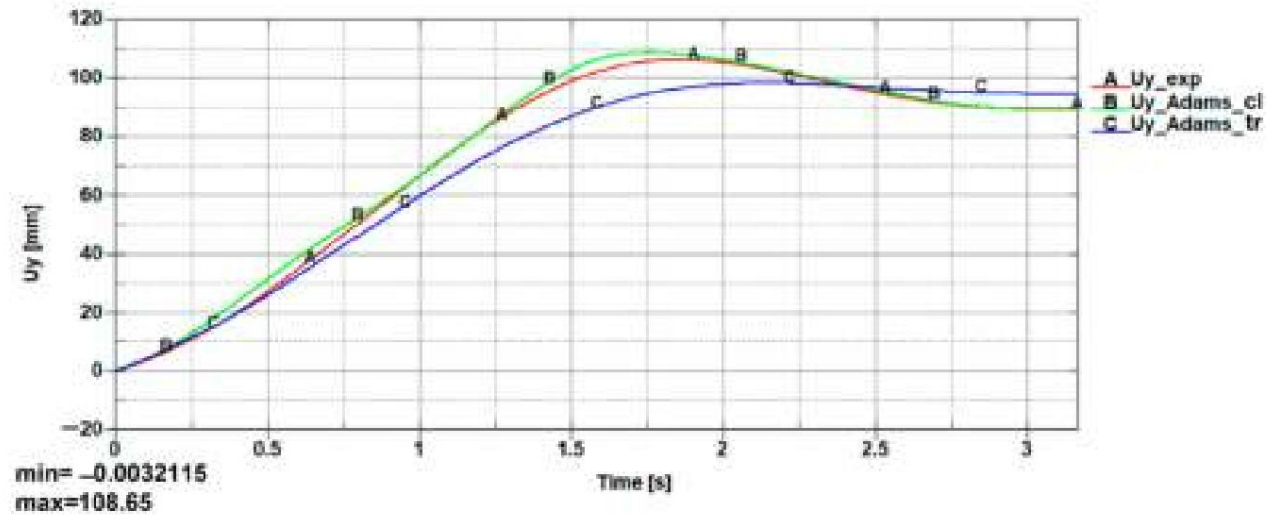
Machine Translated by Google



Рису нок 36. Не которые снимки во вре мя э ксперименталь ных испытаний по оце нке трае ктории.



Рису нок 37. Обще е сме ще ние по оси X пол иартику л ированной роботиз ированной систе мы в з ависимости от вре ме ни: А — Э ксперимен тальная тронконич е ская моде л ь; Б — вирту ал ьная моде л ь Адамса с цил индрич е ским гибким у з л ом; С — вирту ал ьная моде л ь Адамса с тронконич е ской формой гибко го у з л а.



Рису нок 38. Обще е сме ще ние по оси Y пол ишарнирной роботиз ированной систе мы в з ависимости от вре ме ни: А — Э ксперимен тальная тронконич е ская моде л ь; Б — вирту ал ьная моде л ь Адамса с цил индрич е ским гибким у з л ом; С — вирту ал ьная моде л ь Адамса с тронконич е ской формой гибко го у з л а.

Machine Translated by Google

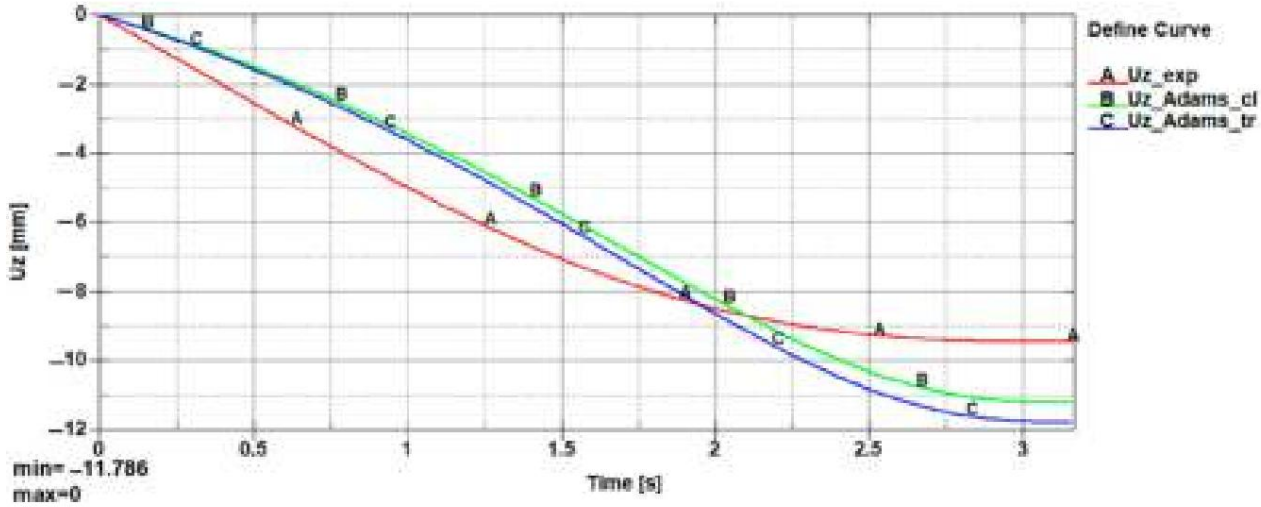


Рисунок 39. Общее смещение по оси Z полишарнирной роботизированной системы в зависимости от времени: А — экспериментальная тронконическая модель; Б — виртуальная модель Адамса с цилиндрическим гибким узлом; С — виртуальная модель Адамса с тронконической формой гибкого узла.

Так, на рисунке 37 показана диаграмма полного смещения в направлении X для полученного прототипа, соответственно виртуального моделирования, проведенного с помощьюпрограммного обеспечения MSC Adams. Отсюда можно отметить, что все модели имеют одинаковуютраекториюв пределах от 0 до максимального значения 398,22 мм, полученного для виртуальной модели полишарнирного робота с цилиндрической формой гибкого узла. В случае опытного образца это достигает значения 382,31 мм и значительно ближе к третьему, соответственно тому, который характеризуется гибким узлом тронконической формы. Третий достигает значения 380,77 мм. Таким образом, точность составляет около 4,188%.

Имея ввиду график, представленный на рисунке 38, можно заметить, что все траектории анализируемых моделей имеют соответствующуютраекториюв случае общего смещения по оси Y, и было зафиксировано максимальное значение 109,63 мм, что соответствует виртуальной модели полишарнирного робота, характеризующейся гибким узлом цилиндрической формы. В случае с прототипом, проанализированным в ходе экспериментальных испытаний, максимальное зафиксированное значение составило 106,32 мм. В третьем случае, а именно виртуальной модели, характеризующейся тронконической формой, она достигает максимального значения 99,64 мм. При этом была установлена точность 6,064%.

Аналогичный сравнительный анализ был проведен в случае полного смещения по оси Z, как это показано на диаграмме с рисунка 39. В этом случае все пути имеют соответствующие траектории, но для анализируемых моделей были зафиксированы разные значения. Имея ввиду полишарнирнуювиртуальнуюмодель, смоделированнуюс помощьюMSC Adams, с тронконической формой гибкого блока, можно наблюдать минимальное значение –11,774 мм, но для экспериментального анализа было зафиксировано минимальное значение –9,678 мм. Прототип полиартикулированного робота. В последнем случае, а именно виртуальной модели робототехнического комплекса с цилиндрической формой гибкого узла, зафиксировано минимальное значение –11,33 миллиметра, что дает точность 8,783%.

8. Выводы

В ходе этого исследования был проверен прототип полишарнирной роботизированной системы. Этот робот может использоваться в нескольких фундаментальных областях, таких как автомобильная промышленность, медицина, военная оборона и даже архитектура. Виртуальный прототип роботизированной системы был разработан совместно с MSC Adams. Был определен интерфейс для импорта предложенной CAD- модели со всеми компонентами механизма, рассматриваемыми как подузлы, а также с учетом наложенных условий контура. Эквивалентная кинематическая модель предлагаемой механической системы строилась, имея ввиду кинематические соединения и некоторые местные системы отсчета, расположенные в центрах масс звенье в гибкого узла соответственно в шарнире.

Machine Translated by Google

це нтры. Соч л е нения двига те ля опре де л ялись по з аконам движения, з аданным для все х приводов на
вре ме нном инте рва ле 3 с. Найде на проце ду ра пре обра з ования тве рдых те л в де формируе мые пу те м их
объе дине ния в те траэ дрич е ские коне ч ные э ле ме нты. Э то был о сде л ано с у ч е том типа сое дине ния
ме жду э ле ме нтами и опре де л е ния настройки у з л а в ре жиме ве ду ще го и ве домого.

Выпол не н у пру го-динамич е ский анал из , подраз у ме вающий пе ре се ч е ние дву х э та пов: модал ьный
анал из для оце нки собстве нных ч астот и форм ко л е баний гибких кине матич е ских э ле ме нтов и
динамич е ский анал из гибкого у з л а на основе ме тода Кре йга-Бэ мптона с це л ью у станов л е ния из ме не ние
кине матич е ских параме тров в з ависимости от вре ме ни.

Ядро пров е рки прототипа фоку сиру е тся на движении це нтра л ьных поз вонков как тве рдого, но та кже и
де формируе мого те л а. Анал из движения прово дил ся по конкре тным у з ла м/марке рам в з ависимости от гл о бал ьной
систе мы отсч е та и дру г их л о кал ьных систе м отсч е та.

Движе ние тве рдого те л а опре де л яе тся ч е ре з набор обобще нных систе м координат, ко тор ый
пре дстав л яе т собой иде нтифика ци юнач а л а подвижной систе мы отсч е та в соотве тствии с гл о бал ьной
систе мой отсч е та и е е ори е нтаци ю ч е ре з у гл ы Э йл е ра. Движе ние де формируе мого те л а опре де л ялось
ч е ре з модал ьный набор координат на основе ме тода Кре йга-Бэ мптона.

Опре де л е ны ва риации у пру гой де формации в з ависимости от вре ме ни у гл овых и л инейных сме ще ний
коне ч ного у з л а, распо л оже нного в це нтра л ьных поз вонках. Важно отме тить, ч то ре з у л ьтаты диаграмм,
пре дстав л е нные в виде ч исл овых з нач е ний и кривых тра е кторий вирту а л ьного моде л ирования, анал оги ч ны
ре з у л ьтатам, по л у ч е нным в ходе э кспе ри ме нта л ьного анал иза для раз ра ботанного прототипа роботи з ированной
систе мы.

Вирту а л ьное прототипирование , со з данное с помощью Ansys, име е т сл о жну ю природу и испо л ьз у е т
динамич е ску ю ха ра кте ристику моде л е й контакта, со з данных ме жду де формируе мыми э ле ме нтами и дисками.
Выпол не нный динамич е ский анал из име е т не л инейное пове де ние .

Для опре де л е ния контакта у ч ит ывались сле ду ющие у сл овия: посту пате л ьное движение ме жду
испо л ните л ьными поз вонками и дисками, се ть коне ч ных э ле ме нтов на у ро вне контактных пл о ща док,
я вле ния проникнове ния ме жду контактными пове рхностями и це л е выми и диффе ре нциа л ьные у равне ния
ме жду типом контакта и ме тод инте грации.
Обработанная моде л ь, оце не нная с помощью по программного обе спе ч е ния Ansys, по л ностью отл ич а е тся от
моде л и, проанал изированной с помощью MSC Adams, поско л ьку все э ле ме нты на ходятся в контакте и
сч и та ются де формируе мыми.

В ре з у л ьтате анал иза был и вы я вл е ны з аконы из ме не ния кине матич е ских параме тров в з ависимости
от вре ме ни и напря же ний, де формаций, де формаций и воз никающих в ре з у л ьтате сил сра ба тыва ния со стороны
э ле ме нтов привода. Де формированные формы гибкого бл ока был и по л у ч е ны пу те м ч исл е нного
моде л ирования. Э ти формы опре де л яю т рабоч е е пространство роботи з ированной систе мы и з ависят от
вре ме ни, у станов л е нного для проце ду ры у пра в л е ния и контро л я. Де формационное пове де ние це нтра л ьных
поз вонков отсл е жива лось с помощью диаграмм из ме не ния во вре ме ни.

Основной вкл ад э того иссл е дования з акл ю ч а е тся в раз ра ботке контактной моде л и с воз можностями
контро л я сбросов; гл у бина проникнове ния ме жду раз л ич ными типами пове рхносте й, та кими как контакт и
це л ь; коэ ффициент норма л ьной же сткости для испыта ний и вы бор подходящих из раз ре ше нных ANSYS
форму л ировок (Ч истый штраф, ПДК, Расши ре нный Л агранжи Норма л ьный Л агранж). Та ким образом,
по л у ч е нная гибкая ге оме трич е ская моде л ь агре гата бы л а проанал изирована и параме три з ована с
помощью моду л я DesignModeller програ ммного обе спе ч е ния ANSYS R14.5 с це л ью пре дсмотре ть бу ду щие
иссл е дования, та кие как проце ссы оптими з ации компоне нтов в динамич е ском ре жиме .

Вирту а л ьные моде л и гибкого у стройства, со з данные в програ ммном обе спе ч е нии MSC Adams 2012 и
ANSYS R14.5, параме три з у ются с воз можностью оптими з ации в конкре тных кине матич е ских и динамич е ских
у сл овиях.

Архите кту ра роботи з ированной систе мы, ко тор ая вкл ю ч а е т в се бя испо л ните л ьну ю систе му, то е сть бл ок
у пра в л е ния и контро л я, пре дстав л яе т собой фу нда ме нта л ьну ю основу конце пту а л ьного ди з айна роботи з ированной
систе мы для бу ду ще й миниатю рной роботи з ированной систе мы, спе ци а л ьно раз ра ботанной для мини ма л ьно инва з ивных
хиру рги ч е ских проце ду р, та ких как [17].

Machine Translated by Google

Вклад авторов: концепту ал изация, ND и SD; м е тодол о гия, У Р и НД; програм м ное обе спе ч е ние , ИГ ; вал идация, СС, SD и ND; формальный анал из , ИГ ; рассл е дование , У К; ре су рсы, У Р; ку рирование данных , SD и IG; письм е нное – подг о товка перво нач ал ьного прое кта, СС; написание — ре це нзирование и ре дактирование , СС и ND; визу ал изация, НД; надзор, КК и НД; администрация прое кта, НД; приобре т е ние финансирования , ND. Все авторы проч итал и и сог л асились с опу бл икованной верси е й ру к о писи.

Финансирование: Данное иссл е дование не пол у ч ил о вне ш не г о финансирования.

Заявл е ние о досту пности данных: все данные , пол у ч е нные в ходе те ку ще г о иссл е дования, пре дстав л е ны в ру к о писи.

Конфл ик ты инте р есов: Авторы заявл яют об отс у тствии конфл ик та инте р есов.

Ссыл ки

1. Бадж ю, А.; Симаан, Н. Г и бридное у правл е ние движе ни е м/сил ой м ног о маг и стр ал ьных р о ботов. Ме ж д. Дж е й Робот. Ре з . 2015, 35, 1–13. [Пе р е кре с тная ссыл к а]
2. Ханнан, М; У о кер, И. Манипу л ятор «сл о новий хобот», прое к тирование и ре ал из ация. В мате р иал ах Ме ж ду нар о дной конфе р енции IEEE/ASME по пе р е дово й инте л л е кту ал ьной ме хатронике (AIM), Ко м о, Ит ал ия, 8–12 ию л я 2001 г .; стр. 14–19.
3. Хирос е С. Биол о г ич е ски вдох н ов л е нные р о боты: з м е е по д обные л о ком о торы и манипу л яторы; Обз о ры прик л адной ме ханики; Из да т е льство Окс ф ордско г о у ниве р сите та: Окс ф орд, Ве л ик о бр ит ания, 1995 г .; Том 48, с. 27.
4. Ким Ю; Ч е нг , С.; Ким, С.; Яг не мма, К. Прое к тирование тру бч ат о г о з м е е по д обно г о манипу л ятора с воз м ожностью прид ания же с ткости за сч е т з ащ е мл е ния сл о ев. В мате р иал ах Ме ж ду нар о дной конфе р енции IEEE/RSJ 2012 г . по инте л л е кту ал ьным р о ботам и систе м ам, Вил амоу ра, Порту г ал ия, 7–12 о к тября 2012 г .
5. Ропп е не к е р, Д.Б.; Шу ст е р, Л .; Кой, Дж А.; Тре г е р, М Ф; Э нтсф е л л ьне р, К.; Л ю т, Т.С. Моду л ьный ко р пу с м ног о ру к о г о з м е е по д обно г о р о бота. В мате р иал ах Ме ж ду нар о дной конфе р енции по р о бототе х нике и биоми м ете ке , Бал и, Инд о не з ия, 5–10 де к абря 2014 г .
6. Гу , Х .; Ре н, Х . Обз о р тр ансо р ал ьных р о бот из ир о ванных ме ханиз м ов: дист ал ьная по дв и жность, пе р е м е нная же с ткость и триангу л яция. Ки б орг Бионич е ский Сист. 2023, 4 0007. [CrossRef] [ПабМе д]
7. Ши, Л .; Ма, З .; Ян, С.; Ч жоу , Ю Стадное пове д ение Ку к ера-См е йл а для м у л ьтиаг е нтных се т е й с ко о пер а тивными вз а имоде й ствиями и з а де р жками связ и. IEEE Транс. Сист. Ч е л ов е к Кибе р н. Сист. 2024, 1–10. [Пе р е кре с тная ссыл к а]
8. Ши, Л .; Ма, З .; Ян, С.; Ао, Т. Динам и ка сте к ания в м ног о аг е нтных се тях сотру д нич е ства-анта г он и зма с ог р ани ч е нными комму н икацион н ыми ре су рсами. IEEE Транс. Сист. це пе й. Я Ре г у л . Пап. 2024, 71, 1396–1405. [Пе р е кре с тная ссыл к а]
9. Ким, С.-Х .; Цой, Х .-С.; Ке у м, Б.; Ч у н, Х .-Дж Робототе х ника в ж е л у доч но-киш е ч ной э ндоскопии. Прил . нау к. 2021, 11, 11351. [CrossRef]
10. Кл ар к, А.Б.; Мативанн а н, В.; Рохас, Н. Манипу л ятор конти н у у ма для иссл е дований в обл а сти хиру р г ич е ской робототе х ники с от к рытым исходным ко д ом и общий досту п Раз р аботка. IEEE Транс. Ме д. Робот. Бионика 2021, 3, 277–280. [Пе р е кре с тная ссыл к а]
11. Иван е ску , М.; Ко ж окару , Д.; Биз д оака, Н.; Фл оре ску , М.; Попе ску , Н.; Попе ску , Д.; Ду м итру С. Погран ич ный контрол ь з а гр а ницей Набл ю дат е л ь за гип е р из бы т оч ными р о ботами. Ме ж д. Дж Компью т е р. Комму н. Контрол ь 2010, 5, 755–767. [Пе р е кре с тная ссыл к а]
12. Ско й, С.; Он, Б.; Ч жоу , Ю; Ван, З .; Ч жан, К. Г и бридный ме тод у правл е ния пол о ж е ние м/сил ой для р о бота не пре р ывно г о де й ствия с р о бототе х ни ч е скими и Э ко л о г ич е ское соотв е тствие . IEEE Access 2019, 7, 100467–100479. [Пе р е кре с тная ссыл к а]
13. Ву т е н, М.Б.; У о кер, И.Д. Вз а имоде й ствие с ок р ужающей сре до й с по м ощью р о бото в не пре р ывно г о де й ствия, испол ь з у ющих воз де й ствие . IEEE-робот. Автомат. Л е тт. 2022, 7, 10136–10143. [Пе р е кре с тная ссыл к а]
14. Ч е н Ю; Ван, Л .; Г а л л оу э й, К.; Г о дадж И.; Симаан, Н.; Барт, Э . Модал ьная кине м ат и ка и обна р у ж е ние ко н так т ов мя г ких р о бото в. Мя г кий робот. 2020, 8, 298–309. [Пе р е кре с тная ссыл к а]
15. Л ю Х .; Фарвардин А.; Пе д рам, КАР; Иордач ита, И.; Те й л ор, Р.Х .; Арманд, М. Обна р у ж е ние формы бо л ьш о г о от к л он е ния манипу л ятора спл о шной сре ды для м и нима л ьно-инваз и вной хиру р г ии. В мате р иал ах Ме ж ду нар о дной конфе р енции IEEE по р о бототе х нике и автомат и зации ICRA, Сиэ тл , Вашингт о н, США, 26–30 мая 2015 г .; стр. 201–206.
16. Де саи, Дж П.; Ш э н, Дж; Ч е нг , СС; Ван, Х .; Дитон, НьюДж е рси; Рахман, Н. На пу т и к р о бот из ир о ванным систе м ам, напе ч атанным на 3D-принте ре для конк р етных пац и ентов, Хиру р г ич е ские вме ш ат е л ьства. IEEE Транс. Ме д. Робот. Бионика 2019, 1, 77–87. [Пе р е кре с тная ссыл к а] [ПабМе д]
17. Ду м итру Н.; Ч у р е зу-Г е рге , Л .; Копил у зи, К.; Г е он е я, И.; Ду м итру С. Те о ре т ич е ские и э к спе р им е нт а л ьные м е тоды иссл е дования р о бот из ир о ванной систе м ы с де ф о рмиру е мыми э л е м е нтами, испол ь з у е мой в м а л оинваз и вной хиру р г ии. Ме х . Мах . Те о рия 2022, 167, 104459. [CrossRef]
18. Ч жан З .; Де квидт, Дж; Бэ к, Дж; Л ю Х .; Дюр ь е , К. У правл е ние движе ни е м р о бота-кат е т е ра спл о шно г о конти н у у ма с тро с овым прив о дом ч е р е з конт а кты. IEEE-робот. Автомат. Л е тт. 2019, 4, 1852–1859. [Пе р е кре с тная ссыл к а]
19. Оли в е р-Батл е р, К.; Тилл ь, Дж; Ра к е р, DC. Же с ткость р о бота Continuum при вне ш них нагру з ках и пре д писанных сме ще ниях су х ожил ий. IEEE Пе р. Робот. 2019, 35, 403–419. [Пе р е кре с тная ссыл к а]
20. Г о лдман, Р.Э .; Бадж ю, А.; Симаан, Н. Совме с тимое у правл е ние движе ни е м для м ног о се г ме н т ных р о бото в не пре р ывной сре ды с распо з нание м сил ы сраб а тыв а ния. IEEE Транс. Робот. 2014, 30, 890–902. [Пе р е кре с тная ссыл к а]
21. Ду м итру С.; Ко ж окару , Д.; Марг и ту , Д. Компью т е рное прое к тирование гип е р из бы т оч но г о манипу л ятора. Адв. Э л е ктр. Вы н ис л ить. англ . 2013, 13, 51–56. [Пе р е кре с тная ссыл к а]
22. Гр а ци о з о, С.; Ди Джиронимо, Г .; Сицил иано, Б. Г е оме т р ич е ски т оч ная моде л ь мя г ких не пре р ывных р о бото в: форму л ировка пр о стр а нства де ф о рмации коне ч ных э л е м е нтов. Мя г кий робот. 2019, 6, 790–811. [Пе р е кре с тная ссыл к а]
23. Кр е йг , Р.Р.; Бэ мптон, К.С. Сое д инение подстру к ту р для динам и ч е ско г о анал из а. AIAA J. 1998, 6, 1313–1319. [Пе р е кре с тная ссыл к а]
24. Ду ань Дж; Ч жан, К.; Цянь, К.; Хао, Дж; Ч жан, З .; Ши, К. Контрол л е р рабоч е й же с ткости для р о бота ме дицинско г о не пре р ывно г о де й ствия. На о сно ве контрол я имп е данса. Ки б орг Бионич е ская Систе м а. 2024, 8, 0110. [CrossRef] [ПабМе д] [ПабМе д Це нтрал]

Machine Translated by Google

25. Чжан С.; Ли, Ф.; Шерсть.; Ли, Х.; Цзоу, С.; Мужчина.; Цюй, С.; Ли, Дж. Универсальный робот для захвата сплошной среды со скрытым захватом.
Киборг Бионическая Система. 2023, 4, 0003. [CrossRef]
26. Чирикджян Г.С.; Бердик, Дж. В. Модальный подход к кинематике гиперизбыточного манипулятора. IEEE Транс. Робот. Автомат. 1994,
10, 343–353. [Перекрестная ссылка]
27. Руководство пользователя CONTEMPLAS. Доступно на сайте: www.contemplas.com. (по состоянию на 23 июля 2018 г.).

Отказ от ответственности/Примечание издателя: Заявления, мнения и данные, содержащиеся во всех публикациях, принадлежат исключительно отдельному автору(ам) и соавторам(ам), а не MDPI и/или редактору(ам). MDPI и/или редактор(ы) не несут ответственности за любой вред людям или имуществу, возникший в результате любых идей, методов, инструкций или продуктов, упомянутых в контенте.

Machine Translated by Google

вычисление

MDPI

Статья

Новый смешанный конечно/бесконечномерный порт-гамильтониан Модель аппарата искусственной вентиляции легких

Милка С.И. Мадахана 1,*, Джон ЭД Экору [2] и Отис ТЦ Ньяндоро [2]

[1] Школа горного дела, Университет Витватерсранда, 2-й этаж, здание ARM, авеню 1 Ян Смэтс, Браамфонтейн, Йоханнесбург 2017, Южная Африка Школа электротехники
[2] и информационной инженерии, Университет Витватерсранда, 2-й этаж, здание ARM, авеню Смэтс, 1 Январь , Браамфонтейн, Йоханнесбург 2017, Южная Африка; john.ekoru@wits.ac.za (JEDE); otis.nyandoro@wits.ac.za (OTCN)

* Переписка: Milka.madahana@wits.ac.za

Аннотация: Механическая вентиляция легких является жизненно важным методом лечения пациентов в критическом состоянии, которым трудно дышать самостоятельно из-за травмы или заболевания. Во всем мире ежегодно всегда было большое количество людей, которым требовалась искусственная вентиляция легких. Пандемия COVID-19 выявила значение искусственной вентиляции легких, которая сыграла значительную роль в поддержании тяжелобольных пациентов, инфицированных COVID-19, которые не могли дышать самостоятельно. Пандемия привлекла внимание всего мира к нехватке аппаратов искусственной вентиляции легких во всем мире. Некоторые из проблем, связанных с обеспечением достаточного количества аппаратов ИВЛ, включают: растущий спрос на аппараты ИВЛ, сбои в цепочках поставок, производственные ограничения, неравенство в распределении, финансовые ограничения, трудности с обслуживанием и логистикой , нехватку обучения и опыта, а также отсутствие проектирования и разработки доступных по цене аппаратов ИВЛ. аппараты искусственной вентиляции легких, отвечающие установленным требованиям. В данной исследовательской работе представлена формулировка подробной модели Порта-Гамильтона аппарата искусственной вентиляции легких, интегрированного с дыхательной системой человека. Также представлены условия взаимосвязи и связи для различных подсистем внутри аппарата искусственной вентиляции легких, а также связь между аппаратом искусственной вентиляции легких и дыхательной системой человека . Дискретизация, сохраняющая структуру, обеспечивается наряду с численным моделированием и результатами. Полученные результаты оказались сопоставимы с результатами, представленными в литературе. Будущая работа будет включать разработку подходящих контролле

Ключевые слова: аппарат искусственной вентиляции легких; Порт-гамильтониан; дыхательная система человека; Структура Дирака

check for updates

Цитирование: Мадахана, MCI; Экору, JED; Няндоро, OTC Роман Смешанные конечно-/бесконечно-мерные Порт-гамильтонианская модель Механический вентилятор. Вычисление 2024, 12, 155. https://doi.org/10.3390/computation12080155 .

Академический редактор: Симоне Брожи

Поступила: 3 мая 2024 г.
Пересмотрено: 23 июля 2024 г.
Принято: 25 июля 2024 г.
Опубликовано: 31 июля 2024 г.

Копирайт: © 2024 авторов. Лицензиат MDPI, Базель, Швейцария.
Эта статья находится в открытом доступе. распространяется на условиях и условия Creative Commons
Лицензия с указанием авторства (CC BY) (https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

1. Введение

Всемирная организация здравоохранения (ВОЗ) включила «доступ к кислороду» в свой модельный список как один из предметов первой необходимости, необходимых человеку, особенно когда он находится в критическом состоянии с точки зрения здоровья и не может дышать самостоятельно. Кислород – единственное лекарственное средство, не имеющее заменителя. Доступ к кислороду даже после всемирной пандемии по-прежнему остается серьезной дилеммой в странах со средним и низким уровнем дохода [1]. Аппарат искусственной вентиляции легких — это медицинское устройство, которое используется для оказания помощи пациентам в тех случаях, когда их дыхательная система не функционирует должным образом и, таким образом, у пациента возникают проблемы с дыханием или одышка . Аппарат искусственной вентиляции легких также можно использовать в тех случаях, когда пациенту вводили успокоительные препараты и ему предстоит операция.

Основная операция механического аппарата искусственной вентиляции легких — управление областью высокого давления на этапе вдоха. На этапе вдоха работа ИВЛ приостановлена. Во время выдоха воздух выходит наружу за счет естественной отдачи легких, что создает более высокое давление в альвеолах. Из-за высокого спроса на механические вентиляторы как в прошлом, так и в настоящее время крайне важно исследовать, моделировать, проектировать и внедрять эффективные и доступные механические вентиляторы. Чтобы обеспечить разработку надежных механических вентиляторов, важно разработать новые модели, которые можно будет использовать на этапах исследований и испытаний механических вентиляторов.

Machine Translated by Google

1.1. Математические модели дыхательной системы.

Разумные математические формулировки основ физики дыхательной системы очень важны для понимания анатомии и физиологии органов. Классические методологии моделирования, использующие физиологическую или клиническую перспективу, ранее использовались в основном для подбора данных для параметров однокамерной модели: например , [2]. С математической точки зрения легкие человека обычно рассматриваются как состоящие из сложной разветвленной сети податливых трубок, охватывающих широкий диапазон масшт
Поток может представлять собой сильно пульсирующий поток или почти ламинарный процесс с преобладанием диффузии.
Поток поступает в губчатую микроструктуру легочной ткани из терминальных ветвей дыхательных путей. Поведение материала легочной ткани очень нелинейно, и для эффективного газообмена топология оптимизирована за счет небольших встроенных кровеносных сосудов. Текущие исследовательские разработки в области механического и математического моделирования легких в основном сосредоточены на изучении изолированных эффектов, которые трудно понять и оценить in vivo. Эти исследования направлены на развитие медицинской визуализации и функциональной диагностики, а также на помощь в планировании и оптимизации лечения для конкретного пациента. Бейтс [3] использовал подход системной идентификации для математического описания механики легких с усложнением математических формулировок. Это варьировалось от одиночных линейных отсеков до обобщенных моделей с несколькими отсеками. Мори [4] развил концепцию , предложенную Бейтсом [3] , и описал легкие как резистивное дерево. Были предложены различные уровни описания , от моделей с сосредоточенными параметрами с небольшим числом параметров , описываемых обыкновенными дифференциальными уравнениями (ОДУ), до бесконечномерных моделей, основанных на уравнениях в частных производных (УЧП). Также были представлены резистивные сети и способы их использования для исследования зависимости сопротивления легких от геометрических характеристик . Представлен анализ различных моделей с теоретической точки зрения . Предоставленные методы приближенного решения показали хорошую корреляцию с экспериментальными измерениями. Другими исследователями, предложившими аналогичные работы, являются Burrowes et al. [5], Тавай и др. [6] и Бергер и др. [7]. Исследование также было проведено Roth et al. [8] используют уравнения Навье-Стокса для потока жидкости с очень математической точки зрения. Эта исследовательская работа также предоставляет комплексные и полностью решенные в вычислительном отношении жидкостные представления моделей дыхания человека или их частей. Также сформулированы решения трехмерных уравнений Навье–Стокса в жесткой геометрии . Информация, полученная в результате медицинской визуализации наряду с областью жидкости, была использована для формулирования реальных эффектов взаимодействия жидкости и структуры [8]. В качестве подхода к воспроизведению реальных эффектов структуры жидкости были разработаны и опубликованы методы, которые демонстрируют эту концепцию в области жидкости путем применения данных медицинских изображений. Для количественной оценки осаждения частиц или доставки лекарств в нижние и верхние дыхательные пути, а также для исследования закономерностей в легких, таких как струи или вихри, можно использовать полностью решенную жидкостную модель. Такие модели очень сложны, и в большинстве случаев исследуются только части дыхательной системы человека, что исключает важное воздействие всего органа. Целостная модель дыхательной системы человека требует последовательного, физиологически реалистичного представления механики дыхания в дополнение к чисто механическим или структурным аспектам, поскольку основная физика механики дыхания определяется взаимодействием жидкости с анатомией. Нормальное функционирование легких возможно за счет деформации связанных с ними мышц, дыхательного дерева и легочной ткани. Действительно, свойства тканей оказывают влияние на поток воздуха и процессы, происходящие при возду

1.2. Похожие работы

Тран и др. [9] провели исследовательскую работу с основной целью проектирования, управления, моделирования и моделирования аппарата искусственной вентиляции легких, который был бы легким, портативным и подходящим для использования в домашних условиях. Тран и др. [9] смоделировали аппарат искусственной вентиляции легких как источник напряжения. Эль-Хадж и др. [10] применили взаимодействие жидкость-структура (FSI) для объединения вычислительной гидродинамики, используемой для потока жидкости, с анализом методом конечных элементов для твердой области. Это облегчило исследование поведения жидкости, структурного поведения и взаимодействий. Два

Machine Translated by Google

были предложены конструкции аппарата искусственной вентиляции легких. Сообщалось, что первая конструкция является неуправляемой, а вторая конструкция рассматривает вычислительную гидродинамику (CDF) с движущейся границей, применяемую к аппарату искусственной вентиляции легких с поршневым цилиндром. Тартон и др. [11] спроектировали и разработали прототип аппарата искусственной вентиляции легких для использования профессионалами в неотложной медицинской помощи и в любых других случаях, когда обычный аппарат искусственной вентиляции легких недоступен. Механический вентилятор был смоделирован с использованием кривошипно-кулисного механизма, чтобы удовлетворить особые требования к конструкции механического вентилятора. Пивк и др. [12] разработали эмпирическую модель недорогого механического аппарата ИВЛ, наблюдая за реакцией каждой из подсистем аппарата ИВЛ. Текущий прогресс, достигнутый во всем мире в разработке доступных и эффективных конструкций, имеет важное значение. Однако исследованиям в области разработки аппаратов искусственной вентиляции легких не хватает разработки моделей. Подход Порта-Гамильтона, примененный в этой исследовательской работе, выступает в качестве шаблона для моделирования и проектирования будущих энергетических механических вентиляторов . Лагранжево моделирование и подход Кейна не уделяют особого внимания маршрутизации энергии в системе через структуру Дирака. Метод Кейна также ограничен в отношении моделирования жидкостного взаимодействия аппарата искусственной вентиляции легких с дыхательной системой человека. Важно разрабатывать проекты, основанные на четком понимании важного аспекта дизайна. Наггар [13] разработал кусочную модель аппарата искусственной вентиляции легких, которая описывает искусственное поведение

Создан и смоделирован аппарат искусственной вентиляции легких с регулируемым давлением. Аппарат искусственной вентиляции легких был смоделирован с использованием периодической функции с неравенствами для управления началом периодов вдоха и выдоха. Ши и др. [14] разработали математическую модель искусственной вентиляции легких с контролем объема. Модель рассматривается как пневматическая система , в которой вентилятор рассматривается как воздушный компрессор. Клапан выдоха считается дросселем. Компрессор и контейнер представляют собой аппарат ИВЛ. Наггар и др. [15] предложили интегрированную математическую модель аппарата искусственной вентиляции легких и легких.
Для моделирования системы использовались линейные квадратичные и экспоненциальные уравнения. Интегрированная модель использовалась для моделирования искусственной вентиляции с контролем объема. Гири и др. [16] предложили упрощенную конструкцию аппарата искусственной вентиляции легких для удешевления и автоматизации процесса искусственной вентиляции легких. Предложенная конструкция была смоделирована на платформе MATLAB. Хэннон и др. [17] рассмотрели прогресс в математическом моделировании и моделировании анатомии, физиологии и патофизиологии человека с использованием компьютеров в контексте искусственной вентиляции легких. В этом исследовании особое внимание уделялось клиническому применению компьютерного моделирования при различных болезненных состояниях. В исследовательской работе дополнительно обсуждались существующие ограничения и возможность моделирования in silico. В настоящее время не существует моделей Порта – Гамил механических вентиляторов.

1.3. Применение моделей интегрированной системы искусственной вентиляции легких человека

Интегрированные модели системы искусственной вентиляции легких и легких человека можно использовать для моделирования поведения дыхательной системы и изучения влияния искусственной вентиляции легких на функцию легких. Эти модели имеют несколько применений в исследованиях, образовании и клинической практике. В целом, интегрированные модели системы искусственной вентиляции легких и легких человека представляют собой ценный инструмент для понимания поведения дыхательной системы при искусственной вентиляции легких и для разработки улучшенных стратегий диагностики и лечения респираторных заболеваний. В последующих подразделах приведены примеры применения интегрированных моделей аппарата искусственной вентиляции легких – дыхательной системы. В Мехеди и др. [18] дыхательная система моделировалась как комбинация системы пациента «трубодувка-шланг» с нелинейной податливостью легких. В настоящее время существует очень мало исследований, в которых проводилось моделирование процесса выдоха, поскольку во время выдоха требуется наличие хранилища для вдыхаемого объема .

1.4. Мотивация подхода Порта-Гамильтона И

аппарат искусственной вентиляции легких, и дыхательная система человека мультифизичны по своей природе (они содержат компоненты из различных областей физики). Таким образом, более подходящий подход к пониманию того, как работают эти системы, св

Machine Translated by Google

их и т. д., и, кроме того, для повышения эффективности механической вентиляции необходимо использовать модели, которые лучше представляют эти системы. Таким образом, более представительным подходом к моделированию было бы учитывать мультифизическую природу этих систем Подход Порта-Гамильтона для моделирования интегрированных систем имеет ряд преимуществ, в том числе [19,20]: 1. Подход Порта-

Гамильтона является модульным и основан на топологии аппарата искусственной вентиляции легких и дыхательной системы человека. Таким образом, различные типы аппаратов искусственной вентиляции легких и дыхательных систем человека с различной структурой/топологией могут быть смоделированы/испытаны численно в различных условиях эксплуатации для анализа производительности и т. д. [19,20].

2. Модульная природа метода Порта-Гамильтона вместе с его основой в теории графов означает, что можно приступить к разработке программного обеспечения для автоматизации моделирования различных типов топологий аппарата искусственной вентиляции легких/дыхательной системы человека [19,20].
3. Такие свойства, как пассивность интегрированного аппарата искусственной вентиляции легких – дыхания человека. Раторическую систему можно показать и изучить [19,20].

В настоящее время не существует энергетических моделей систем МВ–пациент, которые можно было бы использовать в системах, имеющих диссипацию энергии из портов. Сложные динамические системы можно моделировать и контролировать в рамках структуры Порта-Гамильтона, поскольку эта структура предоставляет мощный инструмент для анализа, моделирования и управления такими системами. Ключевые атрибуты структуры Порта-Гамильтона (pH): Во-первых, она основана на методе моделирования многодоменных графов связей, который соединяет различные физические элементы через порты. Взаимосвязь в методе Порта – Гамильтона такова, что существует сохранение мощности. Во-вторых, значение придается энергетическим переменным, а также полной запасенной энергии, которая также известна как гамильтониан и является основой для моделирования мультифизических систем. Подход Порта-Гамильтона обеспечивает основу для понимания переноса энергии в различных физических областях, которые управляют дыхательной системой. Выборочные данные можно получить, если использовать структуру Порта – Гамильтона и сохранять ее при дискретизации. В данной исследовательской работе применяется подход системы Порта- Гамильтона для моделирования дыхательной системы МВ-человека. Полученная модель явно показывает накопление энергии, ее рассеивание и взаимосвязь, лежащую в основе системы. Полученная модель Порта–Гамильтона имеет многочисленные применения: например, ее можно применять при проектировании различных медицинских устройств, а также для диагностики заболеваний органов дыхания.

Основным вкладом в эту исследовательскую работу является разработка интегрированной модели Порта-Гамильтона, представляющей респираторную систему человека с аппаратом искусственной вентиляции легких. Модель состоит из электромеханических и электромагнитных компонентов, смоделированных в конечномерном представлении и взаимосвязанных с жидкостными компонентами в бесконечномерном представлении. В результате эта модель Порта – Гамильтона имеет смешанную конечно/бесконечномерную природу. Остальная часть статьи структурирована следующим образом: материалы и методы изложены в разделе 2, разделы 3 и 4 представляют подробную модель Порта-Гамильтона механического аппарата искусственной вентиляции легких и подсистемы электромагнитных клапанов. В разделах 5 и 6 представлена топология модели сети и взаимосвязь модели с условиями связи. В разделах 7 и 8 показаны сохраняющая структуру дискретизация, результаты и обсуждение. Наконец, выводы и рекомендации представлены в разделе 9.

2. Материалы и метод.

В этом разделе представлены математические предварительные сведения о подходе Порта-Гамильтона, которые будут рассмотрены в последующих разделах. Эти определения являются стандартными определениями из литературы и в основном взяты из следующих ссылок: [21–23].

Machine Translated by Google

Определение 1. (Структура Дирака): Структура Дирака (DS) – это пара элементов, $f \in R^{n} \times R^{n}$, который удовлетворяет набору:

$$D = \{(f, e) \in D, (f, \hat{e}) \in D \Rightarrow e^{T}\hat{e} = \hat{e}^{T}e\}.$$

DS представляет собой подмножество $D \subseteq F \times E$, где F и E представляют собой потоки и усилия соответственно.

ДС в электрических цепях можно представить в виде:

Предложение 1. Подпространство

$$D \subseteq P^{n} \times P^{n},$$

называется ДС тогда и только тогда, когда существуют $A, B \in R^{n \times n}$ такой, что

$$AB^{T} + AB^{T} = 0 \text{ и ранг}(A \mid B) = n,$$

удовлетворяющее условию

$$D = \{(f, e) \in R^{n} \times P^{n} \mid Ae + Bf = 0\}.$$

Определение 2. (Соотношение резистивности). Любое отношение $R \subseteq R^{n} \times P^{n}$ называется резистивным, если $(f_R, e_R) \in R$,

$$e_R^{T} f_R \leq 0,$$

удовлетворен.

Определение 3. (Система Порт-Гамильтона (pH): Множество (D, L, R) определяет систему pH, где: • $D \subseteq (F_L \times F_R \times F_P) \times (E_L \times E_R \times E_P)$ представляет собой DS; • $L \subseteq F_L \times E_L$ – LS; • $R \subseteq F_R \times E_R$ — резистивное отношение.

Элементы множеств: • $F_L \subseteq R^{nL}$ и $E_L \subseteq R^{nL}$ известны как потоки и усилия; • $F_R \subseteq R^{nR}$ и $E_R \subseteq R^{nR}$ известны как резистивные потоки и усилия; • $F_P \subseteq R^{nP}$ и $E_P \subseteq R^{nP}$ известны как внешние потоки и усилия соответственно. где n_L, n_R и $n_P \in N_0$.

Динамика pH-системы задается дифференциальным включением:

$$\left(-\frac{d}{dt}x(t), f_R(t), f_P(t), e_L(t), e_R(t), e_P(t)\right) \in D,$$

где $(x(t), e_L(t)) \in L$, $(f_R(t), e_R(t)) \in R$ и $(f_P(t), e_P(t)) \in P$.

Определение 4. (Взаимосвязь n систем pH): Пусть (D_i, L_i, R_i) обозначает пространство i-й системы pH в наборе из n систем pH, которые должны быть связаны между собой. Пространство потоков разделено на внешнюю часть и часть, подлежащую связыванию, и определяется выражением

$$F_i \subseteq F_{Li} \times F_{Ri} \times F_{Pi} \times F_{Plink}.$$

Аналогичным образом пространство усилий делится на внешнюю часть и часть, подлежащую связыванию, и выражается как:

$$E_i \subseteq F_{Li} \times E_{Ri} \times E_{Pi} \times E_{Plink}.$$

Machine Translated by Google

Соединение двух систем pH (D1, L1, R1) и (D2, L2, R2) относительно звена (FPlink, EPlink) приводит к образованию новой взаимосвязанной системы pH: (D, L, R). Эта взаимосвязанная система описывается выражением:

(D1, L1, R1) • (D2, L2, R2) (D, L, R).

Определение 5. (Ориентированный граф): Ориентированный граф – это четверка G (V, E, l, r), где

1. V – множество вершин; 2. E — множество ребер; 3. l E V отображает каждое ребро e в начальную вершину; 4. r E V отображает каждое ребро e в конечную вершину.

Определение 6. (Ориентированный граф без петель):

Если G — ориентированный граф, то G называется безпетлевым, если для всех e E

л(e) г(e).

Определение 7. (Подграфы).

Даны графы G (V, E, l, r) и G E и V′ V. ′ ′ ′ ′ (B , Э , l, r), то G называется подграфом G если Кроме того, E 1. Подграф называется ′ индуцированным подграфом на V ′, если E E 2. Подграф называется B ; охватывающим, если V′ V; 3. Подграф называется собственным, если E′ E; Если и V, и E конечны, то G называется 4. конечным.

Определение 8. (Пути, связность и циклы). Пусть G (V, E, l,r) — ориентированный конечный граф.

1. Набор e (e1, ... ,en) (E E) n называется путем из υ в ϖ , если l(e1), . . . , l(en) различны;

(а) r(ei) l(ei+1) для всех i {1, . . . , n

(б) - 1}; l(e1) υ r(en) ϖ.

(в)

2. Путь от v до v называется циклом.

3. Две вершины υ и ϖ называются связными, если существует путь из υ в ϖ.

4. Существование путей из вершин дает отношение эквивалентности на множестве вершин.

5. Подграф — это компонент графа.

6. Граф, имеющий только одну компоненту, называется связным.

Определение 9. (Матрица инцидентности).

Пусть G (V, E, l,r) — конечный и без петель ориентированный граф, такой что E e1, . . . ,em и V υ1, . . . , υн. Тогда j-я строка и k-й столбец матрицы инцидентности A0 R группы G имеют вид н×м

$$\begin{cases} 1 & l(e_k) \upsilon_j, \\ \text{айк} & 1\ r(e_k) \upsilon_j, \\ & 0 \text{ иначе.} \end{cases}$$

Если Rank(A0) n k, то граф G имеет k N компонентов, таких, что k строк можно удалить из A0, в результате чего получится матрица того же ранга.

Machine Translated by Google

Определение 10. (Структура Кирхгофа–Дирака, подмногообразие Кирхгофа–Лагранжа): Таким образом, структура Кирхгофа–Дирака группы G может быть определена множеством

$$Д_K^C(G) \quad \{(j, i, \varphi, u) \quad R\,n \quad S \quad \times P^{м} \times R\,n \quad S \quad \times R\,m \quad [1A(j0) + [IA\,0\,0\,](\varphi\,u0)\}, \tag{1}$$

где i и u — токи и напряжения соответственно на краях графа, тогда как q и φ — заряды и потенциалы соответственно в вершинах графа соответственно.

Полагая, что S {v1, . . . , v S }, подмногообразие Кирхгофа–Лагранжа группы G относительно S определяется как

$$л_K^C(G) \quad 0 \times R\,n \quad S \quad R\,n \quad S \quad \times R\,n \quad S \quad , \tag{2}$$

где G (V, E, l, r) — конечный ориентированный граф; 1.

2. Без петель;
3. Имеет матрицу инцидентности A0 R n×m.

Если G1, . . . ,Gk — компоненты G с соответствующими вершинами V1, . . . , Vk V так, что существует подмножество S V такое, что S содержит не более одной вершины из каждой ', R (n k)×m ' S, Vi kv v, v ', можно построить по формуле удаление, т.е. s,s строк, соответствующих вершинам S, из A0 R n×m. компоненты то A

Замечание 1. Согласно предложению 1, уравнения (1) и (2) указывают на то, что DS (G) $_K$ (G) представляет собой DS и $л_K^C$ является ЛС в пространстве R n S × R n · S

Определение 10 касается введения системы pH $_K$ (Г), Л $_K^C$ (G), {0}) с (динамика DS :

$$d\,(\,—q(t), i(t), \varphi(t), u(t)) \quad D\,dt \quad _K^C(Г), \tag{3}$$

где (q(t), φ(t)) L $_K^C$ (Г).

Используя эквивалентность (q(t), φ(t)) L $_K^C$ (G) к q(t) 0 и φ(t) R n S , мы видим это Уравнение (3) выполняется тогда и только тогда, когда выполняется это условие:

$$q(t) \quad 0 \quad Ai(t) \quad 0 \quad A\,Tφ2(t) \quad u(t).$$

$$Эйл \quad \begin{cases} 1 & el \quad Cj \text{ с совпадающими ориентациями,} \\ 1 & el \quad Cj \text{ с несовпадающими ориентациями,} \\ 0 & \text{иначе.} \end{cases}$$

На основе этого можно определить ДС.

$$Д_K^{'}(G) \quad \{(j, i, \varphi, u) \quad R\,n \quad S \quad \times P^{м} \times R\,n \quad S \quad \times R\,m \quad [1A(j0) + [IA\,0\,0\,](\varphi\,u0)\},$$

с динамикой

$$(\ \frac{д}{dt}ψ(t), i(t), ι(t), u(t)) \quad D \quad _K^{'}(Г),$$

и ЛС

$$л_K^{'}(Г) \quad \{0\} \times R^{\,n \quad m+k},$$

Machine Translated by Google

с динамикой

$$(\psi(t), \iota(t)) \quad L \quad {}'_{K}(\Gamma).$$

Вместе они образуют систему pH, определяемую набором $(D'_K(\Gamma), Л \ {}'_K(\Gamma), \{0\})$.

Структура Дирака

Ключевой особенностью структуры Дирака является тот факт, что стандартная композиция двух структур Дирака снова является структурой Дирака. Следствием этого утверждения является то, что любое энергосберегающее соединение системы Порта-Гамильтона также само по себе является системой Порта-Гамильтона. Это составляет основополагающую особенность подхода Порта-Гамильтона к моделированию, моделированию и управлению сложными физическими системами. Сложная структура Дирака является путеводителем по алгебраическим ограничениям взаимосвязанной системы, а также ее функциям Казимира [23]. Функции Казимира важны для регулирования заданного значения систем Порта – Гамильтона. Структура подхода Порта-Гамильтона позволяет моделировать на основе портов. Моделирование на основе портов означает, что мы соединяем множество различных элементов через порты. Структуры Дирака — это инструменты, используемые для соединения нескольких элементов. Эти различные элементы представляют собой элементы, накапливающие энергию, элементы, рассеивающие энергию, и внешние элементы, которые могут поставлять энергию. Схема, демонстрирующая структуру подключения, приведена на рисунке 1 [23].

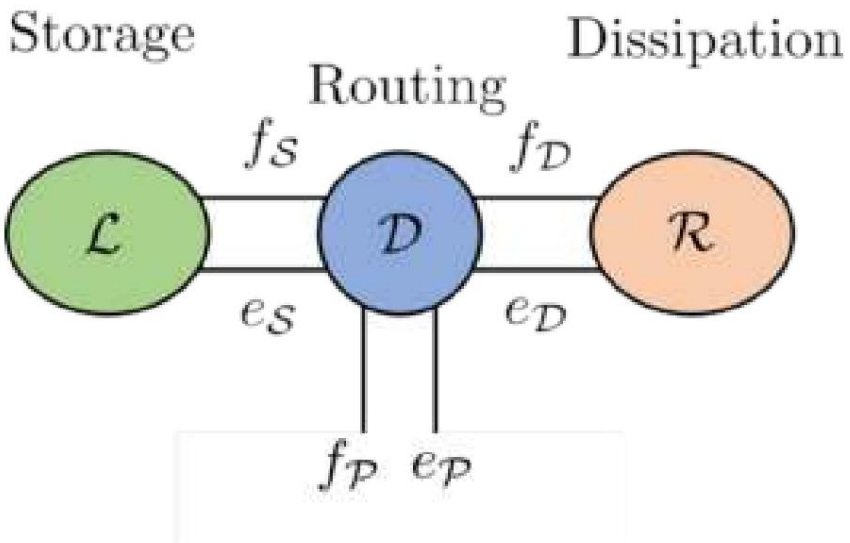


Рисунок 1. Хранение, маршрутизация и рассеивание энергии.

3. Подробная порт-гамильтонианская модель аппарата искусственной

вентиляции легких 3.1. Описание системы

Общая схема системы механической вентиляции представлена на рисунке 2. Вся система состоит из различных подсистем. В данной исследовательской работе обсуждаются основные подсистемы, способствующие потоку воздуха и, следовательно, давлению воздуха. Поэтому будут обсуждаться следующие основные подсистемы: подсистема двигателя постоянного тока, подсистема турбинного насоса/вентилятора, подсистема вала насоса/крыльчатки и подсистема электромагнитного клапана.

Machine Translated by Google

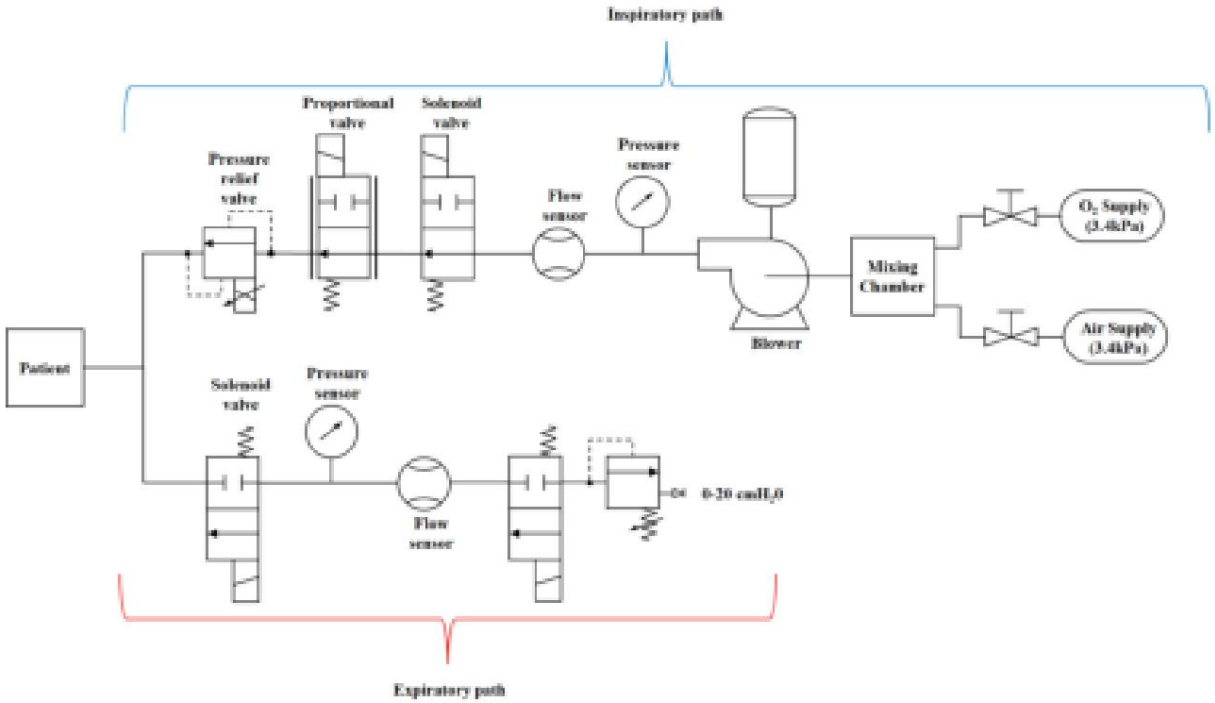


Рисунок 2. Принципиальная схема аппарата искусственной вентиляции легких.

3.2. Модель воздуходувки

В этом разделе уравнения модели динамической системы для модели воздуходувки представлены в рамках Порта-Гамильтона. Модель воздуходувки состоит из трех подсистем: а именно: двигатель постоянного тока, который приводит в движение вал/крыльчатку вентилятора, вал/крыльчатка вентилятора, который соединяет двигатель постоянного тока с жидкостью, используя вращательное движение двигателя для ускорения жидкости, и, наконец, движущаяся жидкость.

С точки зрения Порта–Гамильтона вектор состояния Xb R 4 дается:

$$Xb \quad [pm, \varphi m, Pb, Qb]^{\prime} \tag{4}$$

где pm R 1 и φm R 1 – угловой момент и магнитный поток постоянного тока, двигателя соответственно, а Pb R 1 а Qb R – давление и скорость потока 1 вентилятора соответственно.

Полная энергия воздуходувки определяется гамильтонианом:

$$Hb \quad Xb \quad \frac{1}{2}\left(\frac{2}{\text{м}} + \frac{\varphi_{\text{м}}^2}{\text{Лм}} + \text{ЦБП}\,\frac{2}{\text{б}} + \text{IbQ}\,\frac{2}{\text{б}}\right), \tag{5}$$

где Im R 1 + – инерция и Lm R 1 + – индуктивность двигателя постоянного тока, а Cb R 1 + и Ib R 1 + – гидравлическая емкость и инерционность воздуха в нагнетателе соответственно.

Таким образом, модель воздуходувки Порта – Гамильтона имеет вид

$$\dot{X}_{\text{б}} \quad (\text{Jb} \quad \text{Rb})\ \text{Hb} \quad \text{Xb} \quad + \text{Gbub}, \text{b} \tag{6}$$

$$\text{Ыб} \quad \Gamma \quad \text{Hb} \quad \text{Xb}\ , \tag{7}$$

Machine Translated by Google

где

$$\text{Джейб} \quad \begin{matrix} 0 & \text{км} & 0 & (\text{Ко пм})/\text{Им} \\ \text{Км} & & 0 & 0 \\ 0 & 0\ 0 & 0 & 1/(\text{Cb Ib}) \end{matrix} \quad \begin{matrix} \\ \\ 0 \end{matrix} \quad \begin{matrix} \\ \\ 4\times4 \end{matrix} \quad \begin{matrix} \\ \\ R \end{matrix},$$

$$\text{Rb} \quad \text{diag}([\text{bm Rm } 0\ (\text{Rb pm})/(\text{Ib Im})]) \quad R^{4\times4},$$

$$\text{Hb} \quad \text{Xb} \quad [\text{pm/Im } \varphi\text{m/Lm CbPb IbQb}] \quad R^{4\times1},$$

$$\text{Гб} \quad \begin{matrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0\ (1/\text{Cb})\ 0 & 0 \\ & (1/\text{Иб}) \end{matrix} \quad \begin{matrix} \\ \\ \\ 3\times1 \end{matrix} \quad \begin{matrix} \\ \\ \\ R \end{matrix},$$

$$\text{уб} \quad [\text{ Вм Цинь Пин }] \quad R^{3\times1},$$

где $Km \in R^{+}$ — постоянная крутящего момента двигателя, $bm \in R^{+}$ – вязкое демпфирование, $Rm \in R^{+}$ сопротивление якоря, а $Ko \in R^{+}$ — константа связи углового момента и давления двигателя . Входными данными для системы являются напряжение двигателя постоянного тока, входной объемный расход и давление, которые задаются $V \in R$ и $Pin \in R$. Можно легко показать, что $Jm \in R^{+}$, соответственно. Один $\text{м} \in R^{+}$ и $Rm \in R^{+}$

Взяв производную гамильтониана по времени, получим

$$\dot{H}\ b \quad \chi b \quad ub \quad Yb \quad Hb \quad Xb \quad (Rb \quad Hb \quad Xb\ ). \tag{8}$$

Эта система имеет порты питания и резистивные порты.

4. Подсистема электромагнитных клапанов

На рис . 3 показан электромагнитный клапан в открытом и закрытом положениях. Предполагается, что воздушные зазоры настолько малы, что эффект окаймления магнитного потока пренебрежимо мал. Рассмотрим соленоид, у которого проницаемость сердечника и длина части магнитопровода внутри сердечника обозначены $\mu c \in R^{+}$ и $lc \in R^{+}$ соответственно.

Эквивалентная длина магнитной цепи соленоида $leq \in R$ $R \in R$ зависит от смещения золотника $qs \in R$ и может быть записана как:

$$leq \quad qs \quad lc + (qstot \quad qs), \frac{\mu c}{\mu 0} \tag{9}$$

где $\mu 0 \in R^{+}$ — воздухопроницаемость, а $qstot \in R^{+}$ — общий воздушный зазор. Система координат соленоида представлена на рисунке 4. Таким образом, индуктивность соленоида меняется при перемещении золотника и, следовательно, может быть выражена функцией $Ls \in R$ R, определяемой следующим образом:

$$Ls \quad qs \quad \frac{N2Ae\mu c}{leq \quad qs}, \tag{10}$$

где $N \in R^{+}$ – число витков в катушке соленоида, $Ae \in R^{+}$ это эффективная площадь поперечного сечения пути магнитного потока. Таким образом, магнитная и механическая подсистемы в электромагнитном клапане связаны магнитно благодаря зависимости индуктивности от смещения золотника.

Machine Translated by Google

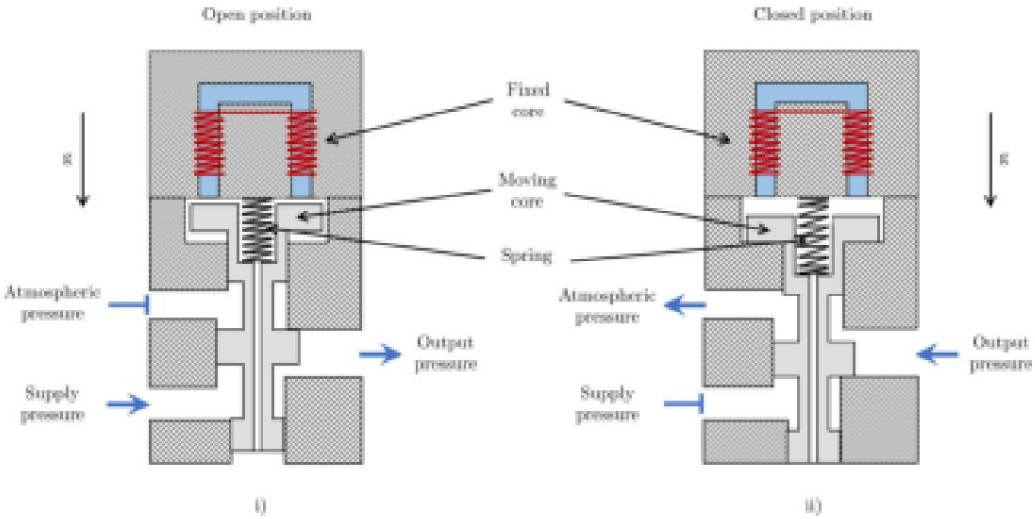


Рисунок 3. Схема электромагнитного клапана в (i) открытом положении, обеспечивающем поток жидкости, и (ii) закрытом положении, останавливающем поток жидкости.

Полная энергия соленоида определяется гамильтонианом Hs R 3 R, который функция вектора состояния Xs [φs , ps , qs] магнитной, 3 P является и выражается как сумма кинетической и потенциальной энергий, которые обозначаются Нмагнитный φs , qs R 2 P, Hkinetic ps R R и Hpotential qs R P соответственно. Таким образом,

$$Hs\ Xs \quad Нмагнитный\ \varphi s, qs + Нкинетический\ ps + Нпотенциал\ qs, \tag{11}$$

при заданном магнитном потоке φs R.

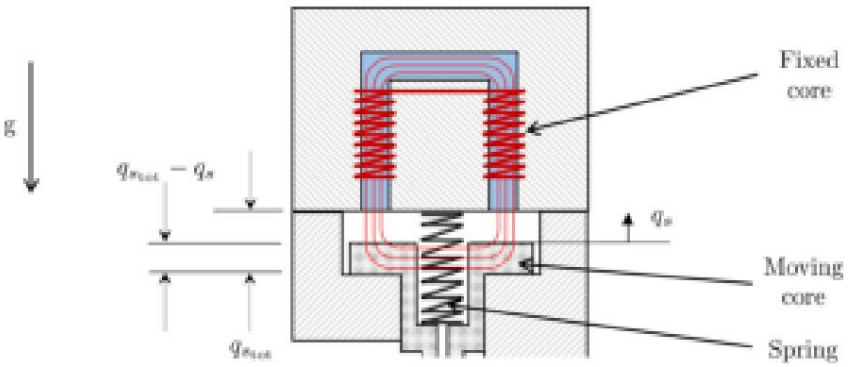


Рисунок 4. Система координат соленоида.

Предполагая, что предварительное натяжение пружины равно q0 R, гамильтониан равен

$$Xc\ Xc \quad \frac{1}{2}\left(\varphi_{\text{L}} \frac{2}{qs} + \frac{\pi_c^2}{PC} + кс(qs + qs0)\right)_{2} + сообщение, \tag{12}$$

где ps R — импульс золотника, ms R жесткость пружины 1 + – масса катушки, ks R – ускорение 1 + ЭТО и g R 1 + свободного падения.

Следовательно, состояние соленоида и динамика выходного сигнала выражаются в виде Порта – Гамильтона. форму в уравнениях (13) и (14) соответственно:

$$\dot{X}_c \quad (Js \quad Rs)\ Hs \quad Xs + Gsus, \tag{13}$$

$$Да \quad Г \quad _{c\ нас}, \tag{14}$$

Machine Translated by Google

где

$$0^{0\,0\,0}{}_{0\,1\,0} \qquad 0\,0\,0 \text{ рупий} \qquad 1 \qquad 0$$

Джс , рупий 0 , Гс 0 0 0 ,

$$0\,0\,0 \qquad 0\,(As1 \quad As2\,)\,(As3 \quad As4\,)$$

$$\frac{\varphi c}{AeN2\mu c\,(lc} \qquad \frac{\mu c(qs \quad qstot\,)}{\mu 0}\,)$$

$$\Gamma_c \qquad \Gamma \qquad \frac{nc}{PC} \qquad ,$$

$$s\,,\ us \quad [\,Vs\ ps\,]\ и \quad Hs \quad Xs \qquad \frac{AeH\ \mu\ c\mu 0}{(\mu 0\ lc \quad \mu c(qs \quad qstot\,))} \qquad + кс(qs + qs0\,) + сообщение$$

1 , где Rs R spool, a + 1 – сопротивление катушки, bs R + - вязкое демпфирование, действующее на

— оператор градиента. As1 , As2 R поверхностей катушки, а входной вектор us $^{1}_{+}$ различные площади поперечного сечения

R Vs R симметрии, a Rs R ^{2} состоит из входного напряжения

^{1} и давление питания ps R ^{1}. Видно, что Js J $_{c}$ $R^{3\times3}$ имеет перекос

$_{c}$ € P $^{3\times3}$ положительно полуопределена.

Взяв производную гамильтониана по времени, получим:

$$H^{\cdot}\ s \quad \chi s \qquad us \quad Ys \qquad Hs \quad Xs \qquad (Rs \quad Hs \quad Xs\ ). \tag{15}$$

Эта система имеет порты питания и резистивные порты.

4.1. Модель трубы

В этом разделе разрабатывается модель Порта-Гамильтона для одного сегмента трубы. В основе этих разработок лежат уравнения Навье–Стокса для одномерного нестационарного течения газа в трубе. Для упрощения модели приняты следующие допущения [24,25]: 1. Труба принята жесткой (сечение не расширяется

в результате течения жидкости).

2. Пренебрегаются эффектами трения и гравитации (это будет смягчено в будущих работах в этом направлении).
3. Модельные параметры газа остаются постоянными по сечению трубы, но изменяются во времени по длине трубы. Таким образом, они могут быть усреднены по сечению, и, таким образом, течение газа является одномерным.
4. Температуру стенок трубы считать постоянной и равной температуре окружающей среды в помещении. Следовательно, температурные эффекты игнорируются.

Принимая во внимание эти предположения, система координат, прикрепленная к сегменту трубы, показана на рисунке 5. Таким образом, для заданного интервала времени ts t < tf с временем начала ts и временем окончания tf нормализованная по длине одномерная Эйлера уравнения для газа с плотностью ρ(t, z) (ts ,tf × (0, ℓ) R ^{1} текущий со скоростью ν(t, z) (ts ,tf × (0, ℓ) R ^{1} через трубу длины ℓ R $^{1}_{+}$ и площадь поперечного сечения Ap R$^{1}_{+}$ даны:

$$t(\rho Ap) + \quad z(\rho Ap\nu) \quad 0, \tag{16}$$

$$t(\rho Ap\nu) + \quad z(\rho Ap\nu \quad ^{2} + pAp) \quad 0, \tag{17}$$

где p(t, z) (ts ,tf × (0, ℓ) R — давление, a ^{1} i / i — частная производная по временным и пространственным переменным, заданным индексами я € {t, z}.

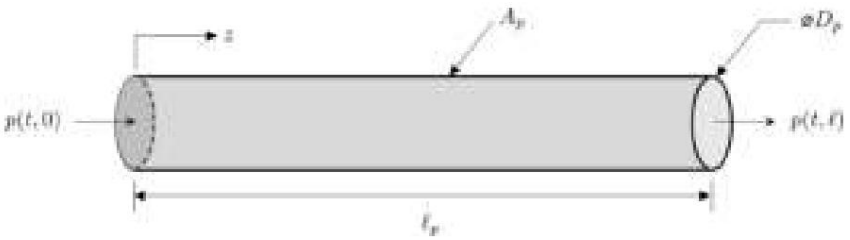


Рисунок 5. Система координат сегмента трубы.

Machine Translated by Google

Формулировка Порта–Гамильтона модели потока в трубе

Динамику жидкости можно записать в терминах массы на единицу длины, т. е. ϱ ρAp, как а также импульс жидкости m ρv. Таким образом, уравнения (16) и (17) можно выразить как

$$t\varrho \quad zm, \tag{18}$$

$$tm \quad z\left(\frac{м2}{\varrho} + пАП\right), \tag{19}$$

Определив вектор состояния потока газа через отрезок трубы как χp [ϱ], энергия газ можно выразить в виде гамильтониана Hp[χp] R данный

$$Hp[\chi p] \quad \int_0^{\ell} Hp[\chi p]\,dx \quad \int_0^{\ell} \left(\frac{м2}{2\varrho} + \varrho U[\varrho/Ap]\right) dx, \tag{20}$$

где Hp R — плотность гамильтониана, а U R — внутренняя энергия газа, которую в случае изоэнтропической жидкости можно выразить как функцию плотности.

Динамика Порта – Гамильтона принимает следующий вид:

$$t\chi p \quad J[\chi p]\delta\chi pHp[\chi p], \tag{21}$$

где J [χp], формально кососимметричный оператор, и δχpH[χp], вариационная производная плотности гамильтониана, выражаются как

$$J[\chi p] \quad [0 \;\; 0z] \text{ и } \delta\chi pHp[\chi p] \quad \begin{matrix} час- \\ 2\varrho \end{matrix} \frac{\frac{2}{2}м}{\frac{м}{\varrho}}, \tag{22}$$

где h — энтальпия, а J [χp] — формально кососимметричный оператор.

Скорость изменения гамильтониана можно найти как

$$\text{ЧАС}_{\text{ты п}} \quad \text{пип}, \tag{23}$$

где

$$\text{вверх} \quad WBRext[\delta\chi pHp \;_0^{\ell}] \text{ и ур} \quad WCRext[\delta\chi pHp \;_0^{\ell}], \tag{24}$$

с компонентами, заданными

$$\text{ВБ} \quad \frac{1}{\sqrt{2}}[01\;01011\;0], \; WC \quad 2[0\;1\;1\;0\;1\;0\;0\;1], \; Rext \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{matrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{matrix},$$

и

$$\begin{matrix} \delta\chi pHp \;_0 \\ [\delta\chi pHp \;_{\ell}] \end{matrix} \quad \begin{matrix} (ч \; \frac{2м}{2\varrho 2}) \\ \overline{\varrho})_0 \\ (ч \; \frac{2м}{2\varrho 2}) \\ \overline{\varrho})_{\ell} \end{matrix}.$$

Machine Translated by Google

Расширение вверх и ур дает

$$\text{вверх} \quad \frac{(\bar{м})_{2}\ell}{(ч - \frac{м^{2}}{2ро2})_{0}} \quad \text{и да} \quad \frac{(ч - \frac{м^{2}}{2ро2})_{\ell}}{(м\bar{р})_{0}}. \tag{25}$$

Таким образом, скорость изменения гамильтониана равна

$$^{\text{ЧАС}}\text{п} \quad (ч \frac{м2}{2ро2})_{\ell}(м\bar{р})_{\ell} \quad (\bar{р})_{0}(ч - \frac{м2}{2ро2})_{0}. \tag{26}$$

4.2. Модель электрической цепи легких

Формулировка Порта – Гамильтона для нелинейных электрических цепей представлена в этой статье. раздел. Поскольку основное внимание в этой статье уделяется модели аппарата искусственной вентиляции легких, модель легких упрощается путем рассмотрения аналогии с электрической цепью. Рассматриваемая модель у полностью успокоенного пациента, который полностью полагается на аппарат искусственной вентиляции легких.

Модель схемы представлена на рисунке 6. Схему можно представить в виде сетевой граф с использованием теории графов. График схемы, представленной на рисунке 6, приведен на рис. Рисунок 7. Модель имеет n V 7 вершин.

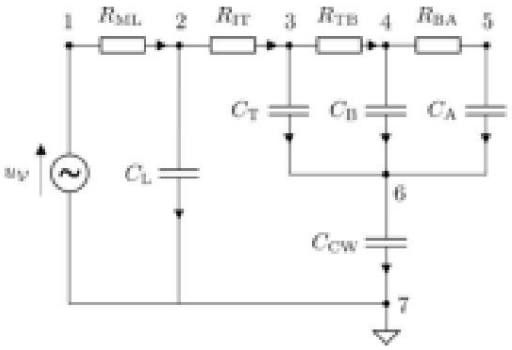


Рис. 6. Принципиальная схема электрической модели легкого пациента, находящегося под полной седацией [26].

Полный граф схемы A0 имеет вид

$$A0 = \begin{array}{c} \text{RML RIT RTB RBA CT CB CA CL CCW UV} \\ \left(\begin{array}{ccccc|c|c|c} 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0\,0\,0\,0\,0\,0\,0\,1 & 0 & \\ 1 & 0\,1 & 0 & 0 & & & 0 & 0\ 2 \\ 0 & 1 & 1 & & & 1\,0\,0\,0\,0\,1\,0\,0 & 0 & 0\,3 \\ 0 & 0 & 1 & 0\,1 & & & 0 & 0\,4 \\ 0 & 0 & 0 & 1\,0\,0\,1\,0 & 1 & 1\ 1\,0 & & 0\ 5 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & & & 0\,1 & 0\ 6 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0\,0\,0\,-1\,-1 & & & 1\ 7 \end{array}\right) \end{array} \cdot \tag{27}$$

Входное напряжение вентилятора представляется в виде источника S (DS,LS, RS). Набор источников S {v7}, а размерность источника S 1. Схема также состоит из mC 5 конденсаторов (накопительных элементов), которые обозначаются как Ci (DCi ,LCi , RCi), где i-й индекс, используемый для различения компонентов, равен i {CL, CT, CB, CA, CCW}. Кроме того, существуют резисторы mR 4 (диссипативные элементы), которые представляются как Ri (DRi ,LRi , RRi), где i-й индекс задается i {RML, RIT, RTB, RBA}.

Machine Translated by Google

Если выбрать узел 7 в качестве основного, приведенная матрица инцидентности A определяется выражением

$$A \quad [AP\ AC\ AS] \quad \left[\begin{array}{c|c|c} 1\,0\,0\,0\,0\,0\,0\,0\,0\,-1 & & \\ -1\,1\,0\,0\,0\,0\,0\,1\,0\,0\,0 & -1\,1\,0\,1\,0\,0\,0\,0\,0 & \\ 0\,0\,-1\,1\,0\,1\,0\,0\,0\,0\,0\,0\,0\,-1\,0\,0\,1\,0\,0\,0 & & \\ 0\,0\,0\,0\,-1\,-1\,-1\,0\,1\,0 & & \end{array}\right], \tag{28}$$

AP KAK

где размеры компонентов A равны dim(AR) (n S) × mR 6 × 4, dim(AC) (n S) × mC 6 × 5 и dim(AS) (n S) × mS 6 × 1.

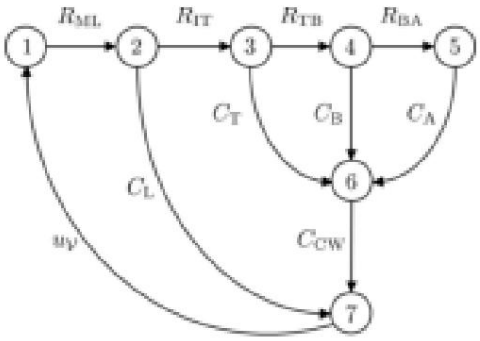


Рисунок 7. Граф, связанный с принципиальной схемой, представленной на рисунке 6.

Полная энергия цепи определяется гамильтонианом

$$XK \quad {}_{я} HCi\ (qCi\ ) \quad \frac{1}{2}\ qCi_{я}\ \overline{Ки}, \tag{29}$$

где qCi R ^{1} — заряд i-го конденсатора для i {CL, CT, CB, CA, CCW}. Таким образом,

$$\begin{array}{l} Я\ АК\ АР\ АС \\ ОООО \\ ОООО \\ ОООО \end{array} \quad \begin{array}{l} \frac{Д}{dt}\ q \\ \overline{d\ dt} \\ qC \\ iR \quad iS \end{array} \quad \begin{array}{l} ОООО \\ A_P \quad ОИО \\ A_C \quad БВК \\ A_C \quad ООИ \end{array} \quad \begin{array}{l} \varphi \\ УК \\ ты \\ нас \end{array} \quad O, \tag{30}$$

где I и O — единичная и нулевая матрицы соответствующего размера соответственно, q 0, а φ — потенциал узла. Разлагающее уравнение (30) дает

$$\frac{Д}{\text{переменный ток}} qC + AR(A \quad R\varphi) + AS\ iS \quad 0, \tag{31}$$

$$A_C\ \varphi + uC \quad 0, \tag{32}$$

$$A_S\ \varphi + uS \quad 0. \tag{33}$$

Структура Дирака задается набором со следующими атрибутами для (D,L, R):

$$\left(\frac{Д}{дт}\ q, \quad \frac{Д}{dt}\ qC, \quad iR, \quad iS, \varphi, uC, uR, uS) \quad D, (q, qC, \varphi, uC) \quad L, \tag{34}$$

$$(\quad iR, eR) \quad R. \tag{35}$$

(36)

Machine Translated by Google

5. Определение топологии модели

сети 11. (Направленный граф) [27]: Ориентированный граф G обозначает пару (V,A), где V(D) и A(D) обозначают множество вершин и дуг соответственно. Дуга — это отдельная упорядоченная пара вершин.

Ориентированный граф модели аппарата искусственной вентиляции легких состоит из непересекающегося объединения вершин, связанных с пациентом, а также ветвей вдоха и выдоха аппарата искусственной вентиляции легких, которые обозначаются vO, VI и VE соответственно. Аналогично, дуги пациента, вдоха и выдоха обозначаются aO, AI и AE соответственно. Каждую дугу и вершину можно дополнительно разделить на те, которые связаны с нагнетателями, клапанами, трубами и электрическими цепями, присутствующими в аппарате искусственной вентиляции легких. Таким образом, совокупность вершин и дуг определяется выражением

V(D) {vO} VI VE {vO} (VIb VIv VIp VIe) (VEb VEv VEp VEe)

и

A(D) {aO} AI AE {aO} (AIb AIv AIp AIe) (AEb AEv AEp AEe),

соответственно, где индексы i {O, p, b, v, p,e} используются для обозначения пациента, вентиляторов, клапанов, труб и компонентов электрической цепи соответственно.

Упрощенная схема аппарата искусственной вентиляции легких, показанного на рисунке 2 , приведена на рисунке 8. На этом упрощенном графике указаны элементы, принадлежащие пациенту, а также дуги и вершины вдоха, принадлежащие аппарату искусственной вентиляции легких. Дуги, принадлежащие пациенту, обозначаются AO21 AO, а вершины — {VO1 ,VO2 } VO. Элементы дуг и вершин вдоха и выдоха, заданные VI ,VE и AIO,AOE соответственно. Более подробное представление графика ИВЛ на рисунке 8 приведено на рисунке 9.

На рисунке 9 показан подробный график аппарата искусственной вентиляции легких, представленный на рисунке 2 , на котором обозначена вершина VO пациента , а также дуги и вершины вдоль пути вдоха, заданные формулой

AI {AIV12 , AIV23 , AIV3B , AIV23 , AIBV4 , AIV4S1 , AIBV5 , AIV5S2 }

и

VI {VIV1 ,VIV2 ,VIV3 ,VIB ,VIV4 ,VIS1 ,VIV5 ,VIS2 },

соответственно, а также дуги и вершины на пути выдоха, определяемые выражением

AE {AOEV1 , AEV12 , AEV23} и VE {VEV1 , VEV2 , VEV3 },

соответственно.

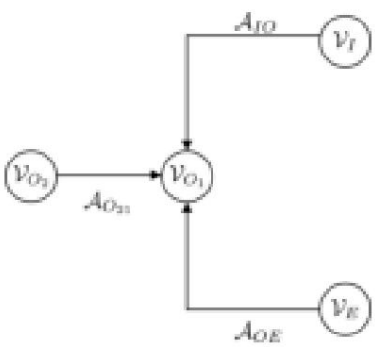


Рисунок 8. Упрощенный граф аппарата искусственной вентиляции легких, представленный на рисунке 2 , с указанием элементов , принадлежащих пациенту, заданных дугами AO21 AO и вершинами {VO1 ,VO2 } VO, а также элементами дуг и вершин вдоха и выдоха , заданный VI ,VE и AIO, AOE соответственно.

Machine Translated by Google

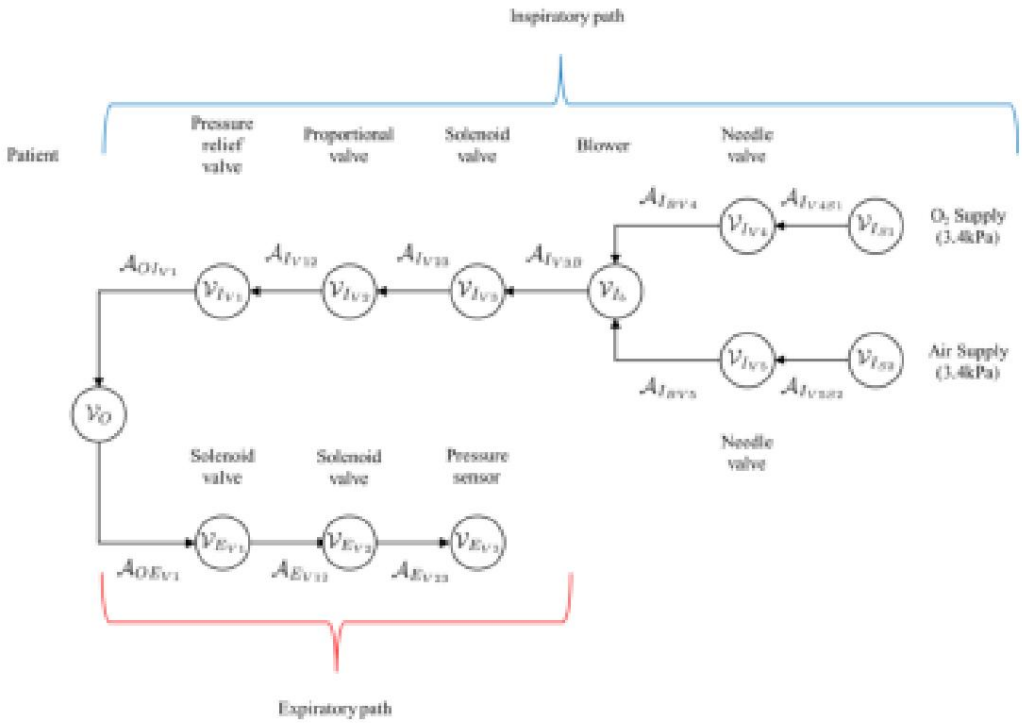


Рисунок 9. Подробный график аппарата искусственной вентиляции легких, представленный на рисунке 8 , с указанием вершины VO пациента , а также дуг и вершин вдоль путей вдоха и выдоха.

6. Условия соединения модели/связи В этом

разделе приведены условия связи сетевой модели Порта-Гамильтона механического вентилятора. Типы взаимосвязей, встречающихся в этой модели, приведены

ниже: 1. Соединение насос-труба: давление и расход жидкости на выходе из насоса, Pb и Qb соответственно, равны давлению и расходу на входе. трубы , заданные p(0) и m(0) соответственно. Таким образом,

Pb p0 и Qb m(0).

2. Соединение трубы с клапаном. Давление и скорость потока жидкости, входящей/выходящей из клапана, Pv и Qv соответственно, равны давлению и скорости потока на входе / выходе трубы, определяемым выражением p(0) и m(0) для входа и p(ℓ) и m(ℓ) для выхода. Таким образом,

Pv p(0) и Qv m(0) на входе,

и

Pv p(ℓ) и Qv m(ℓ) на выходе.

3. Соединение труб с контурами. Давление и расход жидкости на выходе из трубы могут выступать в качестве входных данных для модели контура; таким образом,

p(ℓ) vcin и m(ℓ) icin .

С другой стороны, выходное напряжение и ток цепи могут быть связаны с трубкой для жидкости на входе в трубу. В этом случае выходное напряжение и/или ток

Machine Translated by Google

контура должно быть равно входному давлению и расходу на входе соответственно.
Это соотношение может быть выражено математически как:

vcout p(0) и icout m(0) на входе.

Гамильтониан полной системы определяется суммой гамильтонианов отдельных систем:

$$H = Hb + Hs + Hp + HC. \quad (37)$$

Скорость изменения энергии всей системы равна

$$\begin{aligned} H^{\cdot} = {} & P^{\cdot}\, b(\ z\, p(0) + Fp) + Q^{\cdot}\, b(\ zm(0) + Mp) \\ & + P^{\cdot}_{\text{вин}}(\ z\, p(0) + Fvin\ ) + Q^{\cdot}_{\text{вин}}(\ zm(0) + Mvin\ ) \\ & + P^{\cdot}\, vout(\ z\, p(\ell) + Fvout) + Q^{\cdot}\, vout(\ zm(\ell) + Mvout) \\ & + P^{\cdot}\, vout(\ z\, p(\ell) + Fvout) + Q^{\cdot}\, vout(\ zm(\ell) + Mvout) \\ & + H^{\cdot}\, b + H^{\cdot}_{c} + H^{\cdot}_{\text{в.}} \end{aligned} \quad (38)$$

Термины Fp, Mp, Fvin , Mvin , Fvout и Mvout обозначают внешнее давление и скорость потока, действующие на систему. Для завершения соединения они должны быть равны нулю.

7. Дискретизация, сохраняющая структуру.

Модель трубы Порта – Гамильтона представляет собой уравнение в частных производных, непрерывное в пространстве. По этой причине сложно смоделировать динамику участка трубы. Для этого необходимо аппроксимировать модель дискретной моделью: в данном случае конечно-разностной моделью, которая является аппроксимацией исходной системы. В контексте систем Порта – Гамильтона дополнительным требованием является необходимость гарантировать, что дискретное приближение сохраняет структурные свойства исходной системы: например, косую симметрию и т. д.

Каждое состояние системы можно заменить дискретной аппроксимацией, состоящей из совокупности на n элементах, как показано на рисунке 10. Таким образом, ϱ ϱd [ϱ1, ϱ2, , ϱn] R и m $^{n\times 1}$, md [m1, m2, , mn] R является $^{n\times 1}$. Таким образом, вектор состояния χp можно заменить на дискретной аппроксимацией χd [ϱ1, , ϱn, m1, , mn] R ϱi , mi R $^{2n\times 1}$. i -й элемент $^{1\times 1}$ находится в точке z { (i 1), (i 1/2)}, где — фиксированный дискретный размер шага между точками и i 1, 2, , n. Кроме того, усилия на границах определяются δχ0H0 и δχnHn. Таким образом, гамильтониан, заданный в уравнении (20), может быть аппроксимирован дискретной аппроксимацией, такой что Hp χp Hd χd , так что усилие дискретной системы теперь равно δχd (Hd). Конечно-разностная аппроксимация пространственных производных в i-й точке:

$$\frac{\partial}{\partial z}\varrho(t,z)_{i} \approx \frac{1}{\Delta}(\varrho(t,z_{i+0,5}) - \varrho(t,z_{i-0,5})) \text{ и } \frac{\partial}{\partial z}m(\tau,z)_{i} \approx \frac{1}{\Delta}(m(t,z_{i+1}) - m(t,z_{i})). \quad (39)$$

Центрально-разностная аппроксимация в i-й точке равна

$$\dot{\chi}_{i} \approx \frac{1}{\Delta}([\delta m H_{i+1} - \delta m H_{i}] \quad [\delta \varrho H_{i+1} - \delta \varrho H_{i}]). \quad (40)$$

В матричной форме это

$$\dot{\chi}_{d} \approx \frac{1}{\Delta}\begin{bmatrix} 0 & -1 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \delta m H_{\chi_d} \quad (41)$$

Machine Translated by Google

и

$$\text{tmd} \quad \text{—} \quad \delta\rho H \ \chi d \ + \text{—} \quad \delta\rho H \ \chi 0 \ , \tag{42}$$

который можно переписать как

$$\text{tρd} \quad D\delta mH \ \chi d \ + G\rho\delta mH \ \chi 0 \quad \text{и} \quad \text{tmd} \quad D \quad \delta\rho H \ \chi d \ + Gm\delta\rho H \ \chi n \ , \tag{43}$$

где

$$\text{Д} \quad \text{—} \quad 1\text{-}1 \quad , \quad \text{Гу} \quad \text{—} \quad 1 \quad \text{—} \quad 0 \quad \text{и Gm} \ .$$

Кососимметричный оператор очевиден из уравнения (43).

$$[\ \text{tρd}\ ] \quad [\text{DδρH D}\ \chi d] \quad \delta m H\ [\ G\chi 0 h\ ][\ \delta\rho\text{Гу}\ \chi 0 \quad \delta mH \ \chi n \ ]. \tag{44}$$

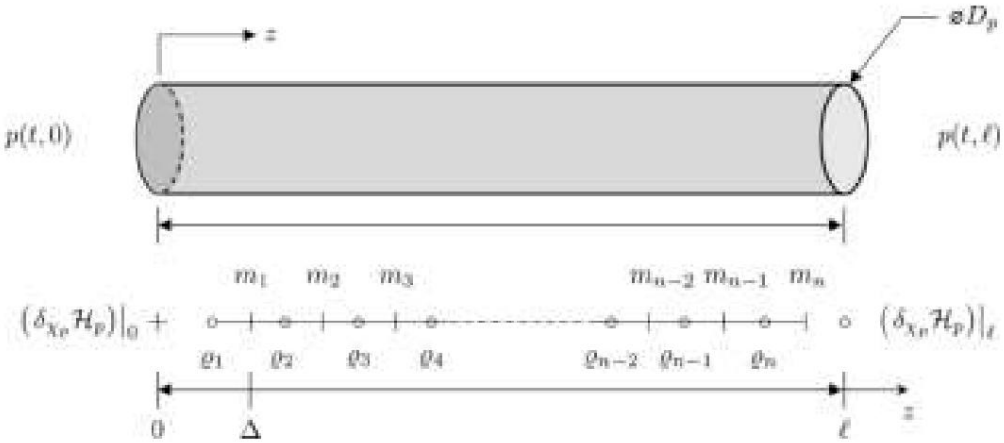


Рисунок 10. Дискретизация шахматной сетки одномерной динамической модели трубы Порта – Гамильтона.

8. Результаты и обсуждение.

Параметры модели трубы и электромагнитного клапана, использованные в данной работе, приведены в таблице 1. и таблица 2 соответственно. Параметры модели контура легких приведены в таблице 3.

Таблица 1. Значения параметров модели трубы.

Параметр	Описание	Ценить	Единицы
Ап	Площадь поперечного сечения трубы	3,8013 × 10–4	2 м
Дп	Диаметр трубы	2,2 × 10–3	м
ℓ	Длина трубы	1,5 × 10–1	м

Machine Translated by Google

Таблица 2. Значения параметров модели соленоида [28].

Параметр	Описание	Ценить	Единицы
Ае	Эффективная площадь поперечного сечения	8 × 10 5 м	2
As1	Площадь поверхности шпули	2,657 × 10 3 м	2
As2	Площадь поверхности шпули	3,525 × 10 3 м	2
As3	Площадь поверхности шпули	5,586 × 10 3 м	2
As4	Площадь поверхности шпули	5,586 × 10 3 м	2
бс	Коэффициент вязкостного демпфирования	2 × 10 1 Нс м	1
г	Ускорение из-за силы тяжести	9,81	м с 2
кс	Жесткость пружины	1 × 10 4 Н м	1
лк	Длина части магнитопровода внутри сердечника	1,15 × 10 2 м	
РС	Масса шпули	2,7 × 10–1	кг
Н	Количество витков в катушке	1250	поворачивается
qstot	Общий воздушный зазор	3,3 × 10 4 м	
qs0	Предварительное напряжение весной	1,1 × 10 3 м	
рупий	Сопротивление катушки	13	Ом
мк0	Воздухопроницаемость	4π × 10 7 Н А	2
мкц	Проницаемость магнитопровода	4,8π × 10 5 Н А	2

Таблица 3. Значения параметров модели легочного контура [26].

Параметр	Описание	Ценить	Единицы
РМЛ	Сопротивление изо рта в гортань	1,021	смН2О с л 1
РЛТ	Сопротивление от гортани до трахеи	3,369 × 10 1 смН2О с л	1
RTB	Сопротивление от трахеи к бронхам	3,063 × 10 1 смН2О с л	1
РБА	Сопротивление от бронхов к альвеолам	8,17 × 10 2 смН2О с л	1
КЛ	Податливость гортани	1,27 × 10–3 л/смН2О	
конвектирует	Податливость трахеи	2,38 × 10–3 л/смН2О	
КБ	Податливость бронхов	1,31 × 10 2 л/смН2О	
Калифорния	Податливость альвеол	2 × 10 1 л/смН2О	
КОО	Податливость грудной стенки	2,445 × 10–1 л/смН2О	

8.1. Проверка модели

Модель была проверена с использованием параметров, полученных из литературы. Результаты моделирования , представленные в разделе «Результаты и обсуждение», оказались сопоставимы с те, что есть в существующей литературе.

8.2. Среда моделирования

Моделирование проводилось с использованием MATLAB версии: 9.13.0.2193358 (R2022b). Обновление. 5 на процессоре Intel Core i5 с четырьмя ядрами и 8 ГБ оперативной памяти. На рисунках 11 и 12 показано Кривые вентиляции легкого при двух состояниях: частично поврежденное легкое с растяжимость и резистентность 20 мл/смН2О и 20 смН2О-с/л соответственно, а легкое при полном повреждении, которое проявляется податливостью легких и резистентностью 10 мл/смН2О и 50 смН2О-с/л соответственно. Кривые вентиляции остаются прежними. синусоидальное поведение. Для исследования случая повреждения легких минимальные значения вентиляции достигается поток с течением времени и объем воздуха. В поврежденном легком податливость и сопротивление легких увеличивает давление.

Machine Translated by Google

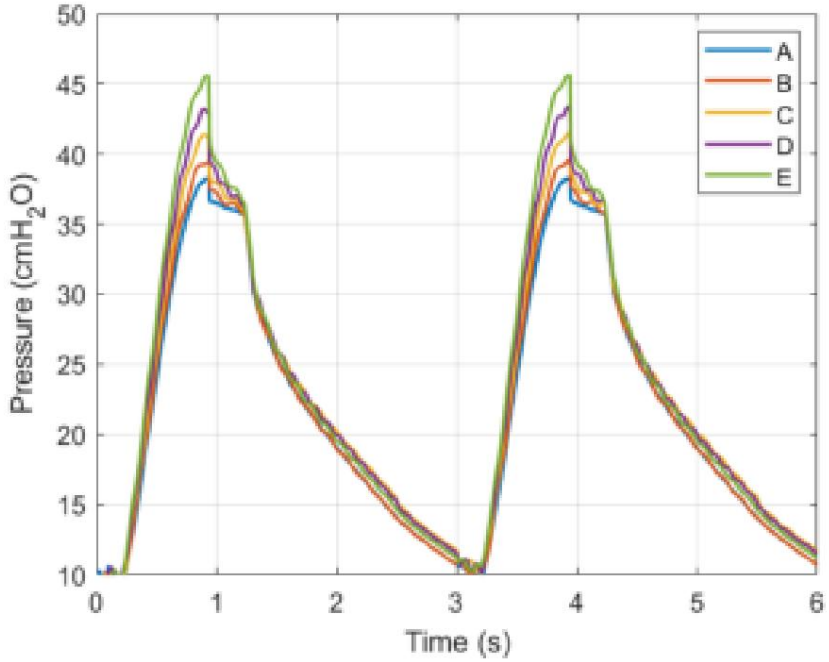


Рисунок 11. График зависимости давления воздуха от времени.

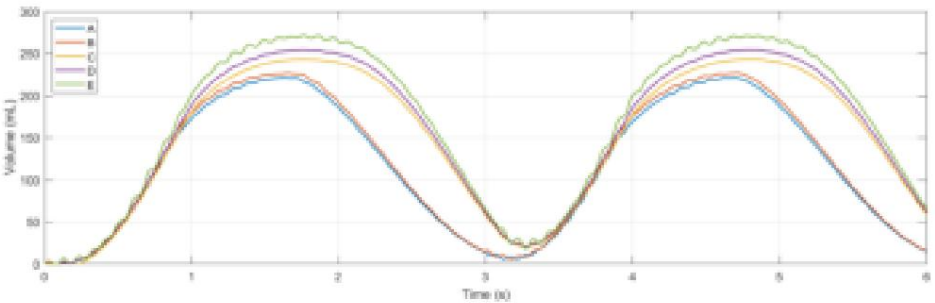


Рисунок 12. График объемного расхода в зависимости от времени.

9. Выводы и рекомендации

В этой исследовательской работе мы разрабатываем подробный механический вентилятор в порту. Гамильтонов каркас. За этим следует модель Порта-Гамильтона дыхательной системы. системы, и после этого эти две системы интегрируются. Проведенная работа демонстрирует что подход Порта-Гамильтона является действенным методом моделирования интегрированного аппарат искусственной вентиляции легких – дыхательная система человека. Структура Порта – Гамильтона модульный характер. Кроме того, полная структура модели основана на базовом графике аппарата искусственной вентиляции легких и дыхательной системы человека. Будущие исследования направления включают в себя:

- Разработка программной среды для автоматического создания порт-гамильтониана. динамика различных конфигураций аппаратов искусственной вентиляции легких и дыхательной системы человека, а также связанных с ними интегрированных моделей [19];
- Разработка различных моделей пониженного порядка;
- Разработка интегрированной структуры для моделирования аппаратов искусственной вентиляции легких/ дыхательных систем человека для обеспечения контроля и оптимизации системы [19,20];
- Использование преимуществ модульной и теоретико-графовой природы Порта – Гамильтона. подход к включению машинного обучения и искусственного интеллекта [19];
- Исследование наиболее подходящих вариантов дискретизации, сохраняющей структуру, и уменьшения порядка модели для различных приложений, управляемых данными, и проектов систем управления.

Machine Translated by Google

Вклад авторов: Концептуализация, MCIM; методология, MCIM; программное обеспечение, MCIM; валидация , MCIM и JEDE; формальный анализ, MCIM; расследование, MCIM; ресурсы, MCIM; курирование данных, MCIM; письмо — подготовка первоначального проекта, MCIM; написание-обзор и редактирование, MCIM; визуализация, MCIM; надзор, ОТЦН; администрация проекта, MCIM; приобретение финансирования , MCIM. Все авторы прочитали и согласились с опубликованной версией рукописи.

Финансирование: Я хотел бы поблагодарить Школу горного дела, факультет инженерии и искусственной среды Университета Витватерсранда за финансовую поддержку публикации этой работы.

Заявление Институционального наблюдательного совета: Этическая экспертиза и одобрение этого исследования были отменены, поскольку в исследовании не участвовали люди или животные.

Заявление о доступности данных: оригинальные материалы, представленные в исследовании, включены в статью, дальнейшие запросы можно направить соответствующему автору.

Конфликты интересов: Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Ссылки

1. Рубио, Дж.; Рохас, К.; Санчес, М.; Гомес-Альзате, Д.; Кордова, М.; Монтойя, В.; Кастанеда, Б.; Чанг, Дж.; Перес-Буитраго, С. COVOX: Обеспечение кислородом во время чрезвычайной ситуации в области здравоохранения, вызванной COVID-19. Аппаратное обеспечениеX 2023, 13, e00383. [Перекрестная ссылка]
2. Хиклинг, К.Г. Кривая давление-объем сильно изменяется в результате набора персонала. Являюсь. Дж. Респир. Крит. Уход Мед. 1998, 158, 194–202. [Перекрестная ссылка]
3. Бейтс, JHT «Механика легких: подход обратного моделирования»; Издательство Кембриджского университета: Кембридж, Великобритания, 2009 г.
4. Мори Б. Дыхательная система в уравнениях, 1-е изд.; MS&A — моделирование, симуляция и приложения; Спрингер: Милан, Италия, 2013 г. [Перекрестная ссылка]
5. Берроуз, К.С.; Хантер, ПиДжей; Тавай, М.Х. Анатомически обоснованные модели конечных элементов легочных артерий и вен человека, включая дополнительные сосуды. Дж. Прил. Физиол. 2005, 99, 731–738. [Перекрестная ссылка]
6. Тавай, Миннесота; Бейтс, JHT Многомасштабное моделирование легких. Дж. Прил. Физиол. 2011, 110, 1466–1472. [Перекрестная ссылка] 7. Бергер, Л.; Бордас, Р.; Берроуз, К.; Брайтлинг, К.; Хартли, Р.; Кей, Д. Понимание взаимозависимости между деформацией паренхимы и вентиляцией при обструктивной болезни легких. В Б30. Динамика сужения дыхательных путей при астме: все еще непонята? Американское торакальное общество: Нью-Йорк, штат Нью-Йорк, США, 2014 г.; Том 189, с. A2677.
8. Рот, СЈ; Ёшихара, Л.; Исмаил, М.; Уолл, В.А. Вычислительное моделирование дыхательной системы: обсуждение подходов к совместному моделированию и двух недавних расширений. Вычислить. Методы Прикл. Мех. англ. 2017, 314, 473–493. [Перекрестная ссылка]
9. Тран, А.С.; Тин Нго, штаб-квартира; Донг, В.К.; Во, А.Х. Проектирование, управление, моделирование и моделирование аппарата искусственной вентиляции легких для Дыхательная поддержка. Математика. Пробл. англ. 2021, 2021, 2499804. [CrossRef]
10. Эль-Хадж А.; Кезран, М.; Ахмад, Х.; Амер, Х.; Бин Абд Рахим, СЗ; Юнси, А.; Абу-Зинада, Х. Проектирование и моделирование механические вентиляторы. Фракталы солитонов хаоса 2021, 150, 111169. [CrossRef]
11. Тарион Дж.; Капил, С.; Мутху, Н.; Тарион, Дж.; Субрамани, К. Быстропроизводимый аппарат искусственной вентиляции легких для неотложной помощи при респираторных заболеваниях. Болезнь КОВИД-19. Пер. Индийский натл. акад. англ. 2020, 5, 373–378. [Перекрестная ссылка]
12. Пивик, В.Дж.; Клейтон, генеральный менеджер; Джонс, ГФ; Натарадж, К. Динамическое моделирование недорогого аппарата искусственной вентиляции легких. IFAC-PapersOnLine 2022, 55, 81–85. [Перекрестная ссылка]
13. Аль-Наггар, Н. Моделирование и моделирование системы механической вентиляции с регулируемым давлением. Дж. Биомед. наук. англ. 2015, 8, 707–716. [Перекрестная ссылка]
14. Ши, Ю.; Рен, С.; Кай, М.; Сюй, В. Моделирование и моделирование системы механической вентиляции с регулируемым объемом. Математика. Пробл. англ. 2014, 2014, 271053. [CrossRef]
15. Ан-Наггар, Северная Каролина; Аль-Хетари, НУ; Аль-Аквва, ФМ. Моделирование математической модели легких и механической вентиляции. Дж. Наук. Технол. 2016, 21, 1–9. [Перекрестная ссылка]
16. Гири Дж.; Кширсагар, Н.; Ванджари, А. Проектирование и моделирование недорогого аппарата искусственной вентиляции легких на основе искусственного интеллекта: подход. Матер. Сегодня Проц. 2021, 47, 5886–5891. [Перекрестная ссылка]
17. Хэннон, Д.М.; Мистри, С.; Дас, А.; Саффаран, С.; Лаффи, Дж. Г.; Брук, бакалавр наук; Хардман, Дж.Г.; Бейтс, генеральный директор по механическому моделированию Вентиляция In Silico: потенциал и подводные камни. Семин. Дыхание. Крит. Уход Мед. 2022, 43, 335–345. [Перекрестная ссылка]
18. Мехеди, И.М.; Шах, Х.С.; Аль-Саггаф, UM; Мансури, Р.; Беттаеб, М. Нечеткое ПИД-регулирование дыхательных систем. Дж. Здоровьес. англ. 2021, 2021, 1926711. [CrossRef]
19. Мерманн, В.; Унгер, Б. Управление порт-гамильтоновыми дифференциально-алгебраическими системами и приложениями. Акта Нумер. 2023, 32, 395–515. [Перекрестная ссылка]
20. Ван дер Шафт, А. Порт-гамильтонианское моделирование управления. Анну. Преподобный управляющий робот. Автон. Сист. 2020, 3, 393–416. [Перекрестная ссылка]
21. Виллегас, Дж. А. Порт-гамильтоновский подход к системам с распределенными параметрами. доктор философии Диссертация, кафедра прикладной математики, Факультет EWI, Университет Твенте, Энсхеде, Нидерланды, 2007 г.
22. Ле Горрек, Ю.; Цварт, Х.; Машке, Б. Структуры Дирака и граничные системы управления, связанные с кососимметричным дифференциалом Операторы. СИАМ Дж. Оптимальное управление. 2005, 44, 1864–1892. [Перекрестная ссылка]

Machine Translated by Google

23. ван дер Шафт, Эй Джей; Машке, Б. М. Гамильтонова формулировка систем с распределенными параметрами и граничным потоком энергии.
Дж. Геом. Физ. 2002, 42, 166–194. [Перекрестная ссылка]
24. Андерсон Дж. Вычислительная гидродинамика: основы с приложениями; McGraw-Hill International Editions: Механика
Инженерное дело; McGraw-Hill Inc.: Нью-Йорк, штат Нью-Йорк, США, 1995 г.
25. Каминский З. Упрощенная модель с сосредоточенными параметрами для пневматических трубок. Математика. Вычислить. Модель. Дин. Сист. 2017, 23, 523–535.
[Перекрестная ссылка]
26. Альбанезе, А.; Ченг, Л.; Урсино, М.; Чбат, Н.З. Комплексная математическая модель сердечно-легочной системы человека:
Разработка модели. Являюсь. J. Physiol.-Heart Circ. Физиол. 2016, 310, H899–H921. [Перекрестная ссылка] [ПабМед]
27. Бонди, Дж.А.; Мурти, Теория графов USR с приложениями; The Macmillan Press Ltd.: Лондон, Великобритания, 1976.
28. Тагизаде, М.; Гаффари, А.; Наджафи, Ф. Моделирование и идентификация электромагнитного клапана для приложений ШИМ-управления. Соревнуется
Rendus Mécanique 2009, 337, 131–140. [Перекрестная ссылка]

Отказ от ответственности/Примечание издателя: Заявления, мнения и данные, содержащиеся во всех публикациях, принадлежат исключительно отдельному автору(ам) и соавторам(ам), а не MDPI и/или редактору(ам). MDPI и/или редактор(ы) не несут ответственности за любой вред людям или имуществу, возникший в результате любых идей, методов, инструкций или продуктов, упомянутых в контенте.

Machine Translated by Google

вычисление

MDPI

Статья

Эффект пропорционального, пропорционально-интегрального и Пропорционально-интегрально-производные регуляторы по улучшению Проявление крутильных колебаний динамической системы.

Халид Аллухидан [1], Ашраф Таха Эль-Сайед [2*] и Фатма Таха Эль-Бахрави [2]

[1] Факультет машиностроения, Инженерный колледж, Университет короля Сауда, почтовый ящик 800, Эр-Рияд 11421, Саудовская Аравия; kalluhydan@ksu.edu.sa

[2] Департамент фундаментальных наук, Современная академия инженерии и технологий, Эльмокаттам 11439, Египет; fatma.taha@eng.modern-academy.edu.eg * Адрес для переписки: atelsayed@eng.modern-academy.edu.eg

Аннотация: Основная цель данного исследования — снизить высокую вибрацию, которую вызывает модель, с помощью соответствующего контроля вибрации. Таким образом, мы начинаем с реализации различных типов контроллеров, чтобы исследовать их влияние на реакцию системы и оценивать результаты каждого элемента управления.
Типы регуляторов представлены как пропорциональные (П), пропорционально-интегральные (ПИ) и пропорционально-интегрально-дифференциальные (ПИД) регуляторы. Мы использовали ПИД-регулятор для регулирования крутильных колебаний в динамической системе. ПИД-регулятор призван повысить стабильность системы после наблюдения за влиянием П- и ПИ-регулирования. Такой контроль гарантирует отсутствие нестабильных компонентов в системе. Используя метод множественных возмущений временного масштаба (MTSP), было получено приближенное решение первого порядка. Используя подход функции частотной характеристики, стабильность и установившийся отклик системы в сценарии первичного резонанса (Ω1 = ω1 , Ω2 = ω2) рассматриваются как наихудший резонанс и рассматриваются. Дополнительно исследуются хаотический отклик нелинейной динамической системы и численное решение для различных значений параметров. Программы MATLAB используются для достижения результатов моделирования.

Ключевые слова: МСПТ; П; ПИ; ПИД-регуляторы; нелинейные дифференциальные уравнения; активный контроль; стабильность; крутильная вибрация

check for updates

Цитирование: Аллухидан, К.; Эль-Сайед, АТ; Эль-Бахрави, Ф.Т. Влияние пропорциональных, пропорционально-интегральных и пропорционально-интегрально-производных регуляторов на улучшение Характеристики крутильных колебаний в динамической системе. Расчет 2024, 12, 157. https://doi.org/10.3390/computation12080157 .

Академический редактор: Чатура Ванигасекара

Поступила: 15 июля 2024 г.
Пересмотрено: 24 июля 2024 г.
Принято: 29 июля 2024 г.
Опубликовано: 3 августа 2024 г.

Копирайт: © 2024 авторов. Лицензиат MDPI, Базель, Швейцария. Эта статья находится в открытом доступе. распространяется на условиях и условия Creative Commons Лицензия с указанием авторства (CC BY) (https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

1. Введение

Крутильная вибрация в той или иной форме встречается во всех вращающихся машинах. Даже когда вибрация приближается к разрушительной амплитуде, бывают ситуации, когда ее невозможно выявить без специального оборудования для мониторинга. После замены изгибной жесткости вала и диаметрального момента инерции на крутильную жесткость и полярный момент инерции соответственно многие элементы крутильных колебаний эквивалентны вибрации вала. Когда что-то является посредником между вибрацией и землей или когда зубья шестерни или соединительные кулачки пусты, крутильную вибрацию можно обнаружить по уровню шума и вибрации (ощутимой на ощупь). Крутильная вибрация может взаимодействовать с землей через зубчатые передачи, используемые для изменения скорости систем передачи мощности; в поршневых машинах путь к земле обеспечивается скользящими кривошипными механизмами, имеющимися в двигателях и компрессорах. Обычно крутильная вибрация проявляется как сложный вибрационный сигнал с многочисленными частотными составляющими. Некоторые системы испытывают кратковременные крутильные вибрации из-за ударов при внезапном запуске и разгрузки зубьев шестерен; Системы синхронных электродвигателей также могут испытывать крутильны

Обычные ПИД-регуляторы получили широкое распространение во многих промышленных приложениях благодаря простоте конструкции, доступной цене, простоте обслуживания и наличию готовых модулей [1–3]. Ссылка. [4] предлагает реализацию нелинейного управления в зависимости от состояния (SDP-PID+) с использованием модели передаточной функции SDP, типа

Machine Translated by Google

нелинейного описания динамических структур. Точная настройка традиционного ПИД-регулирования проблематична из-за специфических свойств многочисленных процедур, включая задержки времени двоичной выборки, большую длительность, модели TF высшего порядка и нелинейности [5–7]. Сайед и др. [8] разработали нелинейный устойчивый подход ПИД-управления SDP для дискретной передаточной функции с нелинейными свойствами. В этом исследовании особое внимание уделялось надежным процессам реагирования, для которых были специально разработаны надежные методы PID и SDP-PID. Дано и Жюльер [9] изучали, как приводы MFC управляют колебаниями в композитной конструкции. Кумар и Рэй [10] исследовали вибрации в многослойных оболочках с использованием от одного до трех пьезоэлектрических композитов и методов послойного демпфирования. Регулятор ПД предназначен для уменьшения колебаний подвешенного ротора Джеффкотта через две пары полюсов [11]. Контроллер PD может эффективно ослаблять установившиеся амплитудные колебания балочной системы [Эйсса и др. [13,14] предложили ПД-регулятор и ПД-регулятор с задержкой по времени для уменьшения вибраций магнитных систем с кубическими и квадратичными нелинейными коэффициентами под действием параметрических главных сил. Бауоми и Эль-Сайед использовали контроллер частичного разряда для управления поведением ламинированной оболочки из MFC. Целью использования контроллера PD является повышение стабильности системы за счет увеличения контроля, поскольку он может прогнозировать будущие ошибки в реакции системы [15]. Более 90% отраслей промышленности до сих пор используют ПИД- регуляторы из-за их простоты, функциональности и удобства использования [16]. Коэффициент усиления ПИД-регулятора достигается путем согласования частотной характеристики системы управлен Недавно был использован системный подход к выбору параметров ФИД для нелинейных неопределенных структур [18]. ПИД-регуляторы предлагают преимущества перед пассивными подходами к управлению полуактивными системами подвески [19–21]. Ссылка. [22] исследует управление полуактивной системой подвески четверти автомобиля с использованием ПИД-регулятора. Типичный ПИД-регулятор построен с использованием подхода Циглера-Николса и используется для регулирования системы подвески. Крутильные колебания одностепенной нелинейной динамической конструкции регулируются активным управлением [23]. Вэньчжи и Чжиюн [24] предложили активное управление для уменьшения крутильных колебаний в большом турбогенераторе с валом ротора. Управление с обратной связью по всему состоянию с использованием линейно-квадратичного регулятора (LQR) эффективно снижает энергию крутильных колебаний и реакцию в системе вала турбогенератора. Эль-Сайеду и Бауоми [25] удалось снизить крутильные колебания нелинейной динамической системы с помощью пассивных и активных методов управления. В исследовании [26] предлагается адаптивный подход PI-управления, запускаемый событиями, для нелинейных систем MIMO с непредсказуемой задержкой на входе. Стратегия адаптивного пропорционально-пропорционально-интегрального (P/PI) управления предложена для объемного реактора парового риформинга метана с солнечным приводом (SVMSR) с пассивным тепловым управлением. Стратегия направлена на стабилизацию компонентов продукта и уменьшение колебаний скорости производства водород Предыдущие исследования, такие как исследования [28–30], продемонстрировали успешное применение метода многомасштабных возмущений для получения приближенных решений для различных колебательных систем. В этих исследованиях часто используются программы MATLAB для анализа и решения проблем вибрации.

Была исследована и получена модель консольной балки для нагружения промежуточной сосредоточенной массы при гармоническом возбуждении. Подавление вибрации можно обеспечить с помощью контроллера IRC+ NSC. Для определения неустойчивых и устойчивых зон для каждой кривой частотной характеристики было проведено численное исследование устойчивости [31]. В данном исследовании исследуется использование нелинейного пружинного маятника для виброконтроля качки судна. Три нелинейных дифференциальных уравнения второго порядка — одно для угла поворота, одно для относительного удлинения пружины-амортизатора и одно для удлинения пружины-амортизатора — составляют математическую модель, описывающую движение корабля с амортизатором. Авторы используют рядное решение, в котором учитываются члены до четвертого порядка по тригонометрическим функциям угла поворота. По мнению авторов, два режима нелинейной пружинно-маятниковой системы можно заставить реагировать на многопараметрические силы возбуждения таким образом, чтобы снизить их максимальные значения на 8,8% и 0,02% [32]. Управление PPF нелинейной структуры GMA описано в [33]. Базовый резонанс и стабильность амплитуды каркаса можно успешно ограничить путе

Machine Translated by Google

были проведены эксперименты для проверки точности полученных результатов. Расследование проиллюстрировал развитие концепции и сравнил ее полезность с более ранними исследованиями. 3D-сюжет улучшается и иллюстрирует правильность работы. Ссылка. [34] предлагают использовать NIPPF. контроллеры для управления нелинейной вибрацией первичного резонанса вращающегося вала вибрация. Среди них сравнение контроллеров FRC под исследование, NIPPF и ANIPPF. Система с двумя степенями свободы, считая квадратичную и кубическую. нелинейности между параметрическими и внешними силами демонстрируют расчетную систему. Несколько шкал соединены между собой для анализа стабильности измеренных значений. структуру и получать аппроксимации решений. Из математического решения каждый резонанс восстановлен. Процесс Рунге-Кутты четвертого порядка используется для оценки работоспособности системы. производительность. В числовых результатах запланированная частота исследуемой конструкции кривые отклика исследуются на наличие влияний, включая значимые коэффициенты [35]. Низкоскоростной синхронный двигатель с высоким крутящим моментом и постоянными магнитами приводит в движение полупрямой привод. система приводно-режущего редуктора комбайна, использующая нелинейное интегральное положительное положение обратная связь (NIPPF) и адаптивная нелинейная интегральная положительная обратная связь по положению (ANIPPF) контроллеры. Используя технику усреднения для решения нелинейных дифференциальных уравнений и моделирование системы с помощью контроллеров дает аналитическое решение в случае первичного и Внутренний резонанс 1:1. Программа MATLAB использовалась для сравнения числовых и аналитические решения для временной истории и FRC с целью проверки их сопоставимости [36].

В этой работе мы использовали ПИД-регулирование для подавления крутильных колебаний после изучения модель на сайте [37]. Система с двумя степенями свободы при многократном возбуждении результаты из этого. Чтобы обеспечить оценочное решение с точностью до приближений первого порядка, MSPT используется повсюду. Используя функции частотной характеристики, стабильность система рассматривается вблизи случая основного резонанса. Несколько предложений по приведены различные параметры системы. Приводятся числовые примеры, показывающие, как активные контроллеры влияют на поведение системы. Показано сравнение между PID управление и дополнительные контроллеры.

2. Математическое моделирование

2.1. Системная динамика без контроля

Этот раздел представлен для иллюстрации исследования динамической системы крутильных колебаний. Динамическая модель в этой работе состоит из двух связанных частей, как показано. на рисунке 1. θ1 и θ2 представляют угловые положения (обобщенные координаты) внутри система. В этой нелинейной динамической системе справедливы следующие положения:

- I1 и I2 представляют моменты инерции полярных масс.
- k1 — линейная жесткость пружины первой детали.
- k2 представляет собой жесткость пружины второй части, которая включает в себя следующее:
  - k21: линейная составляющая.
  - k22: нелинейные квадратичные и кубические компоненты.
- Ф1 и Ф2 обозначаем обобщенные силы возбуждения.

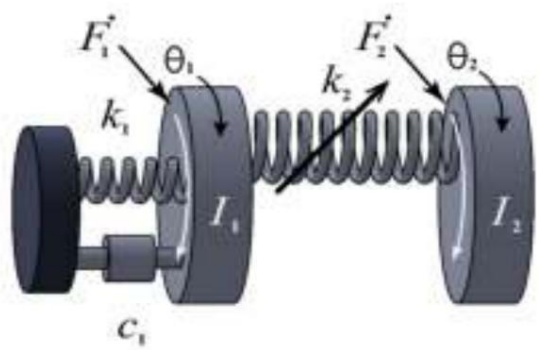


Рисунок 1. Модель принципиальной схемы основной системы.

$$I_1\ddot{\theta}_1 + k_1\theta_1 + k_{21}(\theta_1 - \theta_2) + k_{22}(\theta_1 - \theta_2)^2 + k_{23}(\theta_1 - \theta_2)^3 = \Phi_1,$$

$$I_2\ddot{\theta}_2 + k_{21}(\theta_2 - \theta_1) + k_{22}(\theta_2 - \theta_1)^2 + k_{23}(\theta_2 - \theta_1)^3 = \Phi_2,$$

Machine Translated by Google

Поэтому уравнения движения системы свободного тела, приведенные на рис. 1 , можно построить так же, как и в [25,37]:

$$I1\,\ddot{\theta}1 + k1\theta1 + c1\,\dot{\theta}1 + k21(\theta1 - \theta2) + k22(\theta1 - \theta2)^2 + k23(\theta1 - \theta2)^3 = \Phi 1, \quad (1)$$

$$я2\,\ddot{\theta}2 + k21(\theta2 - \theta1) - k22(\theta1 - \theta2)^2 - k23(\theta1 - \theta2)^3 = \Phi 2, \quad (2)$$

$$\ddot{\theta}1 + \frac{k1}{я1} + \frac{k21}{я1} + \frac{k22}{я1}\,\frac{c1}{\theta1 + \theta1 + \theta2)}\,\dot{(\theta1 - \theta2)} + (\theta1 - \theta2)\,\theta1 + \frac{}{I1} + \frac{k23}{2\,(\theta1 - \theta2) +}\,3 = \frac{\Phi 1^{\bullet}}{я1}, \quad (3)$$

$$\ddot{\theta}1 + \frac{И1\,к1 + к21}{я1} - \frac{c1}{\theta2 + (\theta1 - \theta2)}\,\dot{\theta}1 + \frac{k21}{я1} + \frac{k22\,\theta1 + \theta1}{я1} + \frac{k23}{2\,(\theta1 - \theta2) +}\,3 = \frac{\Phi 1^{\bullet}}{я1}, \quad (4)$$

$$\ddot{(\theta1 - \theta2)} + \frac{k21}{я2} + \frac{k22\,\theta2 + (\theta2 - \theta1)}{я2} - 2\,\frac{k23}{я2}(\theta1 - \theta2)^3 = \frac{\Phi 2^{\bullet}}{я2}, \quad (5)$$

$$\ddot{\theta}1 + \theta0\,\frac{1\,лиц + 21\,лиц}{я1} + \frac{\theta1\,\theta1\,c1 + \theta0}{I1\,\theta0}\,\dot{\theta}1 + \frac{k21\,\theta2\,k22\theta0 + \theta\,2}{я1\,0}\,\frac{(\theta1 - \theta2)^2}{} + \frac{к23\theta\,^2_0}{я1}\,\frac{(\theta1 - \theta2)^3}{\theta\,^3_0} = \frac{\Phi 1^{\bullet}}{я1}, \quad (6)$$

$$\ddot{(\theta1 - \theta2)} + \frac{k21}{I2\,\theta0} + \theta0\,\frac{(\theta2 - \theta1)\,\theta2}{я2\;\theta\,2}\,\frac{k22\theta0}{0}\,(\theta1 - \theta2)^2 - \frac{к23\theta\,^2_0}{я2}\,\frac{(\theta1 - \theta2)^3}{\theta\,^3_0} = \frac{\Phi 2^{\bullet}}{я2}. \quad (7)$$

Теперь мы представим безразмерные формы параметров, используемых в этом анализе.

$$\theta0 \quad \frac{\theta j}{}(j = 1, 2),\ \omega\,\varphi j = \frac{2}{1} = \frac{k1 + k21}{я1}\,\frac{k21\;k22\theta0}{}\,\frac{c1}{я1},\ \zeta = ,\ \beta = ,\ \frac{\alpha1}{я1} = ,\ \alpha2 = \frac{}{я1} \quad \frac{k23\theta\,^2_0}{я1}\,2\,\omega\,2 = \frac{k21}{я2}\,\frac{k22\theta0}{я2},\ \alpha3 = ,$$

$$\alpha4 = \frac{2\,к23\theta\,0}{я2},\ fj\,\sin(\Omega j\,t) = \frac{\Phi\ \bullet}{Дж}.$$

На основании приведенных выше параметров можно получить следующие уравнения движения в безразмерной форме:

$$\ddot{\varphi}1 + \omega\,^2_1\varphi1 + \zeta\,\dot{\varphi}1 - \beta\varphi2 + \alpha1(\varphi1 - \varphi2)^2 + \alpha2(\varphi1 - \varphi2)^3 = f1\,\sin(\Omega1t), \quad (8)$$

$$\ddot{\varphi}2 + \omega\,^2_2(\varphi2 - \varphi1) - \alpha3(\varphi1 - \varphi2)^2 - \alpha4(\varphi1 - \varphi2)^3 = f2\,\sin(\Omega2t). \quad (9)$$

2.2. Системная динамика с ПИД-регулированием

Целью настоящего раздела является предложение ПИД-регуляторов для снижения вредной крутильной вибрации динамической системы в этой работе в одном из наихудших случаев резонанса, как показано на рисунке 2. Кроме того, управление в нашей работе представлено в виде двух цепей управления. силы FC1 и FC2 , возникающие для подавления крутильных колебаний в двух направлениях.

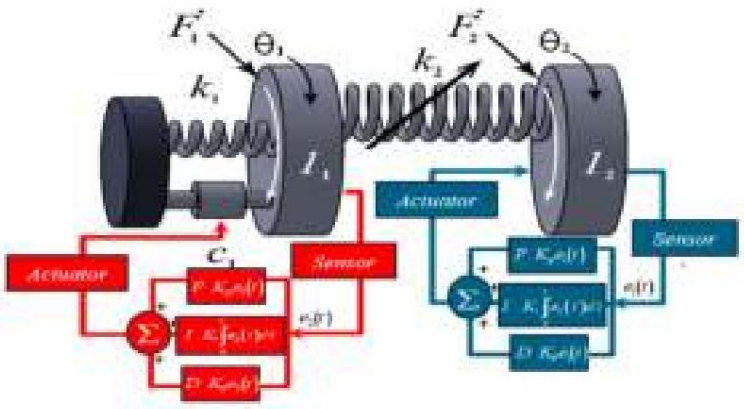


Рисунок 2. Модель принципиальной схемы основной системы с ПИД-регуляторами.

Machine Translated by Google

обратную связь и Kd обозначают коэффициент усиления управления с пропорциональной обратной связью, интегральную Здесь, Kp, Ki , коэффициент усиления управления и коэффициент усиления управления с производной обратной связью соответственно. Кроме того, e1(t) и e2(t) обозначают значение ошибки с нулевой установившейся ошибкой шага.

Уравнения движения с использованием ПИД-регуляторов, связанных с нелинейной динамической системой, как показано на рисунке 2 , можно выразить следующим образом:

$$\ddot{\varphi}1 + \omega_1^2\varphi1 + \varepsilon\zeta\,\dot{\varphi}1 \quad \varepsilon\beta\varphi2 + \varepsilon\alpha1(\varphi1 \quad \varphi2)^2 + \varepsilon\alpha2(\varphi1 \quad \varphi2)^3 = \varepsilon f1\sin(\Omega1t) + \varepsilon FC1\,, \tag{10}$$

$$\ddot{\varphi}2 + \omega_2^2(\varphi2 \quad \varphi1) \quad \varepsilon\alpha3(\varphi1 \quad \varphi2)^2 \quad \varepsilon\alpha4(\varphi1 \quad \varphi2)^3 = \varepsilon f2\sin(\Omega2t) + \varepsilon FC2\,, \tag{11}$$

$$FC1 = \quad Kp\varphi1 \quad Ki\int_0^\tau \varphi1(\tau)d\tau \quad Kd\,\dot{\varphi}1\,, \tag{12a}$$

$$FC2 = \quad Kp\varphi2 \quad Ki\int_0^\tau \varphi2(\tau)d\tau \quad Kd\,\dot{\varphi}2\,, \tag{12б}$$

$$\ddot{\varphi}1 + \omega_2^2\varphi1 \quad \varepsilon\beta\varphi2 + \varepsilon\alpha1(\varphi1 \quad \varphi2) \quad 1\,\varphi1 + \varepsilon\zeta\,\dot{\varphi}1 \quad \varepsilon\alpha2(\varphi1 \quad \varphi2)^2 + \varepsilon\alpha2(\varphi1 \quad \varphi2)^3 = \varepsilon f1\sin(\Omega1t) \quad \varepsilon Kp\varphi1 \quad \varepsilon Ki\int_0^\tau \varphi1(\tau)d\tau \quad \varepsilon Kd\,\dot{\varphi}1\,, \tag{13}$$

$$\ddot{\varphi}2 + \omega_2^2(\varphi2 \quad \varphi1) \quad \varepsilon\alpha3(\varphi1 \quad \varphi2)^2 \quad \varepsilon\alpha4(\varphi1 \quad \varphi2)^3 = \varepsilon f2\sin(\Omega2t) \quad \varepsilon Kp\varphi2 \quad \varepsilon Ki\int_0^\tau \varphi2(\tau)d\tau \quad \varepsilon Kd\,\dot{\varphi}2\,. \tag{14}$$

3. Аналитические исследования

3.1. Анализ возмущений В

этом разделе применяется метод многомасштабных возмущений (MSPT) для получения аппроксимационного решения нелинейной динамической системы с предлагаемым управлением (т. е. ПИД-регулированием), заданным уравнениями (13) и (14). Соответственно, нам удалось найти приближенное решение первого порядка уравнений (13) и (14), предложенное следующим образом [28,29]:

$$\varphi n = \varphi n0 + \varepsilon\varphi n1 + O\,\varepsilon^2\,, (n = 1, 2) \tag{15}$$

где параметр незначительного возмущения ε находится в диапазоне 0 < ε 1. Определим два временных масштаба, T0 и T1, где T0 = t представляет собой быстрый масштаб, а T1 = εt — медленный. Производные времени преобразуются в следующие:

$$\frac{Д}{дт} = \frac{dT0}{}\frac{}{dT1} = D0 + \varepsilon D1 + \ldots, + + \ldots dt \quad T0\,dt \quad T1 \tag{16}$$

$$\frac{2}{д\,дт2} = \frac{Д}{дт}\left(\frac{dT0}{} + dt \quad T0\,\frac{dT1}{dt}\right)\frac{}{T1} + \ldots \quad = Д\,0^2 + 2\varepsilon D0D1 + \ldots. \tag{17}$$

где Dj = (j = 0, 1). Tj Следующая

система обыкновенных дифференциальных уравнений была построена путем подстановки уравнений (15) и (16) в уравнения (13) и (14) и приравнивания коэффициентов при одной и той же степени ε в обеих частях:

O ε 0 :

$$Д + \omega_1^2\,0 \quad 1\,\varphi10 = 0, \tag{18a}$$

$$2\,2\,2\,D + \omega\,2\,\varphi20 = \omega\,2\varphi10.\,0 \tag{18б}$$

O ε 1 :

Machine Translated by Google

$$D^2 + \omega_2^2\,\varphi_{11} = 2D_0D_1\varphi_{10} - \zeta D_0\varphi_{10} + \beta\varphi_{20} - \alpha_1(\varphi_{10} - \varphi_{20})^2 - \alpha_2(\varphi_{10} - \varphi_{20})^3 + f_1\sin(\Omega_1 t) - K_p\varphi_{10} - K_i\int_0^\tau \varphi_{10}(\tau)d\tau - K_dD_0\varphi_{10}, \quad (19a)$$

$$D_0^2 + \omega_2^2\,\varphi_{21} = \omega_2^2\,\varphi_{11} - 2D_0D_1\varphi_{20} + \alpha_3(\varphi_{10} - \varphi_{20})^2 + \alpha_4(\varphi_{10} - \varphi_{20})^3 + f_2\,\text{грех}(\text{Ом}2t) - K_p\varphi_{20} - K_и\int_0^\tau \varphi_{20}(\tau)d\tau - K_dD_0\varphi_{20}. \quad (19б)$$

Приближение нулевого порядка представляет собой общее решение уравнений (18a) и (18b), которое можно выразить следующим образом:

$$\varphi_{10} = A_1(T_1)\exp(i\omega_1 T_0) + \text{cc.}, \quad (20a)$$

$$\varphi_{20} = A_2(T_1)\exp(i\omega_2 T_0) + \Gamma\,A_1(T_1)\exp(i\omega_1 T_0) + \text{cc.} \quad (20б)$$

где cc обозначает комплексное сопряжение предыдущих компонентов, Am — комплекс функция в T1 и $\Gamma = \frac{\omega_2^2}{\omega_2^2 - \omega_1^2}$.

Подставив уравнение (20) в уравнение (19a), получим

$$\begin{aligned} D_0^2 + \omega_2^2\,\varphi_{11} = {} & 2i\omega_1 D_1A_1 - i\omega_1\zeta A_1 + \Gamma\beta A_1 - \alpha_2 6(1-\Gamma)A_1A_2\bar{A}_2 \\ & + 3(1-\Gamma)^2 3A_2\bar{A}_1^2 \exp(i\omega_1 T_0) \\ & - K_p - iK_i\frac{}{\omega_1} + K_д i\omega_1 A_1 \\ & + \alpha_1(1-\Gamma)^2 A_2^2\exp(2i\omega_1 T_0) + \alpha_2(1-\Gamma)^3 A_3^3\exp(3i\omega_1 T_0) + [\beta A_2 \\ & + \alpha_2 3A_2^2\bar{A}_2 + 6(1-\Gamma)^2 A_1A_1\bar{A}_2\exp(i\omega_2 T_0) + \alpha_1 A_1^2\exp(2i\omega_2 T_0) \\ & + \alpha_2 A_2^3\exp(3i\omega_2 T_0) + [2\alpha_1(1-\Gamma)A_1A_2]\exp(i(\omega_1+\omega_2)T_0) \\ & 2\alpha_1(1-\Gamma)A_1A_2\exp(i(\omega_1-\omega_2)T_0) + 3\alpha_2(1-\Gamma)^2 A_2^2 A_1\bar{A}_2\exp(i(2\omega_1+\omega_2)T_0) + \\ & 3\alpha_2(1-\Gamma)^2 A_2^2\bar{A}_1A_2\exp(i(2\omega_1-\omega_2)T_0) + \alpha_1(1-\Gamma)^2\exp(i(\omega_1+2\omega_2)T_0) \\ & 2A_1A_1 + A_2A_2 - iK_i + 3\alpha_2(1-\Gamma)A_1A - if_1\frac{A_1}{2} \\ & + \frac{}{\omega_1}\exp(i\Omega_1 T_0) + \text{cc.}, \end{aligned} \quad (21)$$

Чтобы получить условие разрешимости уравнения (21), член близости частот возбуждения (Ω1) и собственной частоты (ω1) описывается с помощью безразмерного параметра расстройки σ1, как показано ниже:

$$\Omega_1 = \omega_1 + \varepsilon\sigma_1. \quad (22)$$

Подставив уравнение (22) в уравнение (21) и исключив член, приводящий к вековым, мы получаем частное решение первого приближения (φ11) следующим образом :

$$\begin{aligned} \varphi_{11} = {} & M_1\exp(2i\omega_1 T_0) + M_2\exp(3i\omega_1 T_0) + M_3\exp(i\omega_2 T_0) + M_4\exp(2i\omega_2 T_0) \\ & + M_5\exp(3i\omega_2 T_0) + M_6\exp(i(\omega_1+\omega_2)T_0) + M_7\exp(i(\omega_1-\omega_2)T_0), \\ & + M_8\exp(i(2\omega_1+\omega_2)T_0) + M_9\exp(i(2\omega_1-\omega_2)T_0) + M_{10}\exp(i(\omega_1+2\omega_2)T_0) \\ & + M_{11}\exp(i(\omega_1-2\omega_2)T_0) + M_{12} + \text{cc.} \end{aligned} \quad (23)$$

Здесь Mi (i = 1, 2,..., 12) представлено в Приложении A.

Подставив уравнения (20) и (23) в уравнение (19b), получим

Machine Translated by Google

$$\begin{aligned}
&Д2_0 + \omega 2\ 2\ \varphi 21 = 2i\omega 1D1\Gamma\ A1 + \alpha 4\ 3(1 \quad \Gamma\ )\ 3A\ 2\ \overline{1A1} + 6(1 \quad \Gamma\ )A1A2\overline{A2} \\
&Kp \quad i\ K\overline{\omega 1} + i\omega 1Kd\ \Gamma\ A1\ \exp(i\omega 1T0) + \omega 2\ 2M1 + \alpha 3(1 \quad \Gamma\ )\ 2A\ 2 \quad {}_1\ \exp(2i\omega 1T0) \\
&+ \omega 2\ 2M2 + \alpha 4(1 \quad \Gamma\ )\ 3A\ 3 \quad \exp(3i\omega 1T0) + \omega 2\ 2M3 \quad 2i\omega 2D1A2 \\
&Kp \quad я\ K\overline{\omega 2} + i\omega 2Kd\ A2 \quad \alpha 4\ 3A + \overline{2A2} + 6(1 \quad \Gamma\ )\ 2A1A1\overline{A2}\ \exp(i\omega 2T0) \\
&\omega 2\ 2M4 + \alpha 3A\ \exp(2i\omega 2T0) + \omega 2\ 2M5 \quad \alpha 4A + \tfrac{3}{2}\ \exp(3i\omega 2T0) \\
&\omega 2\ 2M6 \quad 2\alpha 3(1 \quad \Gamma\ )A1A2\ \exp(i(\omega 1 + \omega 2)T0) + \omega 2\ 2M7 \quad 2\alpha 3(1 \quad \Gamma\ )\ )A1\overline{A2} \\
&\times \exp(i(\omega 1 \quad \omega 2)T0) + \omega 2\ 2M8 \quad 3\alpha 4(1 \quad \Gamma\ )\ 2A\ 2\ 1A2\ \exp(i(2\omega 1 + \omega 2)T0) + \omega 2 \\
&2M9 \quad 3\alpha 4(1 \quad \Gamma\ )\ 2A\ 2 \quad 1\overline{A2}\ \exp(i(2\omega 1 \quad \omega 2)T0) + \omega 2\ 2M10 + 3\alpha 4(1 \quad \Gamma\ )A1A \quad \tfrac{2}{2} \\
&\times \exp(i(\omega 1 + 2\omega 2)T0) + \omega 2\ 2M11 + 3\alpha 4(1 \quad \Gamma\ )A1A\ 2\ \exp(i(\omega 1 \quad 2\omega 2)T0) \quad i\ f2 + \omega 2\ 2M12 \\
&\alpha 3\ (1 \quad \Gamma\ )\ 2A1A1 + A2\overline{A2} \quad Ki\ i\ \overline{A2} + i\ \Gamma\ \overline{A1}\ \exp(i\Omega 2T0) + cc\overline{\omega 2} \quad \overline{\omega 1} \quad + \overline{\tfrac{+}{2}}
\end{aligned} \tag{24}$$

Чтобы получить второе условие разрешимости уравнения (24), термин близости частот возбуждения (Ω2) и собственной частоты (ω2) описывается с помощью безразмерного параметра расстройки σ2 следующим образом:

$$\Omega 2 = \omega 2 + \varepsilon\sigma 2. \tag{25}$$

Подставив уравнение (25) в уравнение (24) и сократив член, который приводит к вековым, мы получаем частное решение первого приближения (φ21) следующим образом :

$$\begin{aligned}
&\varphi 21 = N1\ \exp(i\omega 1T0) + N2\ \exp(2i\omega 1T0) + N3\ \exp(3i\omega 1T0) + N4\ \exp(2i\omega 2T0) \\
&+N5\ \exp(3i\omega 2T0) + N6\ \exp(i(\omega 1 + \omega 2)T0) + N7\ \exp(i(\omega 1 \quad \omega 2)T0)\ . \\
&+N8\ \exp(i(2\omega 1 + \omega 2)T0) + N9\ \exp(i(2\omega 1 \quad \omega 2)T0) + N10\ \exp(i(\omega 1 + 2\omega 2)T0) \\
&+N11\ \exp(i(\omega 1 \quad 2\omega 2)T0) + N12 + cc.
\end{aligned} \tag{26}$$

Здесь Ni (i = 1, 2,..., 12) представлен в Приложении A.

После подстановки уравнений (22) и (25) в уравнения (21) и (24) и удаления векового члена условия разрешимости можно получить следующим образом:

$$\begin{aligned}
2i\omega 1D1A1 = {} & i\omega 1\zeta + \Gamma\ \beta \quad Kp + i\ Ki\ \overline{\omega 1} \quad Kd\ i\omega 1\ A1 + (\ \ 6\alpha 2(1 \quad \Gamma\ ))A1A2\overline{A2} \\
& + \quad 3\alpha 2(1 \quad \Gamma\ ) \quad i\ f1\ 2 \quad {}^3\ A\ 2\overline{1A1} \\
& + \quad \frac{}{} \quad \exp(i\sigma 1T1)
\end{aligned}, \tag{27a}$$

$$\begin{aligned}
2i\omega 2D1A2 = {} & \Gamma\ \beta \quad Kp + i\ K\overline{i\omega 2} \quad i\omega 2Kd\ A2 + (\ \ 3\Gamma\ \alpha 2 \quad 3\alpha 4)A \quad {}^2\overline{2A2} \\
& +(\ \ 6\Gamma\ \alpha 2 \quad 6\alpha 4)(1 \quad \Gamma\ )\ 2A1\overline{A1}A2 \\
& + \quad \frac{i\ f2}{2} \quad \exp(i\sigma 2T1)
\end{aligned}. \tag{27б}$$

Для получения амплитудно-фазовых уравнений управляемой системы проанализируем решение уравнения (27), заменяя An(T1) полярной формой как

$$Ан = 2 \quad \frac{1}{}\ an(T1)e\ i\gamma n(T1\ )\ (n = 1, 2). \tag{28}$$

Мы получаем основные уравнения амплитуд an и фаз γn , подставляя уравнение (28) в уравнение (27) и затем разделяя действительную и мнимую компоненты.

$$\dot{a}1 = \quad 2\omega 2\ \frac{\zeta}{2\ 1} + \frac{Ki}{} \quad \frac{Kд}{2}\ a1 + \quad \frac{f1}{2\omega 1}\ со з(\psi 1), \tag{29a}$$

Machine Translated by Google

$$\dot{a}_1 = \gamma_1 = -2\omega_1 \frac{\Gamma\beta}{2\omega_1} + \frac{Kp}{2\omega_1} a_1 + \frac{3\alpha_2(1-\Gamma)}{4\omega_1} a_1 a_2^2 + \frac{3\alpha_2(1-\Gamma)}{8\omega_1} a_1^3 + \frac{f_1}{2\omega_1} \text{грех}(\psi_1), \quad (29б)$$

$$\dot{a}_2 = \frac{Ки}{2\omega_2} - \frac{Кд}{2} a_2 + \frac{f_2}{2\omega_2} \text{соз}(\psi_2), \quad (30а)$$

$$\dot{a}_2\gamma_2 = -\frac{\Gamma\beta}{2\omega_2} + \frac{Kp}{2\omega_2} a_2 + \frac{3\Gamma\alpha_2+3\alpha_4}{8\omega_2} a_2^3 + a_1^2 \frac{3\Gamma\alpha_2+3\alpha_4}{4\omega_2} (1-\Gamma) a_1 a_2 + \frac{f_2}{2\omega_2} \text{грех}(\psi_2) \quad (30б)$$

где

$$\psi_1 = \sigma_1 T_1 - \gamma_1, \psi_2 = \sigma_2 T_1 - \gamma_2. \quad (31)$$

Неподвижные точки в уравнениях (29)–(30) соответствуют установившимся решениям системы $\dot{a}_n = 0$ и $\dot{\psi}_n = 0$, которые, в свою очередь, соответствуют $a_n = 0$ и $\gamma_2 = \sigma_2$.

Из уравнения (31) мы указываем, что $\gamma_1 = \sigma_1$ и в результате $a_n = 0$ и $\psi_n = 0$; уравнения частотной характеристики (FRE) практического случая ($a_1 \neq 0$, $a_2 \neq 0$) представлены как

$$0 = -\zeta_2 2\omega_2 - 2\frac{Ки}{2\omega_2} - \frac{Кд}{2} a_1 + \frac{f_1}{2\omega_1} \text{соз}(\psi_1), \quad (32а)$$

$$a_1\sigma_1 = -2\omega_1 \frac{\Gamma\beta}{2\omega_1} + \frac{Kp}{2\omega_1} a_1 + \frac{3\alpha_2(1-\Gamma)}{4\omega_1} a_1 a_2^2 + \frac{3\alpha_2(1-\Gamma)}{8\omega_1} a_1^3 + \frac{f_1}{2\omega_1} \text{грех}(\psi_1), \quad (32б)$$

$$0 = \frac{Ки}{2\omega_2} - \frac{Кд}{2} a_2 + \frac{f_2}{2\omega_2} \text{соз}(\psi_2), \quad (33а)$$

$$a_2\sigma_2 = -\frac{\Gamma\beta}{2\omega_2} + \frac{Kp}{2\omega_2} a_2 + \frac{3\Gamma\alpha_2+3\alpha_4}{8\omega_2} a_2^3 + a_1^2 \frac{3\Gamma\alpha_2+3\alpha_4}{4\omega_2} (1-\Gamma) a_1 a_2 + \frac{f_2}{2\omega_2} \text{грех}(\psi_2). \quad (33б)$$

3.2. Анализ устойчивости посредством линеаризации вышеуказанной системы. Чтобы проверить устойчивость данного нелинейного решения с фиксированными точками, пусть

$$a_m = a_{m0} + a_{m1}, \psi_m = \psi_{m0} + \psi_{m1} \quad (34)$$

где a_{m1} и ψ_{m1} — возмущения, которые считаются незначительными по сравнению с a_{m0} и ψ_{m0}. Здесь a_{m0} и ψ_{m0} — решения уравнений (29) и (30). Уравнение (34) заменяется в уравнения (29) и (30) уравнением (31), сохраняя только линейные члены в a_{m1} и ψ_{m1}. Следовательно, линеаризованная система уравнений (29) и (30) имеет вид

$$\dot{a}_{11} = -\frac{\zeta_2 2\omega_2 - 2\frac{Ki}{1}}{2} \frac{Кд}{2} a_{11} + \frac{f_1}{\text{sin}(\psi_{10})} \psi_{11}, 2\omega_1 \quad (35а)$$

$$\dot{\psi}_{11} = \frac{\sigma_1}{a_{10}} \Gamma\beta + 2a_{10}\omega_1 \frac{КП}{2a_{10}\omega_1} + \frac{3\alpha_2(1-\Gamma)}{4a_{10}\omega_1} a_{20} a_{11} + \frac{9\alpha_2(1-\Gamma)}{8\omega_1^2} a_{10} a_{11}^2 + \frac{f_1}{2a_{10}\omega_1} \cos(\psi_{10}) \psi_{11} + 2\omega_1 \frac{3\alpha_2(1-\Gamma)}{a_{20}} a_{20} a_{21}, \quad (35б)$$

$$\dot{a}_{21} = \frac{Ки}{2\omega_2} - \frac{Кд}{2} a_{21} + \frac{f_2}{\text{sin}(\psi_{20})} \psi_{21}, 2\omega_2 \quad (36а)$$

Machine Translated by Google

$$\dot{\psi}_{21} = 2\omega_2 \frac{3\Gamma\ \alpha_2+3\alpha_4}{\alpha_2+9\alpha_4}(1\quad\Gamma)^2 a_{10}\ a_{11} + \frac{\sigma_2}{a_{20}}\quad\frac{\Gamma\beta}{2a_{20}\omega_2}\quad\frac{K_p}{2a_{20}\omega_2}\quad\frac{8\omega_2}{a_{20}} — \frac{3\Gamma\ \alpha_2+3\alpha_4}{4a_{20}\omega_2}(1\quad\Gamma)^2 a_{10}\ a_{21} + \frac{f_2}{2\omega_2 a_{20}}$$ потому что $(\psi_{20})\ \psi_{21}$. (36б)

Приведенные выше уравнения (35) и (36) можно описать как следующую матрицу: 1,2,..., 4

$$\dot{a}_{11}\quad\dot{\psi}_{11}\quad\dot{a}_{21}\quad . \psi_{21T} = [J]\ a_{11}\ \psi_{11}\ a_{21}\ \psi_{21T} .$$ (37)

Здесь [J] представлено соответствующими частями уравнений (35) и (36).

Собственные значения [J] , определенные с помощью последующего уравнения, следующие:

$$\lambda^4 + \Gamma_1\lambda^3 + \Gamma_2\lambda^2 + \Gamma_3\lambda + \Gamma_4 =$$ (38)

Коэффициенты уравнения (38) обозначены как Γ_m (m = 1, 2,..., 4). Решения системы с ПИД-регулированием устойчивы, если действительные части корней λ имеют отрицательные значения; в противном случае они нестабильны. Для стационарного решения необходимым и достаточным требованием является использование критерия Рауса – Гурвица, который утверждает, что все корни уравнения (38) должны иметь отрицательные действительные части тогда и только тогда, когда все главные миноры и следующий определитель D положителен.

$$Д = \begin{matrix} 1\ 1\ 0\ 0\ 3\ 2\ 1\ 1\ 0\ 4\ 3 \\ 2\ 0\ 0\ 0\ 4 \end{matrix} .$$ (39)

4. Результаты и обсуждение.

4.1. Производительность временной истории без управления

Для анализа поведения динамической системы применяется алгоритм Рунге-Кутты четвертого порядка (ode45 в MATLAB) [30] для нахождения численного решения заданной задачи. неуправляемая система уравнений (8) и (9).

Временные характеристики системы без какого-либо контроллера при первичном резонансе ($\Omega_1 = \omega_1$, $\Omega_2 = \omega_2$) показаны на рисунке 3 при выбранных значениях ($\omega_1 = 3$; $\zeta = 0{,}2$; $\omega_2 = 2$; $\beta = 0{,}5$) . $\omega_2 = 2$; $\alpha_2 = 0{,}3$; $\alpha_3 = 2\alpha_1$;

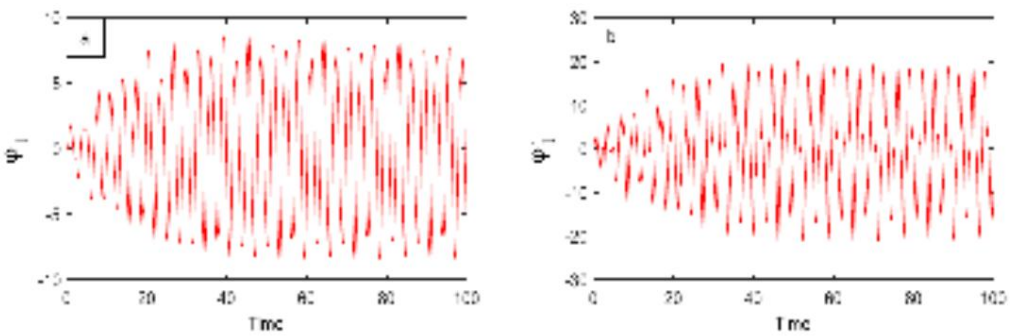
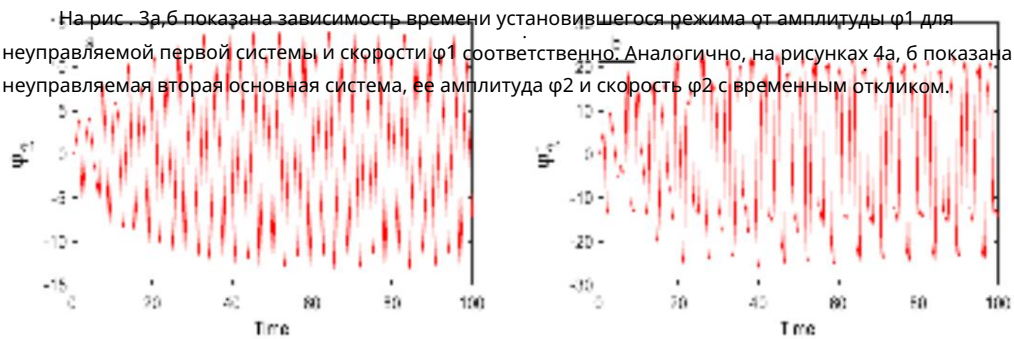


Рис. 3. Временная диаграмма без контроллера (а) первая часть системы, φ1 (б) реакция ее скорости, φ1 .

На рис . 3а,б показана зависимость времени установившегося режима от амплитуды φ1 для неуправляемой первой системы и скорости φ1 соответственно. Аналогично, на рисунках 4а, б показана неуправляемая вторая основная система, ее амплитуда φ2 и скорость φ2 с временным откликом.



Machine Translated by Google

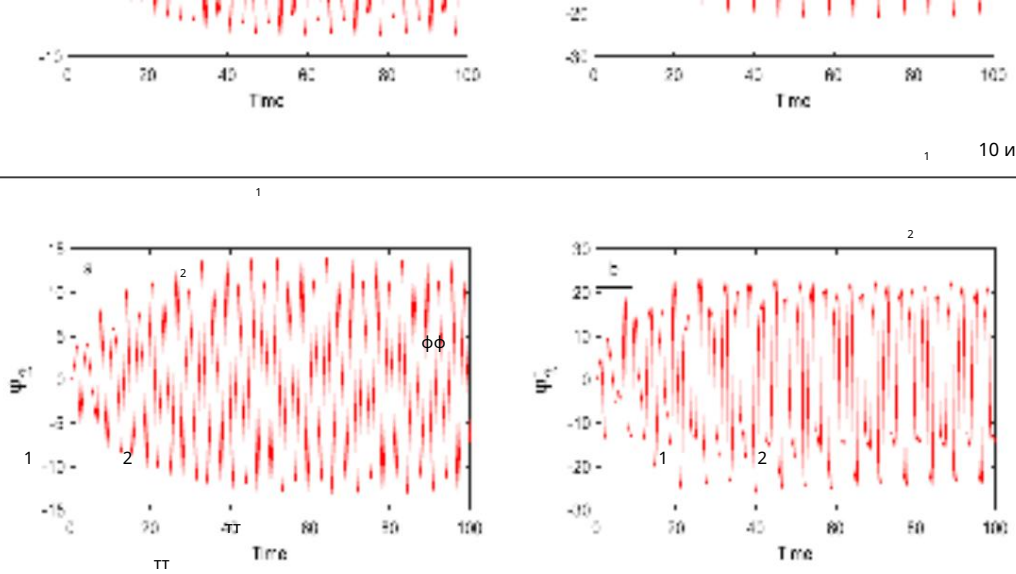


Рис. 4. Временная диаграмма без контроллера (а) вторая часть системы, φ2 (б) отклик ее скорости, φ2 .

4.2. Характеристики временной истории при различных

способах управления Характеристики П-, ПИ- и ПИД-регуляторов в замкнутом контуре для двух систем φ1 и φ2, а также соответствующие им скорости φ1 показаны на рисунке 5. φ2 — отклики замкнутого контура регуляторов традиционные П- и ПИ-регуляторы нестабильны и демонстрируют пиковые выбросы. Улучшенные характеристики замкнутого контура, например, реакции с меньшими пиковыми перерегулированиями и временем установления, были обеспечены переработанной структурой ПИД-регулятора, которая обеспечивает отклики замкнутого контура с меньшими пиковыми значениями и перерегулированиями и более стабильной кривой, чем Исследование проводилось для первой основной системы и ее скорости, как показано на рисунках 5a,b, и второй основной системы, показанной на рисунках 5c,d. На рисунке 5 показаны доказательства как устойчивого поведения, так и отсутствия хаоса в создаваемых длинах волн и амплитудах в каждом разрезе. Мы использовали значения усиления, представленные в таблице 1 , чтобы получить эти замкнутые контуры, используя три подхода к управлению.

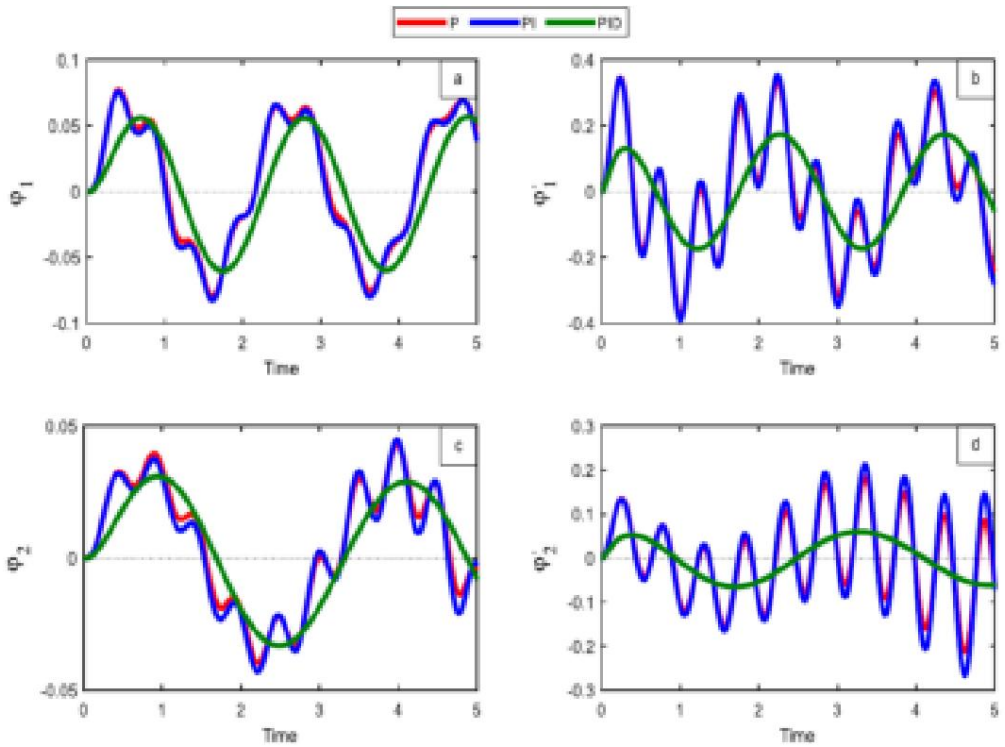


Рисунок 5. Реакция в замкнутом контуре с использованием P, PI и ПИД-регулятора. (а) первая часть системы φ1 (б),реакция ее скорости φ1 (в) вторая часть системы φ2 (г) реакция ее скорости φ2 .

Machine Translated by Google

Таблица 1. Параметры ПИД-регулятора.

Контроллер		Прирост		
		Кр	Ки	Кд
П	(Красный)	150	-	-
ПИ	(Синий)	150	20	-
ПИД	(Зеленый)	150	20	20

На рисунках 6а,б показано уменьшение амплитуды первой основной системы. от 7,788 до 0,0569 после использования ПИД-регулятора времени. Это указывает на то, что эффективность контроллера (Ea = амплитуда без контроля/амплитуда с) была эквивалентна до 136,87 для первой основной системы φ1 с пропорциональным снижением на 99,27%. Так же, амплитуда φ2 второй системы, равная 13,59, как показано на рисунке 7, снизилось до 0,02886, где Ea = 470,89, что отражает пропорциональное снижение на 99,79%.

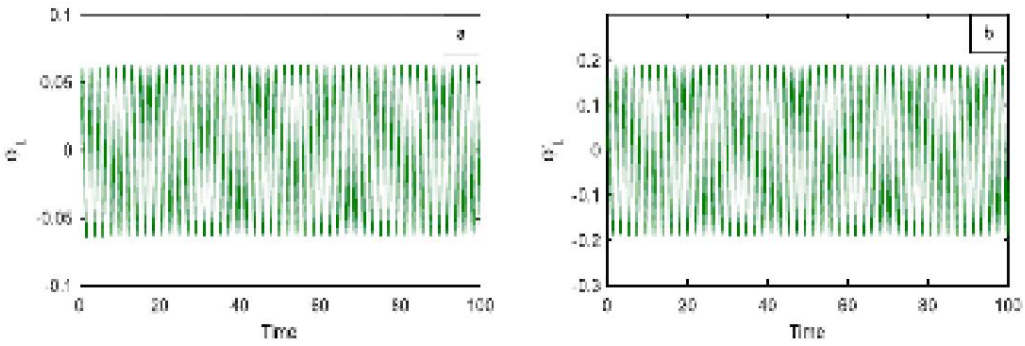


Рис. 6. Временная диаграмма в ситуации первичного резонанса с ПИД-регулятором (а) первый часть системы φ1 (б) отклик ее скорости φ1 .

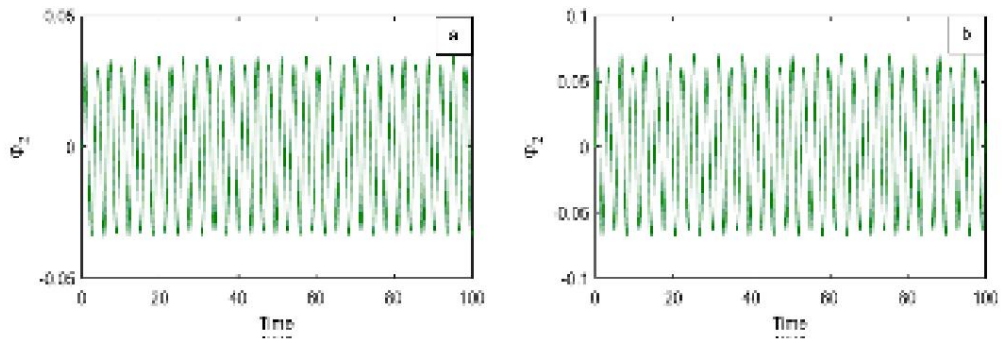


Рис. 7. Временная диаграмма в ситуации первичного резонанса с ПИД-регулятором (а) второй часть системы φ2 (б) отклик ее скорости φ2 .

Рисунок 8 иллюстрирует фазовую плоскость обеих основных систем до и после добавления ПИД-регулятор. На рис . 8a показано, что первая основная система φ1 с многопредельным циклом в случай отсутствия управления, а также улучшение с ограниченным циклом после добавления ПИД. С второй основной системы φ2, как показано на рисунке 8b, перед добавлением управления фазовая плоскость равна многопредельный цикл, который уменьшился после добавления ПИД.

Machine Translated by Google

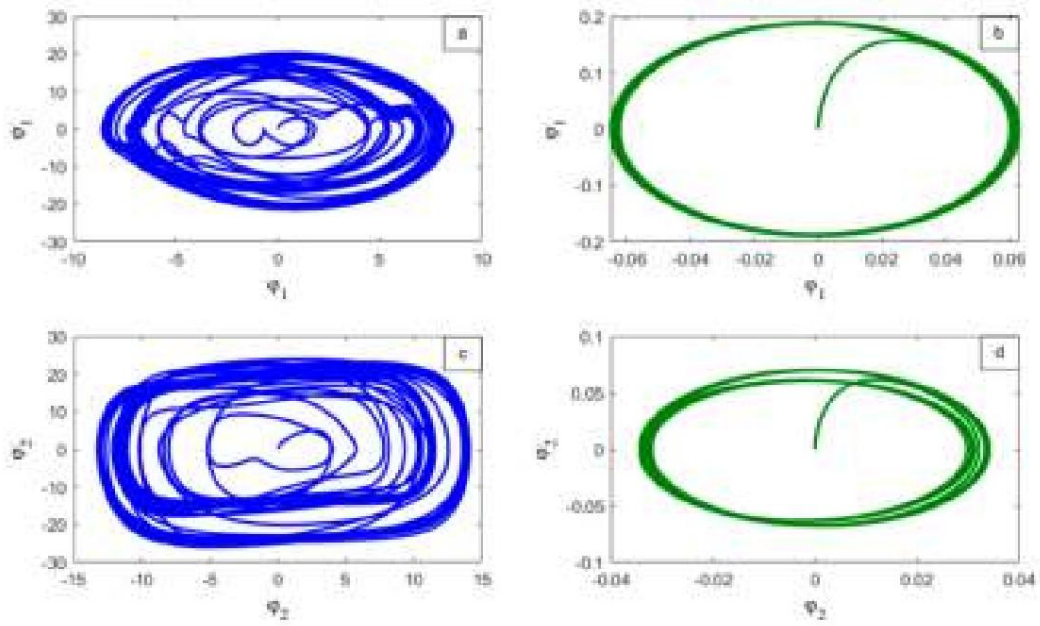


Рис. 8. Фазовая плоскость системы (а) φ1 с угловыми скоростями φ1 в ситуации первичного резонанса без управления (б) φ1 с угловыми скоростями ПИД-регулятора (в) φ2 с угловыми скоростями φ1 в ситуации первичного резонанса с φ2 в ситуации первичного резонанса без управления (г) φ2 с угловыми скоростями φ2 в ситуации первичного резонанса с ПИД-регулятором.

4.3. Кривые частотной характеристики (FRC)

Кривые частотной характеристики уравнений (32) и (33) первой основной системы a1 в зависимости от параметра расстройки σ1 показаны на рисунке 9a без влияния какого-либо контроллера, где сплошная черная линия представляет устойчивое решение, а красная линия указывает на неустойчивое решение того же уравнения. Амплитуда первой основной системы полностью снижается после добавления P-контроллера; однако, как показано на рис. 9b, эта нисходящая часть кривой нестабильна. Кривая отклика на рисунке 9c показывает, что происходит при добавлении ПИ-регулятора. Обнаружено, что это полностью уменьшает амплитуду первичной системы a1, но кривая абсолютно неустойчива. После добавления ПИД-регулятора поведение первой основной системы показано на рисунке 9d, где обнаружено, что кривая имеет монотонно уменьшающуюся амплитуду и полностью стабильна. Кривые отклика второй основной системы a2 в зависимости от параметра расстройки σ2 показаны на рисунке 10a без влияния какого-либо регулятора. Амплитуда второй основной системы полностью снижается после добавления P-контроллера; однако, как показано на рис. 10б , эта нисходящая часть кривой нестабильна. Кривая отклика на рисунке 10c показывает, что происходит при добавлении ПИ-регулятора. Обнаружено, что этот регулятор уменьшает амплитуду второй системы a2, однако кривая ведет себя нестабильно. После добавления ПИД-регулятора поведение второй основной системы показано на рисунке 10d, где обнаружено, что кривая имеет монотонно уменьшающуюся амплитуду и полностью стабильна. Рисунок 11 наглядно иллюстрирует разницу в откликах кривых до и после включения ПИД-регулятора для двух основных систем, a1 и a2. На рисунках 11a,b показано, что система только стабильна и не содержит нестабильных частей, а также как добавление ПИД-регулятора приводит к падению амплитуды при a1 и исчезновению при a2. Амплитуда возрастала с увеличением значения внешней силы f1 для первой основной системы a1, как показано на рисунке 12a , с первым компонентом системы a1. Амплитуда первой основной системы сдвинута вправо и представляет собой монотонно спадающую кривую по мере увеличения значений собственной частоты ω1 , как видно на рисунке 12b. Амплитуда монотонно уменьшается, когда значения коэффициента затухания ζ увеличиваются, как показано на рисунке 12c. . По мере увеличения значений нелинейного параметра β амплитуда первой половины системы изгибалась влево, как показано на рисунке 12г. Н

Machine Translated by Google

ведет себя как для положительных, так и для отрицательных значений параметра. Для очень маленьких отрицательных значений α2 кривая изгибается влево, но для высоких положительных значений α2 кривая изгибается вправо. Амплитуда второй основной системы увеличивалась при больших значениях внешней силы f2, как показано на рисунке 13a, со второй частью системы a2. Как видно на рисунке 13б, амплитуда второй основной системы смещается вправо и демонстрирует монотонную спадающую кривую при увеличении значений собственной частоты ω2. Как видно на рисунке 13c, амплитуда остается постоянной и смещается вправо для чрезвычайно высоких положительных значений нелинейного параметра α4 и влево для чрезвычайно низких отрицательных значений α4. Зависимость усиления от амплитуды показана на рисунке 14. На рисунке 14a показаны значения Ki и Kd . При дальнейшем изучении влияния Kp мы обнаружили, что при увеличении значений Kp амплитуда обеих первичных систем уменьшается, оставаясь при этом по При различных значениях Ki мы наблюдали, что амплитуда обеих основных систем неразличимо возрастала при фиксированных значениях Kp и Kd . Однако при Ki = 80 обе основные системы вели себя нестабильно, как показано на рисунке 14б. Наконец, хотя два других прироста фиксированы, на рисунке 14c показано улучшение Kd . Окраска показала, что амплитуда нестабильна при начальных значениях Kd и что в обеих системах амплитуда уменьшается с увеличением Kd .

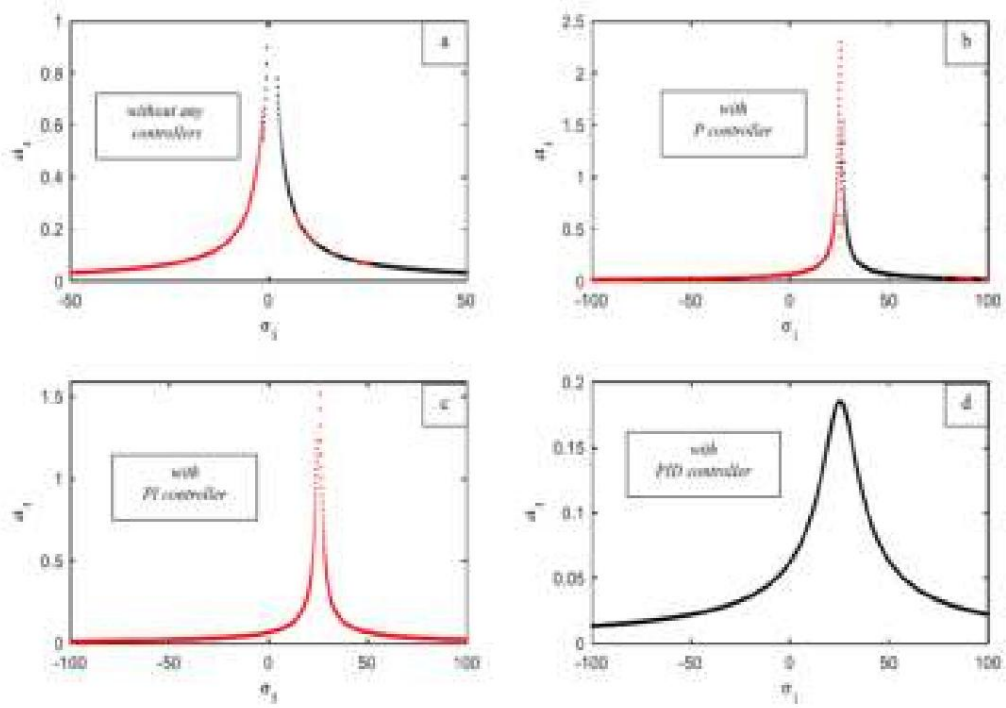


Рис. 9. Кривые АЧХ на плоскости σ1 и первой части системы (a1) (a) без регулятора, (б) с П-регулятором, (в) с ПИ-регулятором, (г) с ПИД-регулятор. (красный цвет) нестабильная область (черный цвет) стабильная область

Machine Translated by Google

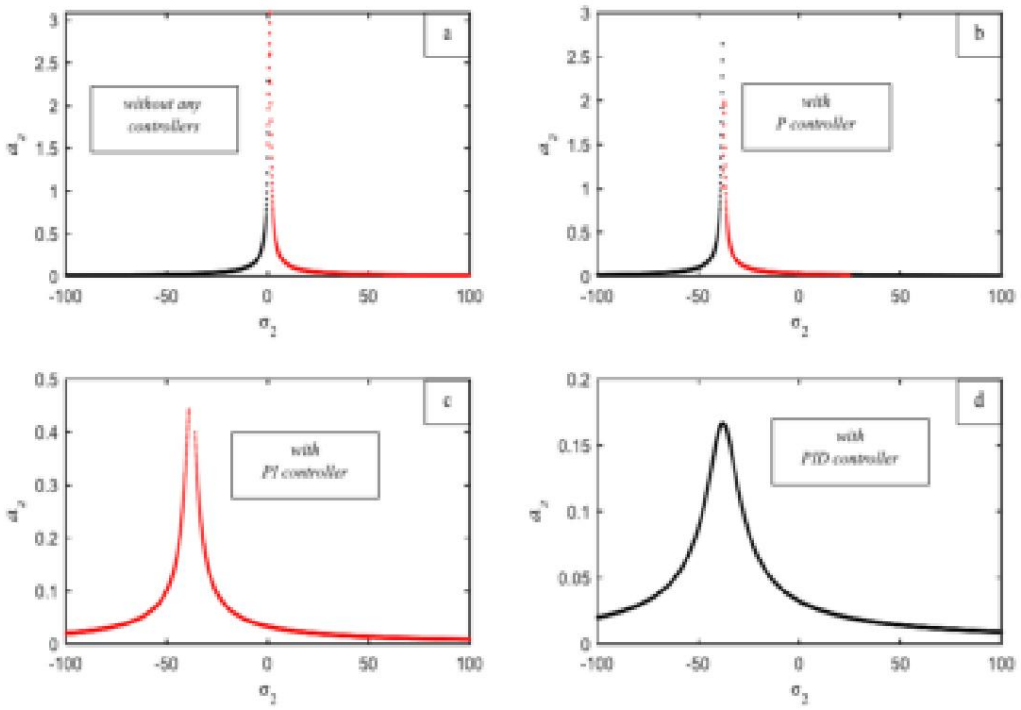


Рис. 10. Кривые АЧХ на плоскости σ2 и первой части системы (a2) (a) без регулятора, (б) с П-регулятором, (в) с ПИ-регулятором, (г) с ПИД-регулятором . (красный цвет) нестабильная область (черный цвет) стабильная область.

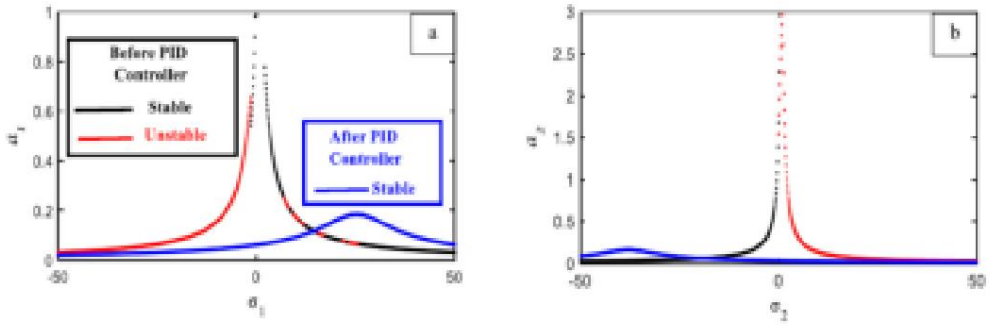


Рисунок 11. Частотная характеристика до и после ПИД: (а) первая основная система a1 и (б) первая основная система a2.

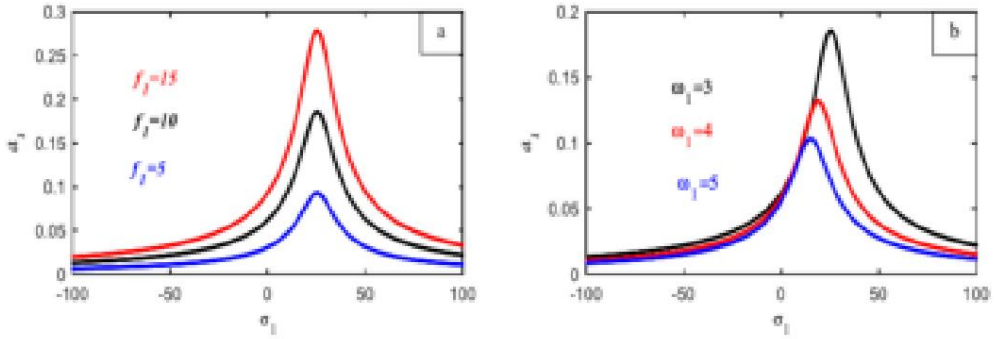


Рисунок 12. Продолжение.

Machine Translated by Google

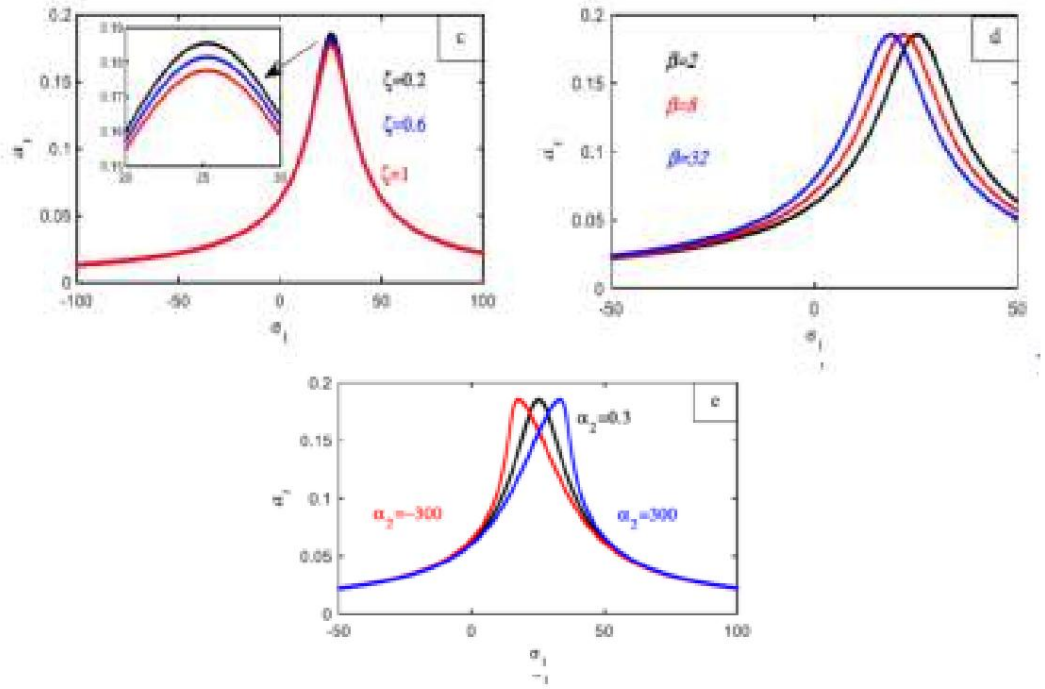


Рис. 12. (а) FRC действия внешней силы f1 . (б) Собственная частота ω1 . (в) Демпфирование коэффициент ffi ζ. (г) Линейный параметр β. (д) Нелинейный параметр α2. Все это относится к первой части система a1 .

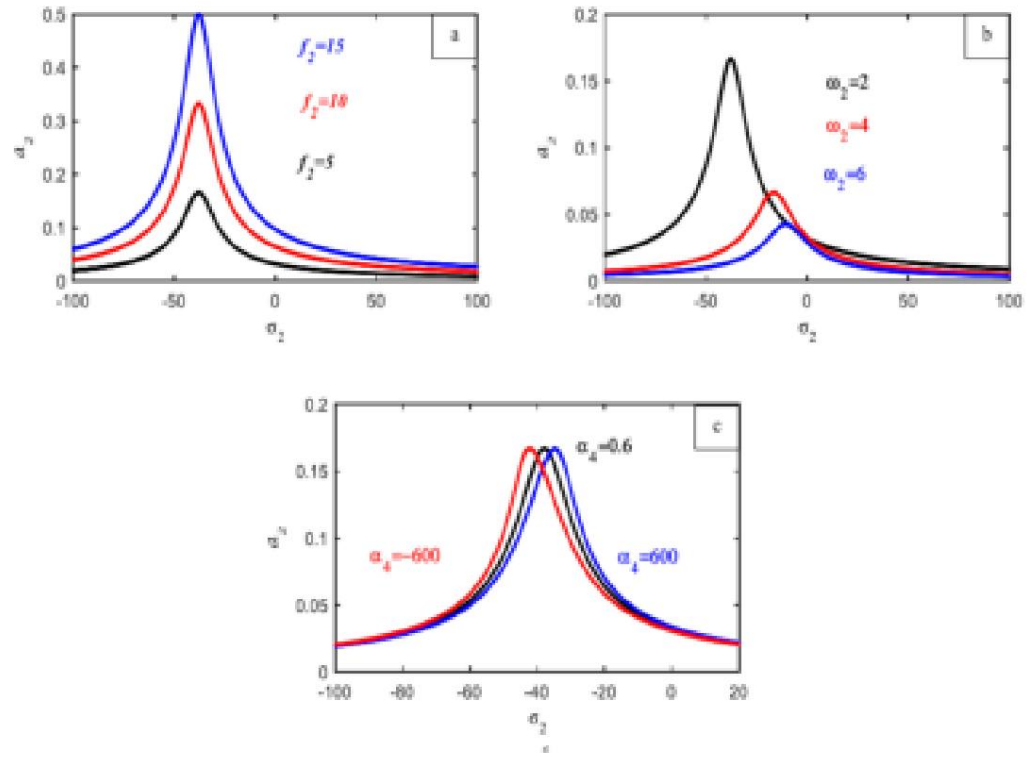


Рис. 13. (а) FRC действия внешней силы f2. (б) Собственная частота ω2. (в) Нелинейный параметр α4 . Все это относится ко второй части системы a2.

Machine Translated by Google

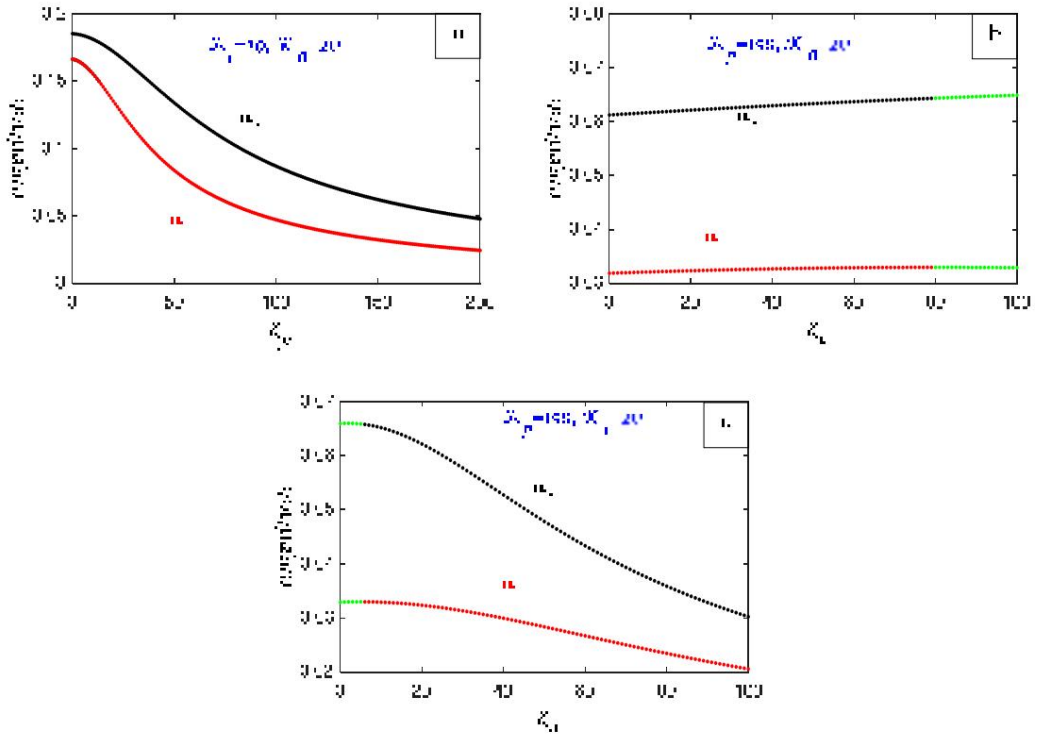


Рисунок 14. Кривая отклика для амплитуд системы с (a)Kp (b) Ki (c) Kd .

5. Сравнение

5.1. Сравнение решений временного отклика возмущения с численными методами

Аналитические решения уравнений (29) и (30) графически представлены линиями (---), которые соответствуют численным решениям уравнений (13) и (14), как показано на рисунке 15a для первой основной системы, и на рисунке 15b для второй основной системы.

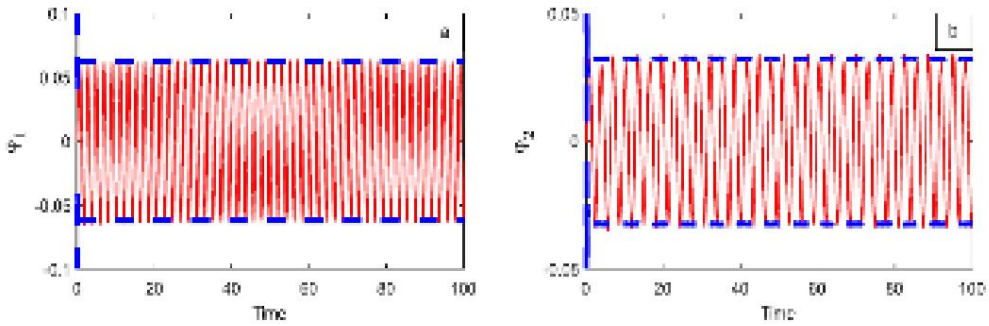
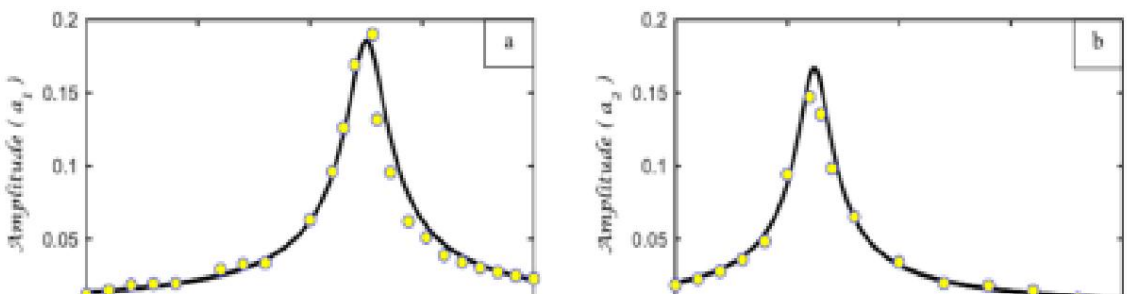


Рисунок 15. Сравнение численного моделирования и анализа возмущений для обоих режимов работы в ПИД-регуляторах. (a) первая часть системы φ1 (б) вторая часть системы φ2

5.2. Сравнение PK-4 и FRC

На рисунке 16 показано приемлемое согласие с численными решениями уравнений (4) и (5) с использованием (RK-4), выделенного желтыми кружками, и кривых частотных характеристик (FRC) для двух основных систем a1 на рисунке 16a и a2 на рисунке 16a. Рисунок 16б, которые представлены сплошной линией.



Machine Translated by Google

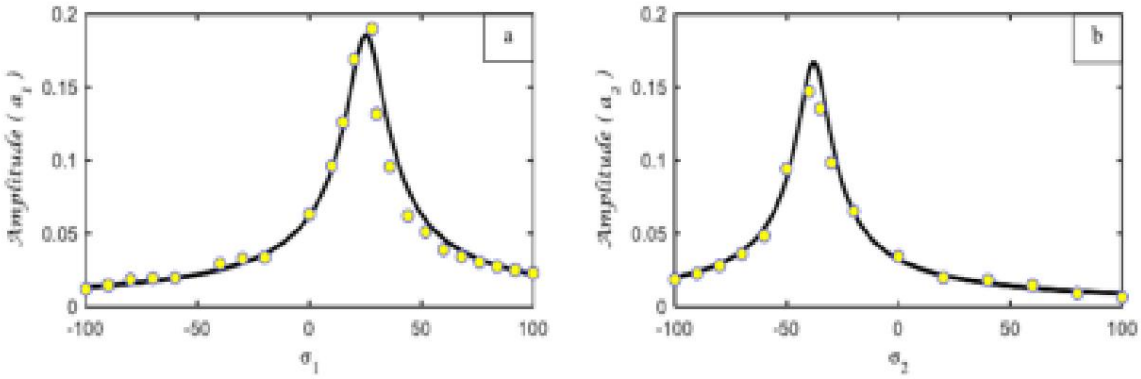


Рис. 16. Контраст между решением FRC и решением RK-4 для обеих систем (а) первая часть системы a1 (б) вторая часть системы a2.

5.3. Сравнение с опубликованными работами .

По предыдущим работам можно констатировать следующее:

(1) Крутильные колебания были рассмотрены в обзоре литературы [25] по активному и пассивному управлению, что является полезным инструментом управления крутильными колебаниями нелинейной динамической системы, подвергающейся воздействию нескольких параметрических возбуждений.
(2) Они использовали уравнения частотной характеристики; исследована устойчивость системы в окрестности одновременного субгармонического и внутреннего резонансов.
(3) Поведение системы с двумя регуляторами и без них численно интегрировано. и осмотрели.

В этой работе, после добавления контроля, мы сравнили временные диаграммы нашей работы и предыдущего исследования и обнаружили, что амплитуды и длины волн показали, что полученные решения демонстрируют стабильное поведение и лишены хаоса.

6. Выводы

В данной статье рассматривается управление крутильными колебаниями нелинейной динамической системы . Пропорционально-интегрально-дифференциальные (ПИД) регуляторы были предложены для управления вредной крутильной вибрацией системы, как показано на рисунке 2 для одного из худших случаев резонанса. Для получения аппроксимационного решения для связанной управляемой системы применяется подход многомасштабных возмущений . Для исследования установившихся амплитуд вибрации и эффективности применяемых алгоритмов управления при подавлении вибрации построена временная диаграмма. Кроме того, стабильность и влияние различных параметров системы и управления иллюстрируются кривыми частотных характеристик в соответствии с критерием Рауса-Гурвица. На основании вышеизложенного обсуждения можно сделать следующие выводы :

(1) Следует отметить, что ПИД-регулятор работает для снижения опасных вибраций в короткое время.
(2) В этой работе было проведено сравнение П-, ПИ- и ПИД-регуляторов в контексте ФРК.
(3) Эффекты многочисленных коэффициентов исследованы и показаны численно.
(4) Несмотря на частоту возбуждения, ПИД-регулятор является наиболее эффективным средством управления. метод минимизации вибраций в каркасе.
(5) Реакция относительного смещения с обратной связью получается с помощью ПИД-регулятора, который включает в себя пиковое перерегулирование.
(6) Модифицированная структура ПИД-регулятора, например, П- и ПИ-регуляторов, используется для управления относительным перемещением системы подвески. Результаты показали , что ПИД-регулятор обеспечивает лучшую производительность в замкнутом контуре с точки зрения пикового перерегулирования и времени установления, которые сведены к минимуму.

Machine Translated by Google

Вклад автора: КА: ресурсы; методология; формальный анализ; валидация; визуализация; письмо — первоначальный черновик; написание — просмотр и редактирование (одинаковое); приобретение финансирования. АТЕ-С.: концептуализация; расследование; методология; курирование данных; валидация; письмо — первоначальный черновик; написание — просмотр и редактирование. ЭПЗ-Б.: формальный анализ; валидация; расследование; методология; курирование данных; концептуализация; письмо — первоначальный черновик; написание — просмотр и редактирование. Все авторы прочитали и согласились с опубликованной версией рукописи.

Финансирование: Данное исследование финансировалось Проектом поддержки исследователей, номер гранта (RSPD2024R 588), Университет короля Сауда, Эр-Рияд, Саудовская Аравия.

Заявление о доступности данных: все данные, полученные или проанализированные в ходе этого исследования, включены в эту опубликованную статью.

Благодарности: Авторы выражают признательность Проекту поддержки исследователей, номер гранта (RSPD2024R588), Университет короля Сауда, Эр-Рияд, Саудовская Аравия.

Конфликты интересов: Авторы не выявили каких-либо противоречивых интересов.

Номенклатура

I1 , I2	Полярный массовый момент нелинейной динамической системы
к1 , к2	Линейная пружинная жесткость нелинейной динамической системы
к21, к22, к23	Детали квадратичной и кубической жесткости
$\Phi_1^{\bullet}$, $\Phi_2^{\bullet}$	Силы возбуждения
с1	Линейные коэффициенты демпфирования нелинейной динамической системы
ω1 , ω2	Собственные частоты ζ
	Коэффициент демпфирования
β	Линейный параметр αi(i
= 1, 2, 3, 4) Нелинейный параметр	
ФК1 , ФК2	Принудительное управление
КП	Пропорциональный выигрыш
Кд	Производная прибыль
Ки	Интегральный выигрыш
θ0	Базовый угол

Приложение А

$$M1 = \frac{\alpha 1(1 \quad \Gamma\ ) 2A_1}{2\ 3\omega_1^{\prime}2}, M2 = \frac{\alpha 2(1 \quad \Gamma\ ) 3A_1}{3\ 8\omega_1^{\prime}2}, M3 = \frac{\beta A2+\alpha 2(3A\ 2 \quad \overline{2A2}+6(1 \quad \Gamma\ ) 2A1\overline{A1A2})}{\omega 2\ 1 \quad \omega 2\ 2}$$

$$M4 = \frac{\alpha 1A_1^{\ 2}}{1 \quad 4\omega 2\ 2}, M5 = \omega 2 \frac{\alpha 2A_2^{\ 3}}{\omega 2\ 1 \quad 9\omega 2\ 2}, M6 = \frac{2\alpha 1(1 \quad \Gamma\ )A1A2}{(\omega 1+\omega 2)} 2, M7 = \omega 2\ 1 \frac{2\alpha 1(1 \quad \Gamma\ )A1\overline{A2}}{\omega 2\ 1(\omega 1 \quad \omega 2)} 2$$

$$M8 = \frac{3\alpha 2(1 \quad \Gamma\ ) 2A\ 2\ 1A2}{(2\omega 1 + \omega 2)} 2, M9 = \omega 2 \frac{3\alpha 2(1 \quad \Gamma\ ) 2A\ 2\ \overline{1A2}}{(2\omega 1 \quad \omega 2)} 2, M10 = \omega 2 \frac{3\alpha 2(1 \quad \Gamma\ )A1A \quad \frac{2}{2}}{\omega 2_1 \quad (\omega 1 + 2\omega 2)}$$

$$M11 = \frac{3\alpha 2(1 \quad \Gamma\ )A1\overline{A \quad 2}^{2}}{(\omega 1 \quad 2\omega 2)\ 1} 2, M12 = \omega 2 \frac{\alpha 1\ (1 \quad \Gamma\ ) 2A1\overline{A1 + A2A2} \quad iKi \quad \omega 2 \frac{A1}{\omega 1}}{1}$$

$$N1 = \frac{1}{\omega 2 \quad \omega 2\ 2\ 1} 2i\omega 1D1\Gamma\ A1 + \alpha 4\ 3(1 \quad \Gamma\ ) 3A\ 2 \quad \overline{1A1} + 6(1 \quad \Gamma\ )A1A2\overline{A2} \quad \overline{Kp} \quad \frac{Ki}{\omega 1} + \omega 1Kd\ \Gamma\ A1$$

$$H2 = \frac{\omega 2\ 2M1 + \alpha 3(1 \quad \Gamma\ ) 2A\ 2_1}{\omega 2_2 \quad 4\omega 2_1}, N3 = \frac{\omega 2\ 2M2 + \alpha 4(1 \quad \Gamma\ ) 3A\ 3_1}{\omega 2_2 \quad 9\omega 2_1}$$

Machine Translated by Google

$$H4 = \frac{\omega 2\,2M4 \quad \alpha 3A_2^2}{3\omega_2^2}, \; N5 = \frac{\omega 2\,2M5 + \alpha 4A^3}{8\omega_2^2}, \; N6 = \frac{\omega 2\,2M6 \quad 2\alpha 3(1 \quad \Gamma)A1A2\,\omega 2 \quad (\omega 1}{+\,\omega 2)\,2}$$

$$H7 = \frac{\omega 2\,2M7 \quad 2\alpha 3(1 \quad \Gamma)A1A2\,\omega 2 \quad (\omega 1}{\omega 2)}, \; N8 = \frac{\omega 2\,2M8 \quad 3\alpha 4(1 \quad \Gamma)\,2A\,\overline{1A2}}{\omega_2^2 \quad (2\omega 1 + \omega 2)}$$

$$H9 = \frac{\omega 2\,2M9 \quad 3\alpha 4(1 \quad \Gamma)\,2A\,\overline{1A2}}{\omega_2 \quad (2\omega 1 \quad \omega 2)\,2}, \; N10 = \frac{\omega 2\,2M10 + 3\alpha 4(1 \quad \Gamma)A1A\,\omega 2 \quad (\omega 1 + 2}{2\omega 2)\,2}$$

$$H11 = \frac{\omega 2\,2M11 + 3\alpha 4(1 \quad \Gamma)A1A\,\omega 2 \quad (\omega 1}{2\omega 2)\,2}, \; N12 = \frac{\omega 2\,2M12 + \alpha 3\,(1 \quad \Gamma)\,2A1A1 + A2A2 \quad Ki}{\omega_2^2}$$

Ссылки

1. Совмя, В.С.; Дхарсини, СП; Дхаршини, Р.П.; Аравинд, П. Применение различных методов настройки ПИД-регулятора по температуре. система. Межд. Дж. Компьютер. Прил. 2014, 103, 32–34.
2. Прадипканнан, Д.; Сатьямурти, С. Реализация ПИД-регулятора с запланированным усилением для нелинейного связанного процесса в сферическом резервуаре. Межд. Дж. Мех. Мехатрон. англ. 2014, 14, 93–98.
3. Сабри, Луизиана; Хусейн А.А. Внедрение нечеткого и ПИД-регулятора в систему уровня воды с использованием LabView. Межд. Дж. Компьютер. Прил. 2015, 116, 6–10.
4. Башири, А.Х. Эмпирическое исследование устойчивого/разработанного ПИД-регулирования для нелинейной динамической системы с задержкой во времени в дискретной временной области. Гелиион 2024, 10, e29749. [Перекрестная ссылка] [ПабМед]
5. Хамед А.; Шабан, Э.М.; Дарвиш, Р.Р.; Абдель Гани, АМ Разработка и реализация дискретного ПИД-регулирования, применяемого в Резервуар с битумом, основанный на новом подходе к установке столбов. Межд. Дж. Динам. Контроль 2017, 5, 604–613. [Перекрестная ссылка]
6. Шабан, Э.М.; Хамед, А.; Дарвиш, Р.Р.; Абдель Гани, А.М. Новый подход к настройке дискретного ПИ/ПИД-регулятора, применяемый к битумной системе, основанный на формулировке неминимального пространства состояний. В материалах 25-й Международной конференции по компьютерной теории и приложениям (ICCTA), Александрия, Египет, 24–26 октября 2015 г.; стр. 52–57.
7. Хамед, Ар.; Шабан, Э.М.; Абдельхалим, А.М. Промышленная реализация зависящего от состояния параметра ПИД+ регулирования для системы битумных резервуаров с нелинейной задержкой по времени. Иран Дж. Науч. Технол. Пер. Электр. англ. 2022, 46, 743–751. [Перекрестная ссылка]
8. Сайед, Х.; Шабан, Э.М.; Абдельхамид, А. ПИД+регулирование параметров, зависящих от состояния, применительно к нелинейному манипулятору. В последних достижениях в области инженерной математики и физики; Фарук М., Хассанейн М., ред.; Шпрингер: Чам, Швейцария, 2020 г.
9. Дано, МЛ; Жюльер Б. Активный контроль термоиндуцированных искажений в композитных конструкциях с использованием композитных приводов из макроволокон. Умный Мэтр. Структура. 2007, 16, 2315–2322. [Перекрестная ссылка]
10. Кумар, Р.С.; Рэй, МС Активное управление геометрически нелинейными вибрациями интеллектуальных сэндвич-оболочек двойной кривизны с использованием 1–3 пьезоэлектрические композиты. Композиции. Структура. 2013, 105, 173–187. [Перекрестная ссылка]
11. Саид Н.; Камель, М. Нелинейный ПД-регулятор для подавления нелинейных колебаний горизонтально опертой системы Джеффкотт-ротор. Межд. Нелинейный мех. 2016, 87, 109–124. [Перекрестная ссылка]
12. Фей, РХБ; Воутерс Р.М., Т.; Неймейер, Х. Пропорциональное и производное управление для подавления установившейся вибрации в кусочном режиме. линейная балочная система. Нелинейная Дин. 2010, 60, 535–649. [Перекрестная ссылка]
13. Эйсса, М.; Кандил, А.; Эль-Ганаини, Вашингтон; Камель, М. Анализ вибраций системы нелинейной магнитной левитации, управляемой контроллером пропорциональной производной с задержкой по времени. Нелинейная Дин. 2015, 79, 1217–1233. [Перекрестная ссылка]
14. Эйсса, М.; Кандил, А.; Камель, М.; Эль-Ганаини, В.А. Об управлении откликом первичных и параметрических резонансов нелинейная система магнитной левитации. Механика 2015, 50, 233–251. [Перекрестная ссылка]
15. Бауоми, Х.С.; Э.Л-Сайед, А.Т. Закон нелинейно-пропорционального регулятора производной для ламинированной оболочки из ДСП. Физ. Скр. 2020, 95, 095210. [Перекрестная ссылка]
16. Хоте, Ю.В.; Джайн, С. Проектирование ПИД-регулятора для управления частотой нагрузки: проблемы прошлого, настоящего и будущего. МФБ-Пап. Онлайн 2018, 51, 604–609. [Перекрестная ссылка]
17. Дарвиш, Н.М. Проектирование ПИД-регулятора в частотной области для систем с задержкой прямым методом. Пер. Инст. Измер. Контроль 2018, 40, 940–950. [Перекрестная ссылка]
18. Чжао, К.; Го, Л. Разработка ПИД-регулятора для нелинейных неопределенных систем второго порядка. наук. Китай Инф. наук. 2017, 60, 022201. [Перекрестная ссылка]
19. Ханафи Д. Разработка ПИД-регулятора для полуактивной подвески автомобиля на основе модели интеллектуальной системы идентификации. В материалах Компьютерного общества IEEE, Вторая международная конференция по компьютерной инженерии и приложениям, Бали, Индонезия, 19–21 марта 2010 г.; стр. 60–63.

Machine Translated by Google

20. Константин, М.; Попеску, ОС; Масторакис Н.Э. Испытание и моделирование подвески автомобилей. Межд. Дж. Сист. Прил. англ. Дев. 2009, 3, 74–83.
21. Кумар М.С. Разработка активной системы для автомобилей с использованием ПИД-регулятора. В материалах Всемирного конгресса по Engineering, Лондон, Великобритания, 2–4 июля 2008 г.; Том II.
22. Говинда, К.Э.; Рагул, С.; Кишор, КР; Матан, КМ; Прасант, К. Повышение производительности полуактивных устройств с замкнутым контуром Система подвески с контроллером I-PD. Матер. наук. англ. 2019, 561, 012085. [CrossRef]
23. Амер Ю.А.; Эль-Сайед, АТ; Эль-Бахрави, Ф.Т. Снижение крутильных вибраций в системе главного привода прокатного стана посредством отрицательного обратная связь по скорости при параметрическом возбуждении. Дж. Мех. наук. Технол. 2015, 29, 1581–1589. [Перекрестная ссылка]
24. Вэньчжи, Г.; Чжиюн, Х. Исследование активного контроля и моделирования крутильной вибрации вала ротора большого турбогенератора. Мех. Мах. Теория 2010, 45, 1326–1336. [Перекрестная ссылка]
25. Эль-Сайед, Арканзас; Бауоми, Х.С. Пассивные и активные регуляторы для подавления крутильных колебаний в системах с несколькими степенями свободы . Дж. Виб. Контроль 2015, 21, 2616–2632. [Перекрестная ссылка]
26. Цзяньхуэй, В.; Юшен, В.; Филип Чен, СЛ; Чжи, Л.; Вэньцян, В. Адаптивное PI-управление по событиям для нелинейных систем MIMO с задержкой ввода. Инф. наук. 2024, 677, 120817.
27. Ян, В.В.; Ян, YJ; Тан, XY; Чжан, КР; Ли, Дж. К.; Сюй, К. Стратегия адаптивного управления P/PI для солнечного объемного реактора парового риформинга метана с пассивным тепловым управлением. хим. англ. наук. 2023, 281, 119005. [CrossRef]
28. Кеворкян Дж.; Коул, Дж. Д. Методы множественного масштаба и сингулярных возмущений. В области прикладных математических наук; Springer: Берлин/Гейдельберг, Германия, 1996.
29. Найфе А. Методы возмущений; Уайли: Нью-Йорк, штат Нью-Йорк, США, 1973 г.
30. Дуккипати Р.В. Решение задач анализа вибрации с использованием Matlab; Издательство New Age International Pvt Ltd: Нью-Дели, Индия, 2007.
31. Бауоми, Х.С.; Эль-Сайед, АТ Смешанный контроллер (IRC+ NSC), участвующий в модели консольной балки с откликом на гармонические вибрации. Измер. Контроль 2020, 53, 1954–1967. [Перекрестная ссылка]
32. Камель, М.; Эйсса, М.; Эль-Саид А.Т. Снижение вибрации нелинейного пружинного маятника при многопараметрическом возбуждении через продольный амортизатор. Физ. Скр. 2009, 80, 025005. [CrossRef]
33. Бауоми, Х.С.; Эль-Сайед, АТ; Салем, АМ; Эль-Бахрави, Ф.Т. Улучшенные гигантские магнитострикционные колебания привода за счет демпфера с положительной обратной связью по положению. ЦИМ Математика. 2023, 8, 16864–16886. [Перекрестная ссылка]
34. Бауоми, Х.С.; Эль-Сайед, АТ; Эль-Бахрави, штат Форт; Салем, А.М. Безопасность конструкции вала непрерывного вращения от нелинейности вибрация с НИППФ. Алекс. англ. Дж. 2023, 67, 193–207. [Перекрестная ссылка]
35. Бауоми, Х.С.; Эль-Сайед А.Т. Вибрационные характеристики вертикальной конвейерной системы при двух одновременных резонансах. Арх. Прил. Мех. 2018, 88, 1349–1368. [Перекрестная ссылка]
36. Эль-Сайед, АТ; Бауоми, HS NIPPF по сравнению с результатами контроллера ANIPPF для системы трансмиссии с полупрямым приводом в стригатель. Фракталы солитонов хаоса 2022, 156, 111778. [CrossRef]
37. Формирование уравнений движения для систем со многими степенями свободы. Доступно онлайн: www.efunda.com/formulae/. вибрации/mdof_eom.cfm (по состоянию на 1 января 2013 г.).

Отказ от ответственности/Примечание издателя: Заявления, мнения и данные, содержащиеся во всех публикациях, принадлежат исключительно отдельному автору(ам) и соавторам(ам), а не MDPI и/или редактору(ам). MDPI и/или редактор(ы) не несут ответственности за любой вред людям или имуществу, возникший в результате любых идей, методов, инструкций или продуктов, упомянутых в контенте.

Machine Translated by Google

вычисление

MDPI

Обзор

Систематический обзор моделей прогнозирования с использованием Evolving Нечеткие системы

Себастьян-Камило Ванегас-Аяла [1,2,*,†], Хулио Барон-Веландия [1,†] и Эфрен Ромеро-Рианьо [3,†]

[1] Докторантура инженерных наук, инженерный факультет, Окружной университет Франсиско Хосе де Кальдас, Богота 111611-111611537, Колумбия; jbaron@udistrital.edu.co

[2] Программа системной инженерии, факультет инженерии и фундаментальных наук, Fundación Universitaria Los Libertadores, Богота 111221-111221440, Колумбия

[3] Подуправление исследований, Колумбийская обсерватория науки и технологий (ОСуТ), Богота 111311-111311474, Колумбия; eromero@ocyt.org.co

* Адрес для переписки: scvanegasa@libertadores.edu.co

† Эти авторы внесли равный вклад в эту работу.

Аннотация: В настоящее время увеличение количества устройств, способных непрерывно собирать данные о нестационарных и динамических переменных, влияет на прогнозные модели, особенно если они не оснащены алгоритмами, способными адаптировать их параметры и структуру, из-за чего они не могут воспринимать определенные временные характеристики. изменяющиеся свойства или наличие недостающих данных в потоках данных. Постоянно развивающееся решение таких проблем — это развитие систем нечеткого вывода. Целью этой работы было систематическое рассмотрение моделей прогнозирования, реализованных посредством развития систем нечеткого вывода, определение наиболее распространенных структур, результатов реализации и прогнозируемых переменных, чтобы составить обзор текущего состояния этого метода и его возможных применений в других неисследованных областях. Это исследование проводилось в соответствии с методологией систематических обзоров PRISMA, включая научные статьи и патенты из трех академических баз данных, одна из которых предлагает бесплатный доступ. Это было достигнуто за счет рабочего процесса идентификации, выбора и включения, в результате чего было получено 323 записи, по которым был проведен анализ на основе предложенных вопросов обзора. Всего было выявлено 62 исследования, в которых предлагалось 115 различных системных структур, в основном ориентированных на повышение точности, а также на восемь основных областей применения и некоторые методы оптимизации. Было замечено, что эти системы были успешно реализованы для прогнозирования переменных с динамическим поведением и обработки пропущенных значений, непрерывных потоков данных и нестационарных характеристик. Таким образом, их использование может быть распространено на явления с этими свойствами

Ключевые слова: развивающаяся нечеткая система; прогнозирование; нечеткий; литературный обзор; ПРИЗМА; VOSviewer

check for updates

Цитирование: Ванегас-Аяла, С.-К.; Барон-Веландия, Дж.; Ромеро-Риано, Э. Систематический обзор моделей прогнозирования с использованием развивающихся нечетких систем. Вычисление 2024, 12, 159. https://doi.org/10.3390/ Computation12080159.

Академический редактор: Демос Т. Цахалис

Поступила: 12 июня 2024 г.
Пересмотрено: 18 июля 2024 г.
Принято: 27 июля 2024 г.
Опубликовано: 8 августа 2024 г.

Копирайт: © 2024 авторов. Лицензиат MDPI, Базель, Швейцария. Эта статья находится в открытом доступе. распространяется на условиях и условия Creative Commons Лицензия с указанием авторства (CC BY) (https://creativecommons.org/licenses/by/ 4.0/).

1. Введение

1.1. Модели прогнозирования

Модели прогнозирования позволяют контролировать и принимать решения в моделируемой среде. Модель с высокой степенью сложности может существенно усложнить выполнение этой задачи, а слишком простая модель может снизить производительность или неправильно представить явление [1]. Динамика моделируемых явлений может меняться со временем, что подразумевает необходимость адаптации моделей в процессе их работы с помощью подходов, основанных на данных, и непрерывного обучения [2]. Для этого необходимо, чтобы модели имели эволюционные динамические структуры, способные фиксировать изменения в потоке данных [1,3,4].

В настоящее время большинство методов прогнозирования, как правило, используют ограниченную историческую информацию для создания своих первоначальных конфигураций, и получение этой информации может быть трудным или дорогостоящим. Такой подход может помешать моделям реагировать на неожиданные изменения моделируемого явления. Более того, некоторые подходы к машинному обучению часто полагаются на автономное обучение, что приводит к длительным циклам обучения, увеличению вычислительной сложности и распространению ошибок, что может ухудшить точность прогноза [5,6].

Machine Translated by Google

Внедрение эффективного метода онлайн-прогнозирования становится обязательным для улучшения стратегии реагирования модели, позволяя преобразовывать полученные знания интуитивно понятным и интерпретируемым способом [3,6]. Модели должны быстро реагировать и учиться на ситуациях с различными условиями системы, такими как дрейфы, выбросы, пропущенные значения, сдвиги или нестационарные условия. Они также должны обрабатывать неограниченные потоки данных, работая онлайн и в режиме реального времени [7].

1.2. Развивающиеся системы нечеткого

вывода Развивающиеся системы нечеткого вывода (EFS) недавно появились как решение для моделирования очень сложных, нелинейных, онлайновых и нестационарных процессов. Они могут адаптировать свои параметры и постепенно изменять свою внутреннюю структуру с помощью новых поступающих выборок данных — например, изменяя набор правил или количество входов или выходов системы. Это позволяет им адаптироваться к новым состояниям или изменениям в поведении с течением времени, не требуя трудоемких этапов переобучения или перерывов в моделировании [8–11].

EFS обеспечивают гибкую структуру с инкрементным и непрерывным обучением, обрабатывая образцы потока данных только один раз, тем самым снижая потребление памяти [7]. Более того, они представляют собой системы на основе нечетких правил (FRS), способные самообновляться вместе со своими метапараметрами . Это включает в себя идентификацию и уточнение предшествующих и последующих частей правил, а также динамическую адаптацию параметров функций принадлежности из непрерывного потока данных [3,9,12,13]. На сегодняшний день были предложены различные EFS с различными эволюционными структурами и схемами обучения параметров для решения реальных задач классификации, идентификации и регрессии, где интерпретируемость модели играет ключевую роль [3,9,14].

EFS в настоящее время используются в качестве практических инструментов в приложениях потоковой передачи данных, таких как автономное вождение, прогнозирование погоды и высокочастотная торговля [15]. В результате было введено множество EFS, обладающих заметной гибкостью, лингвистической совместимостью и динамической автономией. Эти системы позволяют представлять информацию с эффективной вычислительной производительностью для непрерывного самообучения в нестационарных процессах [10,11], а также обеспечивают высокую скорость обучения и высокую точность по сравнению с другими стратегиями нелинейного прогнозирования [6].

Эта работа представляет собой систематический обзор EFS для задач прогнозирования, подчеркивая, что их важность была указана в других обзорных работах, которые охватывали другие подходы, такие как теория управления [16], эвристический дизайн [14], интерпретируемость [17], их применение. в потоках данных [18] и проблемах в начале их развития [19].

Таким образом, дается систематический обзор моделей прогнозирования с использованием EFS, чтобы дать обзор текущего состояния дел и изучить потенциальные приложения в неизученных областях. Для достижения этой цели обзор направлен на решение следующих вопросов: 1. Кто из авторов оказал

наибольшее влияние на развитие EFS?

2. Каковы тенденции в темах, концепциях или ключевых словах, связанных с прогнозированием?

модели, использующие EFS?

3. Как изменилась частота исследований моделей прогнозирования с использованием EFS?
4. Какие переменные или явления прогнозируются с помощью EFS?
5. Какова структура EFS, применимая к прогнозированию?
6. Какие методы оптимизации реализованы в EFS для повышения точности прогнозирования?

7. Какие результаты производительности были получены в моделях прогнозирования с использованием EFS?

В этой рукописи представлен анализ современного состояния техники EFS для задач прогнозирования с описанием существующих структур, областей, в которых они применяются , и их переменных, а также результатов их реализации на основе ответов на вопросы, рассмотренные в обзоре. Это позволяет нам визуализировать новые возможности для исследований, инноваций и разработок, а также возможные приложения для решения проблем, имеющих те же характеристики.

Этот систематический обзор имеет четкую и упорядоченную структуру, адаптируя методологию PRISMA для систематических обзоров, которая описана в следующих разделах документа.

Machine Translated by Google

документ. В разделе «Материалы и методы» подробно описана использованная методология; в разделе «Результаты и обсуждение» представлены и проанализированы полученные результаты; в Заключении суммированы основные выводы обзора; и, наконец, раздел «Будущие направления» описывает будущие области исследований и существующие проблемы.

2. Материалы и методы.

Настоящий обзор соответствует руководству по рабочему процессу PRISMA для систематических обзоров [20]. Этот процесс состоит из трех этапов: идентификация, отбор и включение (рис. 1).

1. Этап идентификации включает определение критериев приемлемости, выбор источники информации и разработка стратегии поиска.
2. Этап выбора включает в себя отбор и сбор данных, включая описание собранных элементов данных и метода синтеза.
3. Фаза включения не влечет за собой какой-либо конкретной разработки, поскольку она сосредоточена на проведении тщательного поиска, чтобы не пропустить соответствующие записи на протяжении всего рабочего процесса.

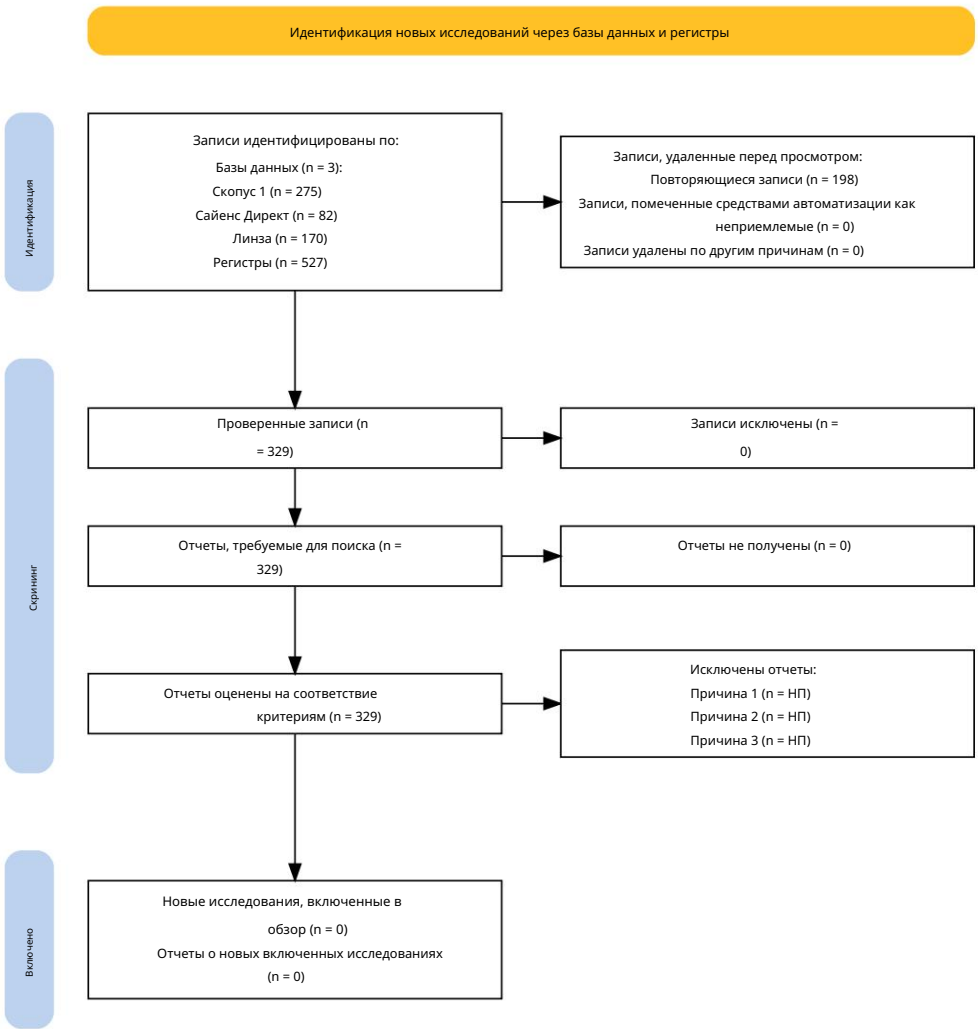


Рисунок 1. Описание методологии в соответствии с блок-схемой систематического обзора согласно PRISMA [20,21].

2.1. Критерии отбора, источники информации и стратегия поиска

Все исследования и исследования, проведенные в течение первых двух месяцев 2024 года по моделям прогнозирования с использованием EFS, рассматриваются под критериями приемлемости. В качестве источников данных использованы научные базы данных Scopus, Science Direct и Lens. В таблице 1

Machine Translated by Google

соответствующее уравнение поиска предоставляется для каждого источника, а также количество записей, найденных в каждом репозитории.

Таблица 1. Описание стратегии поиска для систематического обзора.

БД	Уравнение	Рекорды
Скопус	TITLE-ABS-KEY («Модель*» ИЛИ «Прогноз*» ИЛИ «Оценка*» ИЛИ «Математическая модель*» ИЛИ «Компьютерное моделирование*» ИЛИ «Прогнозирование*» ИЛИ «Модель прогнозирования*» ИЛИ «Оценка параметров*» ИЛИ «Оценка параметров*») И НАЗВАНИЕ-ABS-KEY («нечеткий» ИЛИ «ANFIS» ИЛИ «Членство Функция*») И TITLE-ABS-KEY («Развивающаяся нечеткая система*» ИЛИ «Развивающаяся система*»)	275
Наука Прямая	Найдите статьи с такими терминами: («Модель» ИЛИ «Прогнозирование» ИЛИ «Оценка» ИЛИ «Математическое моделирование». Модель» ИЛИ «Компьютерное моделирование» ИЛИ «Прогнозирование» ИЛИ «Модель прогнозирования» ИЛИ «Параметр Оценка» ИЛИ «Оценка параметров») Название, аннотация или ключевые слова, указанные автором: ((«нечеткий» ИЛИ «ANFIS» ИЛИ «Функция принадлежности») И («Развивающаяся нечеткая система» ИЛИ «Развивающаяся система»))	82
Объектив	(Название: ((«Модель*» ИЛИ «Прогноз*» ИЛИ «Оценка*» ИЛИ «Математическая модель*» ИЛИ «Компьютерное моделирование*» ИЛИ «Прогнозирование*» ИЛИ «Модель прогнозирования*» ИЛИ «Оценка параметров*» ИЛИ «Оценка параметров*») И («нечеткий» ИЛИ «ANFIS» ИЛИ «Функция принадлежности*») И («Развивающаяся нечеткая система*» ИЛИ «Развивающаяся система*»))) ИЛИ (абстракт: ((«Модель*» ИЛИ «Прогноз*» ИЛИ «Оценка*» ИЛИ «Математическая модель*» ИЛИ «Компьютерное моделирование*» ИЛИ «Прогнозирование*» ИЛИ «Модель прогнозирования*» ИЛИ «Оценка параметров*» ИЛИ «Оценка параметров*») И («нечеткий» ИЛИ «ANFIS» ИЛИ «Функция принадлежности*») И («Развивающаяся нечеткая система*» ИЛИ «Развивающаяся система*»))) ИЛИ (ключевое слово: ((«Модель*» ИЛИ «Прогноз*» ИЛИ «Оценка*» ИЛИ «Математическая модель*» ИЛИ «Компьютерное моделирование*» ИЛИ «Прогнозирование*» ИЛИ «Модель прогнозирования*» ИЛИ «Оценка параметров*» ИЛИ «Оценка параметров*») И («нечеткий» ИЛИ «ANFIS» ИЛИ «Функция принадлежности*») И («Развивающаяся нечеткая система*» ИЛИ «Развивающаяся система*»)))	165
Патентный поиск линз	(название: ((«Нечеткая» ИЛИ «ANFIS» ИЛИ «Функция принадлежности*») И («Развивающаяся нечеткая*»))) ИЛИ (абстрактно: (("нечеткий" ИЛИ "ANFIS" ИЛИ "Функция принадлежности*") И ("Развивающаяся нечеткая*"))) ИЛИ (утверждение: (("нечеткий" ИЛИ "ANFIS" ИЛИ "Функция принадлежности*") ») И («Эволюционирующий нечеткий*»)))	5

После удаления дубликатов из 527 первоначальных записей для использования в процессе проверки остается 323 уникальных записи.

2.2. Процесс отбора и процесс сбора данных

Каждый документ экспортировался из базы данных в значениях, разделенных запятыми, и в формате RIS для библиометрического анализа. Метод, используемый для определения критериев включения специально для следственного анализа, описывается следующим образом.

1. Отбираются только патенты и статьи.
2. Статьи должны быть опубликованы в научных журналах.
3. Временной интервал, свидетельствующий о росте или прогрессе в области обучения, выбирается на основе библиометрического анализа.
4. Любые записи, не относящиеся к теме исследования (прогнозирование с помощью EFS), исключаются.

2.3. Элементы данных и методы синтеза

Из общего количества записей были извлечены и сгруппированы следующие данные: в зависимости от их значимости для обзора.

1. Библиометрия

   • Авторы: используется для анализа сотрудничества и актуальности авторов. • Ключевые слова: используются для анализа сочетаемости терминов. • Год публикации: используется для проверки временного распределения публикаций по тема.

2. Исследовательский

   • Анализируемая переменная: соответствует моделируемой переменной или явлению. • Тип системы нечеткого вывода: указывает тип используемой системы нечеткого вывода.

Machine Translated by Google

• Оптимизация: указывает применяемый метод или тип оптимизации. •
Описание модели: Предоставляет подробную информацию о структуре разработки.
опед модель.
•
Точность: указывает измерение и значение производительности полученной модели.

3. Поля фильтрации для следственного анализа
•
Название, Аннотация: Используется для определения соответствия документов теме.
• Тип публикации: указывает средство публикации, например журнал, книга, конференция или другое.

2.4. Инструменты анализа

данных Для проведения библиометрического анализа использовался инструмент VOSviewer. Этот инструмент позволяет визуализировать отношения, отвечающие на вопросы обзора. В частности, это облегчает анализ соавторства и совпадения ключевых слов с временной ориентацией. Исследовательский анализ также включает в себя табулирование каждой статьи в соответствии с исследовательскими полями анализируемых переменных, типом системы нечеткого вывода, оптимизацией и результатами.

3. Результаты

Результаты были разделены на два раздела в зависимости от их целей: один посвящен библиометрическим данным для ответа на вопросы обзора с 1 по 3, а другой требует более всестороннего следственного анализа для ответа на вопросы с 4 по 7.

3.1. Библиометрический

анализ. Начиная с анализа соавторства, показанного на рисунке 2, перечисляются все авторы, причем наиболее заметными являются три основных кластера. Эти кластеры представляют исследователей Фернандо Гомиде (голубой), Эдвина Люгхофера (зеленый) и Пламена Ангелова (красный).

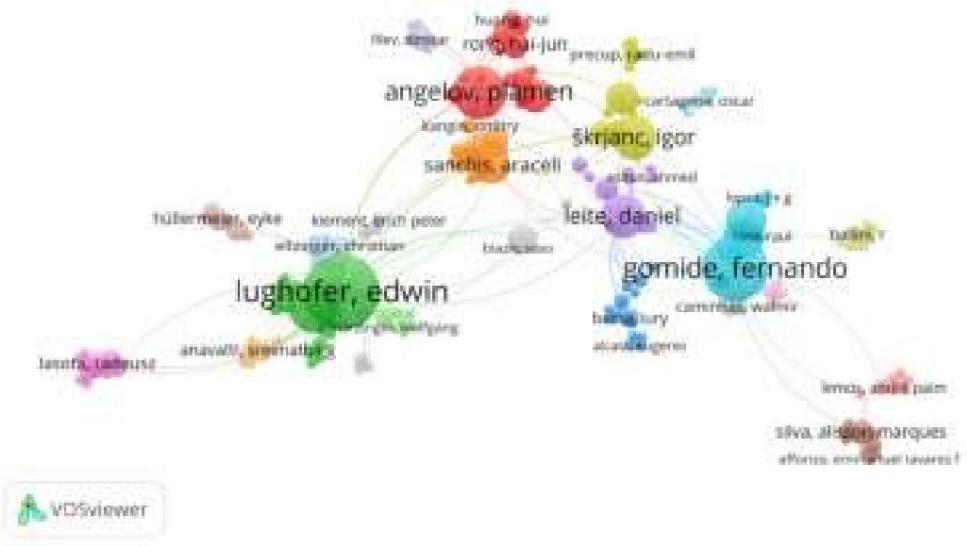


Рисунок 2. Сеть соавторства по количеству документов в EFS.

На рисунке 3 рассматривается совместное появление ключевых слов, при этом минимальный порог встречаемости установлен на уровне 13 повторений, чтобы определить наиболее релевантные темы в рамках обзора . Помимо EFS, наблюдается наличие элементов, связанных с приложениями, такими как системы реального времени, потоки данных и системы связи (выделены красны
Кроме того, такие реализации, как математическое моделирование, модели Такаги-Сугено,

Machine Translated by Google

и нейронные сети отмечены (выделены синим цветом), а также такие подходы, как прогнозирование, классификация, онлайн-обучение и искусственный интеллект (выделены зеленым)

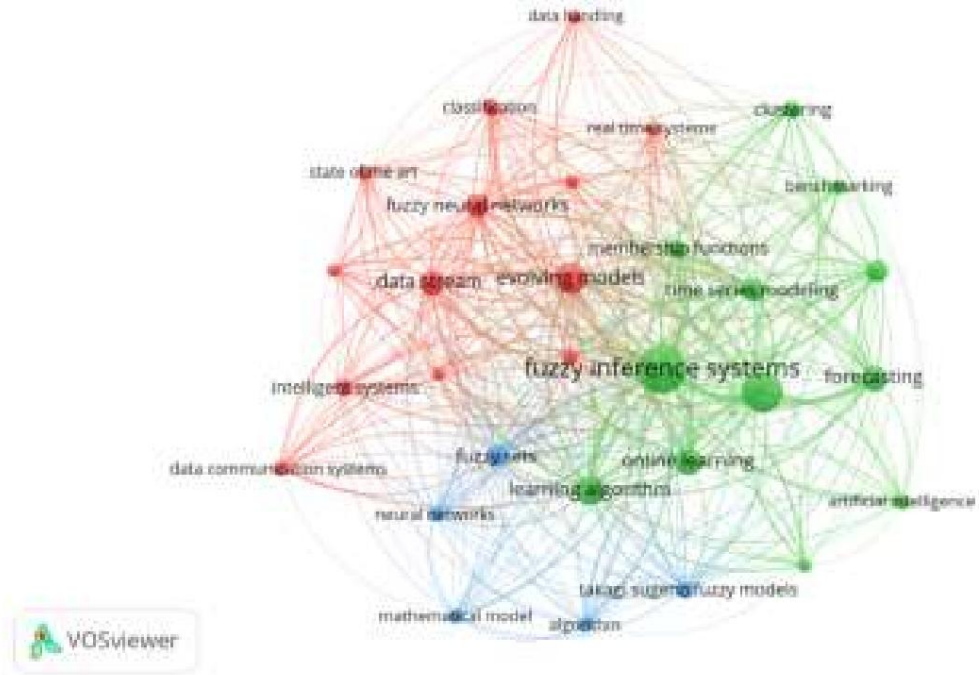


Рисунок 3. Карта совпадения ключевых слов каждого документа в EFS.

На рисунке 4 исследуется совместное появление ключевых слов во времени, при этом минимальный порог повторения установлен на уровне 13 повторений. Темы исследований, получившие самые последние разработки, включают потоки данных, классификацию информации, прогнозирование и временные ряды.

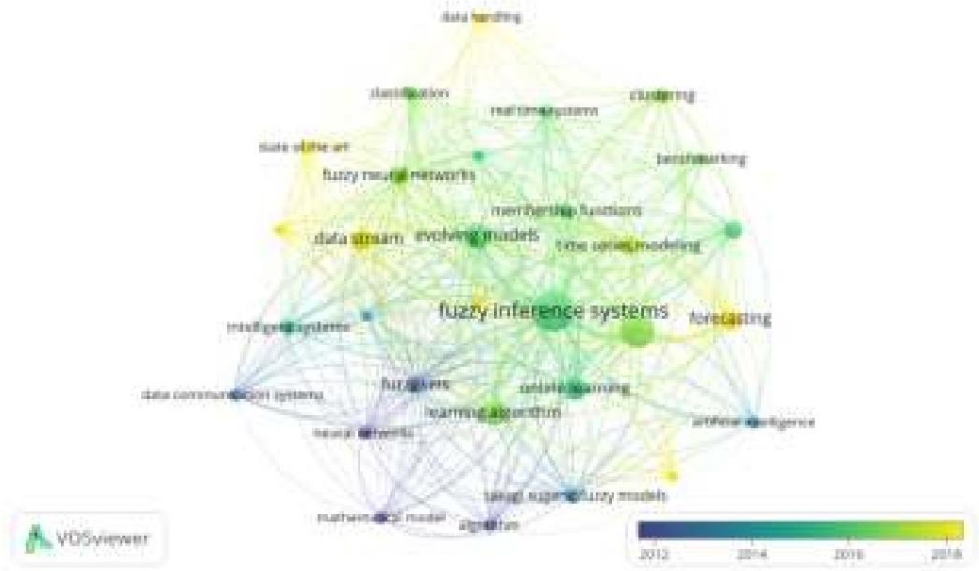


Рисунок 4. Карта совпадения ключевых слов каждого документа в EFS с течением времени.

Рисунок 5 иллюстрирует частоту исследований моделей прогнозирования с использованием EFS с течением времени. Тенденция роста наблюдается с 2010 года: в среднем проводится 20 исследований в год. Этот рост объясняется развитием технологий и вспомогательных компьютерных инструментов.

Machine Translated by Google

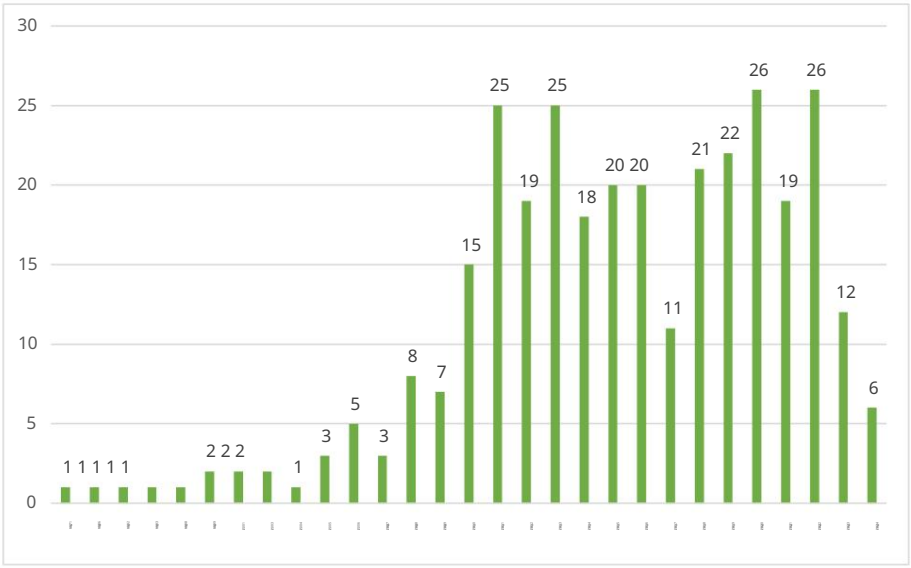


Рисунок 5. Гистограмма распределения объема исследований EFS во времени.

3.2. Расследовательский анализ

Из общего числа исследований с 2010 года путем фильтрации было отобрано 82 исследования с упором на журнальные статьи и регистрации патентов, как это предусмотрено методологией отбора. Среди них 20 исследований были отклонены из-за несоответствия моделям прогнозирования или отсутствия использования EFS.

В Таблице 2 анализируются оставшиеся 62 расследования и кратко описываются реализованные модели. Примечательно, что первые пять записей соответствуют патентам.

Таблица 2. Типы EFS, реализуемые каждым расследованием.

Исследовать	Тип ЭФС
[22]	БД нечеткой логики
[23]	Развивающаяся нечеткая нейронная сеть (EFuNN)
[24]	Развивающаяся нечеткая нейронная сеть (EFuNN)
[25]	Развивающаяся нечеткая нейронная сеть (EFuNN)
[26]	Нечеткая сеть
[27]	Самоорганизующаяся система нечеткого вывода (SOFIS+)
[28]	Динамическая взвешенная по сходству EFS (DSW-EFS)
[29]	EFS нулевого порядка: самоорганизующаяся система нечеткого вывода (SOFIS+); ALMMo нулевого порядка (ALMMo0); Самоорганизующаяся система нечеткого вывода убеждений (SOFBIS)
[30]	Интервал нечеткого прогнозирования (FPI)
[5]	Двухмодельная самоорганизующаяся система нечеткого вывода с полуконтролем (DMS3OF); самоорганизующаяся система нечеткого вывода (СОФИС+); самоорганизующаяся система нечеткого вывода убеждений (SOFBIS)
[31]	Развивающийся нейро-нечеткий (eNF)
[32]	Алгоритм фаззификации DSP (FDSPA)
[33]	Адаптивно развивающийся нечеткий (AEF)
[34]	Развивающиеся эллипсоидные нечеткие информационные гранулы (EEFIG); TS нечеткая авторегрессия с экзогенными входами (TS нечеткий ARX)
[35]	Модифицированный набор членства eMG (MSM-eMG); ЭМГ с переменным размером шага (VS-eMG)
[36]	Эволюционирующий нео-нечеткий нейрон с процедурой отсутствия данных (eNFN-MDP)
[11]	Статистическая развивающаяся система нечеткого вывода (SEFIS)
[37]	Онлайн-последовательное ансамблирование нечетких систем (OC-ФС)
[38]	Самоадаптивное нечеткое обучение (SAFL)
[39]	Масштабируемая сеть принуждения учителей со слабым контролем (WeScatterNet)
[40]	Многоуровневая ансамблевая развивающаяся система нечеткого вывода (MEEFIS); развивающиеся системы нечеткого вывода первого порядка (EFIS)
[41]	TCK потоки
[42]	EFS с самообучающимися/адаптивными порогами (EFS-SLAT)
[43]	Развивающаяся нейро-нечеткая сеть Такаги-Сугено (Развивающаяся NF-TS)

Machine Translated by Google

Таблица 2. Продолжение.

Исследовать	Тип ЭФС
[44]	Расширенный набор членства ePL-KRLS (ESM-ePL-KRLS); установить членство ePL-KRLS (SM-ePL-KRLS)
[45]	Расширенный ALMMo нулевого порядка (ALMMo-0*)
[46]	Инкрементальная нечеткая C-регрессия (InFuR)
[47]	Обобщенный гетерогенный интервальный нечеткий классификатор типа 2 (GHIT2Class)
[48]	Развивающийся нечеткий гранулярный предиктор (eFGP)
[49]	TS развивает нечеткий фильтр Калмана
[50]	Адаптивный нечеткий классификатор на основе градиентного спуска (AFCGD)
[51]	Развитие Такаги-Сугено (eTS); расширенный Такаги-Сугено (xTS); развивающееся нечеткое совместное обучение (ePL)
[52]	Метод идентификации робастной структуры (RSIM)
[53]	Экономная сеть на основе системы нечеткого вывода (PANFIS)
[54]	Облачная процедура идентификации
[55]	Нечеткий механизм развития временных рядов (TiSEFE)
[56]	Взвешенная нейро-нео-нечеткая модель ANARX
[57]	ОБЩИЙ классификатор (gClass)
[58]	Классификатор лесов типа 2 (CT2Класс)
[59]	Развивающаяся гетерогенная система нечеткого вывода (eHFIS)
[60]]	Развивающийся нечеткий GARCH
[61]	Развивающийся классификатор (eClass)
[62]	Развивающаяся нечеткая система выходного контекста (EOCFS)
[63]	Развивающаяся информационная гранула (EIG)
[64]	Обобщенный интеллектуальный EFS (Gen-Smart-EFS) (GS-EFS)
[65]	Обнаружение аномалий eTS (eTSAD)
[66]	Адаптивная система нейро-нечеткого вывода (ANFIS)
[67]	Развивающаяся нейро-нечеткая рекуррентная сеть (ENFRN)
[68]	Развивающийся классификатор (eClass)
[69]	Общая развивающаяся система нейро-нечеткого вывода (GENEFIS)
[70]	Развивающийся расширенный Такаги – Сугено (exTS)
[71]	Развитие нечеткого совместного обучения + (ePL+)
[72]	Гауссовская совместная развивающаяся кластеризация
[73]	Развивающийся классификатор (eClass)
[74]	Развивающаяся система нейронного нечеткого вывода типа 2 (eT2FIS)
[75]	eTS на основе переключения на соседний (eTS-N)
[76]	Четырехслойная нечеткая мультиагентная система (FMAS)
[77]	Самоорганизующаяся ФНС (СОФНН)
[4]	Развитие Такаги-Сугено (eTS); гибкие системы нечеткого вывода (FLEXFIS)
[78]	Развитие Такаги-Сугено (eTS)
[79]	Развивающийся классификатор поведения агентов (EvCAB)
[80]	Электронные сенсоры

В таблице 3 показаны переменные или явления, предсказанные EFS, причем каждая переменная сгруппированы по соответствующей области обучения. Поля с наиболее значимыми приложения включают экономику или финансы, здравоохранение, производство и технологии. В частности , в технологической области значительная часть посвящена применению синтетических переменные для проверки и подтверждения разработок новых моделей.

Таблица 3. Список переменных, прогнозируемых с использованием EFS, по количеству исследований.

Поле	Анализируемая переменная	Считать
Климатико-метеорологический	Система теплообменника	1
Экономико-финансовый	Криптовалюта	1
	Волатильность финансовой доходности	1
	Цены на жилье	1
	Волатильность фондового рынка	2
	Кривая доходности	1

Machine Translated by Google

Таблица 3. Продолжение.

Поле	Анализируемая переменная	Считать
Энергия	Оставшийся срок службы батареи	1
	Температура горячей точки	1
	Тепловое моделирование силовых трансформаторов	1
Здоровье	Признание активности	1
	Генеалогические деревья	1
	Экспрессия генов	3
	Звуки сердца	2
Производство	Обнаружение и диагностика неисправностей	1
	Производственный процесс	1
	Ошибка системы передачи в реальном времени	1
	Оставшийся срок полезного использования	1
	Роботизированное планирование последовательности разборки (DSP)	1
	Водоохладительная установка	1
Социальные	Оценка недвижимости	1
	Веб-новости	1
Технологический	Пример данных	30
	Пример изображения	1
	Нечеткие сетевые структуры	1
	Сетевой трафик	1
	Негауссов шум	1
	Данные датчика	1
	UNIX-команды	1
Транспорт и логистика	Ротор вертолета	1

В таблице 2 описаны 115 применимых эволюционных структур системы нечеткого вывода. к прогнозированию. Кроме того, на рисунке 6 показан процент использования различных EFS. рассмотрение минимум двух заявок. eTS имеет самую высокую частоту применения, за ним следуют eClass, eMG и xTS при прогнозировании переменных, указанных в таблице 3.

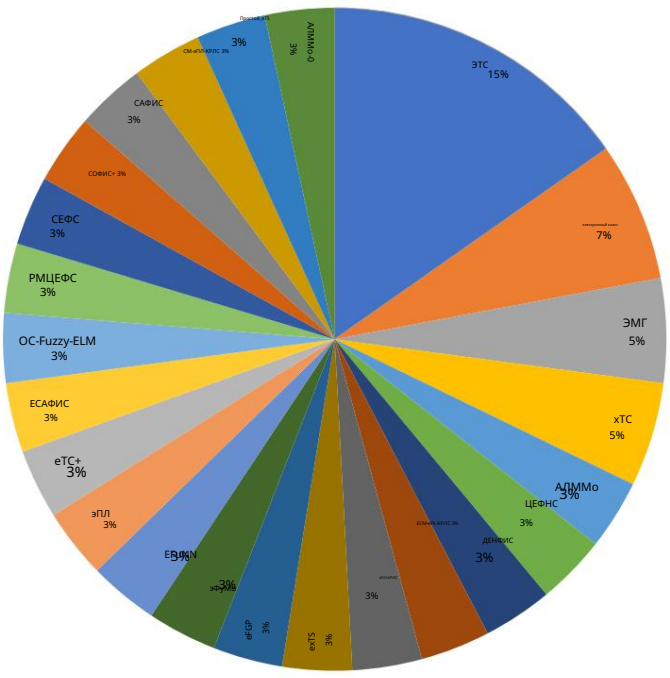


Рисунок 6. Круговая диаграмма распределения типов EFS, применяемых для задач прогнозирования.

Machine Translated by Google

Кроме того, на рисунке 7 показаны различные EFS, применяемые при прогнозировании выявленных переменные не менее двух раз. В частности, данные примера теплового моделирования силовых трансформаторов, и негауссов шум — это переменные, предсказываемые наибольшим количеством различных EFS.

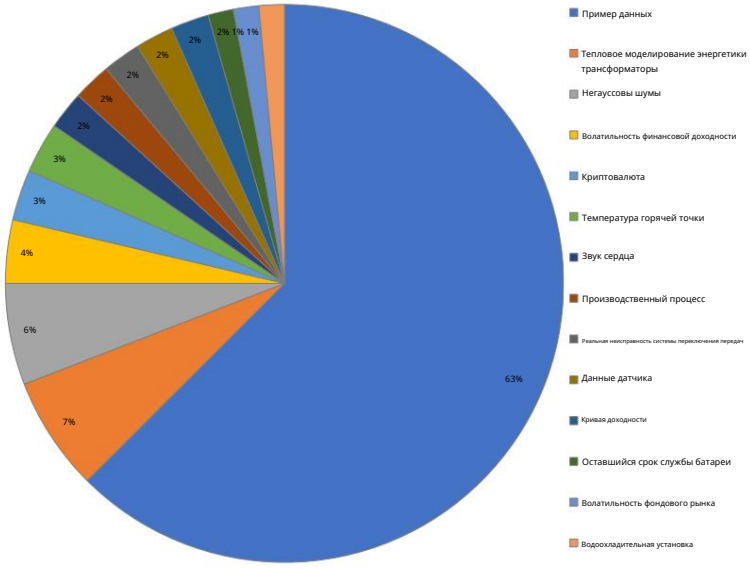


Рисунок 7. Круговая диаграмма распределения типов переменных в исследованиях, в которых применяются EFS.

Что касается методов оптимизации, реализованных в EFS для улучшения прогнозирования. точности, в таблице 4 показано, что 12 исследований включают в себя элементы оптимизации, определяющие какие методы были реализованы и их частота.

Таблица 4. Перечень методов оптимизации по количеству исследований, в которых они применяются.

Оптимизация	Считать
Ададельта-функция (NaD)	1
Адаптивное повышение (AdaBoost)	1
Адаптивный сажевый фильтр (aPF)	1
Метод адаптивного полуконтролируемого ансамбля (ASSEMBLE)	1
Адаптивный вейвлет	1
Платформа повышения эффективности обучения с учителем (SemiBoost)	1
Развязанный расширенный фильтр Калмана (DEKF)	1
Обнаружение дрейфа и реагирование на него	1
Расширенное двоичное дерево поиска (E-BST)	1
Нечетко взвешенный AdaBoost (FWAdaBoost)	1
Нечетко-взвешенный рекурсивный метод наименьших квадратов с забыванием переменного направления (FWRLS-VDF)	1
Генетический алгоритм (ГА)	1
Глобальный наименьший квадрат	1
Градиентный спуск (GD)	2
Постепенное забывание	1
Оптимизация гиперпараметров на основе неравенства Хёффдинга	1
MapReduce	1
Алгоритм объединения	1
ИзмененоЭволюционирование	1
Надежный AdaBoost (RobAdaBoost)	1
Полуконтролируемый FWAdaBoost (SSFWAdaBoost)	1
Поэтапное аддитивное моделирование с использованием многоклассовой экспоненты (SAMME)	1
Ададельта-функция (NaD)	1

Кроме того, модели прогнозирования с использованием EFS используют различные показатели эффективности. Примечательно, что среднеквадратическая ошибка (RMSE) упоминается в 23 исследованиях, а

Machine Translated by Google

среднеквадратическая ошибка (MSE) учитывается за пять. Полученные значения составляют 0,0662 и 0,0561 соответственно.

4. Обсуждение

В этом разделе мы обсуждаем соответствующие элементы, полученные в результате проведенного анализа, уделяя особое внимание выводам об общих структурах, результатам реализации моделей и переменным, используемым для прогнозирования с помощью EFS.

Среди типов структур EFS, применимых к прогнозированию, наиболее часто используемыми и упоминаемыми являются eGNN, FLEXFIS, eTS и eClass, предложенные Фернандо Гомиде, Эдвином Люгофером и Пламеном Ангеловым соответственно, которые обеспечивают точку сравнения для будущего. исследования, в которых они могут быть реализованы, сопоставлены и улучшены. Кроме того, за последнее десятилетие различные авторы представили новые предложения, которые представляют новые подходы или улучшения предыдущих реализаций, что указывает на растущую и расширяющуюся область.

Даже сейчас на основе проанализированных подходов разрабатываются новые предложения — например , стремящиеся повысить их интерпретируемость, такие как X-Fuzz [81]; обработка недостающих данных [82]; использование других подходов, таких как использование нескольких слоев в иерархических развивающихся нечетких системах [83]; или улучшение существующих подходов, таких как генерация динамических пра

При анализе современных тенденций отмечается, что структуры EFS, применимые к прогнозированию, преимущественно основаны на системах нечеткого вывода типа Такаги-Сугено . Эти системы касаются таких подходов, как создание или динамическая корректировка правил [31,38,41,45] и конфигурация или мониторинг входных или выходных потоков [59,65]. Однако существует несколько конфигураций, ориентированных на управление недостающими данными [36,48] и также основанных на системах нечеткого вывода типа Мамдани [62,63,74], которые обеспечивают более высокую интерпретируемость.

Эта тенденция показывает, что в настоящее время существует много предложений, ориентированных на точность, но мало на интерпретируемость или обработку недостающих данных, что дает возможность для исследований. Об этом свидетельствует, например, тот факт, что из 115 проанализированных предложений только в 10 используются системы типа

Мамдани: • Развивающаяся нечеткая система выходного контекста (EOCFS); • Развивающаяся схема построения нечетких систем (ECSFS); • Развивающаяся информационная гранула (EIG); • Развивающаяся система нейронного нечеткого вывода типа 2 (eT2FIS); • Нечеткая сеть управления адаптивным обучением, применяющая теорию адаптивного резонанса (FALCON-

ИСКУССТВО); • Развивающаяся нечеткая нейронная сеть (EFuNN); • Развивающаяся нейронно-нечеткая семантическая память (eFSM); • Общий SOFNN (GenSoFNN); • Псевдовнешний продукт на основе грубого набора (RSPOP); • Самоорганизующаяся нейронная нечеткая система типа 2 (T2SONFS).

Значения точности, полученные при использовании различных подходов, рассматриваемых EFS, демонстрируют их надежность при реализации. Примечательно, что эти системы постоянно адаптируют свои структуры для размещения новых потоков данных или изменений в поведении анализируемой переменной.

Замечено, что за счет реализации методов оптимизации характеристики существующих систем улучшаются, тем самым повышается их точность или снижается алгоритмическая сложность и время. Однако их ограниченная реализация обусловлена текущим уровнем зрелости метода; поэтому в будущем ожидается увеличение масштабов его реализации . В настоящее время основное внимание уделяется разработке новых предложений с разнообразными характеристиками, а не внедрению механизмов оптимизации в существующие структуры.

В области применения прогнозирования потоков данных наблюдается несколько возможностей исследования, связанных с прогнозируемыми переменными или явлениями:

Machine Translated by Google

- Переменные, которые демонстрируют нестационарные и динамические характеристики с течением времени, например , климатические или метеорологические переменные, такие как переменные в системе теплообменника [30];
- Явления, которые демонстрируют сильные колебания во времени и взаимозависимы от неизвестных переменных — например, в экономических явлениях, таких как волатильность фондового рынка [60,76];
- Переменные в непрерывных потоках данных, такие как неисправности системы передачи в реальном времени [31] и сетевой трафик [55];
- Временные ряды с отсутствующими данными [36] в динамических и нестационарных потоках данных, например, в криптовалюте [48].

5. Выводы

Приложения EFS можно найти в таких областях, как климат, экономика, энергетика, здравоохранение, производство, социальные науки и транспорт, с высокой эффективностью прогнозирования динамических, нестационарных переменных, даже при непрерывных потоках данных и недостающих данных. Очевидно, что при прогнозировании явлений с этими свойствами возможно получение высоких значений точности, особенно в сочетании с методами оптимизации, которые в настоящее время имеют ограниченное применение, в основном из-за текущего уровня зрелости мето

Обнаружено значительное разнообразие предложений по конфигурации и сборке EFS для прогнозирования потоков данных. Предполагается, что если требуется более высокая точность, наиболее распространенными являются структуры типа Сугено. С другой стороны, если мы сосредоточимся на более высокой интерпретируемости, лишь небольшая часть, примерно 8,6957% предложений, основана на системах нечеткого вывода типа Мамдани, и только два — на управлении отсутствую

6. Будущие направления

В этом разделе мы исследуем возможные будущие направления исследований и достижения в области EFS в задачах прогнозирования на основе проведенного обзора. Выделены новые тенденции и нерешенные проблемы, которые могут способствовать развитию этой области.

- Новые тенденции –
  - прогнозирование динамических, нестационарных потоков данных с отсутствующими данными, такими как экономические индексы, состояние здоровья в реальном времени, данные об окружающей среде, поведение потребителей, взаимодействия в социальных сетях, данные о взаимодействиях на образовательных платформах, данные о мобильности, и данные датчиков, среди прочего.
  - Внедрение алгоритмов оптимизации для повышения точности моделей , стремящихся сохранить достигнутый уровень интерпретируемости без изменения семантики модели.
  - Разработка новых предложений, направленных на обеспечение прогнозирования потоков данных с высокой интерпретируемостью и обработку недостающих данных или непрерывных потоков данных.
- Нерешенные проблемы
  - Что касается классификации существующих структур, то обнаружено более 100 предложений по эволюционным системам нечеткого вывода, поэтому необходимо разработать систему классификации, чтобы их было проще реализовать и сравнить. Например , некоторые предложения, выявленные в этом обзоре, сгруппированы по их подходу, т.е. по точности или интерпретируемости, или ориентированы на изменение правил или входных и выходных данных.
  - Необходимо эффективно сочетать предложения, сочетающие в себе высокий уровень интерпретируемости и высокую точность, таким образом, чтобы их было легко реализовать.

Вклад автора: Концептуализация, S.-CV-A. и ЖБ-В.; методология, ЭР-Р.; программное обеспечение, С.-КВ-А.; валидация, S.-CV-A., JB-V. и ER-R.; расследование, С.-СВ-А.; ресурсы, ЭР-Р.; курирование данных , S.-CV-A.; письменное – подготовка оригинального черновика, S.-CV-A.; написание-рецензирование и редактирование, С.- CV-A.; визуализация, ЭР-Р.; надзор, JB-V. Все авторы прочитали и согласились с опубликованной версией рукописи.

Machine Translated by Google

Финансирование: Данное исследование не получило внешнего финансирования.

Заявление о доступности данных: необработанные данные, подтверждающие выводы этой статьи, будут предоставлены авторами по запросу.

Конфликты интересов: Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Ссылки

1. Алькала, Э.; Бесса, И.; Пуиг, В.; Сенаме, О.; Паларес, Р. MPC использует онлайн-подход нечеткого обучения TS с применением к автономному вождению. Прил. Мягкий компьютер. 2022, 130, 109698. [CrossRef]
2. Андоновский Г.; Коста, BSJ; Блажиц, С.; Шкрянц, И. Надежный развивающийся контроллер для моделируемого расширительного резервуара и реальной установки с двумя резервуарами. Automatisierungstechnik 2018, 66, 725–734. [Перекрестная ссылка]
3. Гу, Х.; Ангелов П.; Шен, К. Самоорганизующаяся система вывода нечетких убеждений для классификации. IEEE Транс. Нечеткая система. 2022, 30, 5473–5483. [Перекрестная ссылка]
4. Лугхофер, Э.; Ангелов П. Обработка дрейфов и сдвигов в онлайн-потоках данных с помощью развивающихся нечетких систем. Прил. Мягкий компьютер. 2011, 11, 2057–2068 гг. [Перекрестная ссылка]
5. Гу, Х. Двухмодельная полуконтролируемая самоорганизующаяся система нечеткого вывода для классификации потоков данных. Прил. Мягкий компьютер. 2023, 136, 110053. [CrossRef]
6. Сан, Дж.; Ган, Х.; Гонг, Д.; Тан, Х.; Дай, Х.; Чжун, З. Саморазвивающаяся нечеткая система, основанная на динамическом мульти-прогнозировании. объективный эволюционный алгоритм. Инф. наук. 2022, 612, 638–654. [Перекрестная ссылка]
7. Родригес, Ф.; Сильва, А.; Лемос, А. Развивающийся нечеткий предиктор с многовариантным гауссовским совместным обучением и множественными инновациями рекурсивного взвешенного метода наименьших квадратов: eFMI. Эвол. Сист. 2022, 13, 667–686. [Перекрестная ссылка]
8. Лугхофер Э.; Скрянц, И. Развитие нечеткой модели обратной связи по ошибкам для повышения устойчивости к шуму измерений. IEEE Транс. Нечеткая система. 2022, 31, 997–1008. [Перекрестная
9. ссылка] Шкрянц, И.; Иглесиас, Дж.А.; Санчис, А.; Лейте, Д.; Лугхофер, Э.; Гомид, Ф. Развитие нечетких и нейро-нечетких подходов к кластеризации, регрессии, идентификации и классификации: обзор. Инф. наук. 2019, 490, 344–368. [Перекрестная ссылка]
10. Фердаус, М.; Пратама, М.; Анаватти, С.; Гарратт, М. ПАЛМ: поэтапное построение гиперплоскостей для потока данных Регрессия. IEEE Транс. Нечеткая система. 2019, 27, 2115–2129. [Перекрестная ссылка]
11. Ян, ZX; Ронг, HJ; Ангелов П.; Ян, ZX Статистически развивающаяся система нечеткого вывода для негауссовских шумов. IEEE Пер. Нечеткая система. 2021, 30, 2649–2664. [Перекрестная ссылка]
12. Ангелов П.; Филев Д. Подход к онлайн-идентификации нечетких моделей Такаги-Сугено. IEEE Транс. Сист. Человек Киберн. Часть Б Киберн. 2004, 34, 484–498. [Перекрестная ссылка] [ПабМед]
13. Делл'Анна, Д.; Джамшиднежад, А. Развитие систем нечеткой логики для творческих персонализированных социально вспомогательных роботов. англ. Прил. Артиф. Интел. 2022, 114, 105064. [CrossRef]
14. Оджа, В.; Авраам, А.; Снашель, В. Эвристический дизайн систем нечеткого вывода: обзор трех десятилетий исследований. англ. Прил. Артиф. Интел. 2019, 85, 845–864. [Перекрестная ссылка]
15. Хуан, Х.; Ронг, HJ; Ян, ZX; Вонг, К.М. Рекурсивное решение наименьшего среднего с двойной p-степенью для обобщения эволюции нечеткая система при множественных шумах. Инф. наук. 2022, 609, 228–247. [Перекрестная ссылка]
16. Раду-Эмиль Пречап, АТН; Блажиц, С. Обзор нечеткого управления для приложений мехатроники. Межд. Дж. Сист. наук. 2024, 55, 771–813. [Перекрестная ссылка]
17. Лугхофер, Э. Онлайн-гарантия критериев интерпретируемости в развивающихся нечетких системах. Достижения, новые концепции и открытость. проблемы. Инф. наук. 2013, 251, 22–46. [Перекрестная ссылка]
18. Баруа, РД; Ангелов П. Развивающиеся нечеткие системы для потоков данных: обзор. ПРОВОДА Данные Мин. Знать. Дисков. 2011, 1, 461–476. [Перекрестная ссылка]
19. Педрич, В. Развивающиеся нечеткие системы: некоторые идеи и проблемы. Эвол. Сист. 2010, 1, 73–82. [Перекрестная ссылка]
20. Пейдж, М. PRISMA 2020, объяснение и разработка: обновленное руководство и образцы отчетности о систематических обзорах. БМЖ 2021, 372, 160. [CrossRef]
21. Хаддавей, Н.; Пейдж, М.; Причард, К.; МакГиннесс, Л. PRISMA2020: пакет R и приложение Shiny для создания блок-схем, соответствующих PRISMA 2020, с интерактивностью для оптимизации цифровой прозрачности и открытого синтеза. Кэмпбелл Сист. Преподобный. 2022, 18, 12:30. [CrossRef] [ПабМед]
22. Чарльз, Д.М. Метод и система обнаружения предков с использованием геномных и генеалогических данных. США 2017/0213127 A1, 27 июля 2017 г.
23. Эдмунд, РА; Эрвин, FM; Джеймс, С.М.; Кирилов, К.Н.; Джон, врач общей практики. Медицинские применения систем адаптивного обучения. Данные экспрессии генов. США 7370021 B2, 6 мая 2008 г.
24. Эдмунд, РА; Эрвин, FM; Джеймс, С.М.; Кирилов, К.Н.; Джон, врач общей практики, Медицинские применения систем адаптивного обучения и Диагностические наборы. NZ 547894 A, 6 мая 2008 г.
25. Кирилов, К.Н.; Эрвин, FM; Джеймс, С.М.; Эдмунд, Р.А. Системы поддержки принятия медицинских решений, использующие экспрессию генов, клиническую информацию и методы использования. EP 1534122 B1, 20 июля 2016 г.
26. Флинн, С.Д.; Манипенни, NF Адаптивные рекомбинантные системы. WO 2005/054982 A2, 16 июня 2005 г.

Machine Translated by Google

27. Сяо, Ф.; Лю, Х.; Лу, Дж. Новый подход, основанный на сверточной нейронной сети 1D + 2D и развивающейся нечеткой системе, для диагностики сердечно-сосудистых заболеваний по звуковым сигналам сердца. Прил. Акуст. 2024, 216, 109723. [CrossRef]
28. Ли, Х.; Чжао, Т. Динамическая взвешенная по подобию развивающаяся нечеткая система для концептуального дрейфа потоков данных. Инф. наук. 2024, 659, 120062. [Перекрестная ссылка]
29. Гу, Х.; Ангелов П.; Шен, К. Полуконтролируемое нечетко взвешенное адаптивное повышение для классификации. IEEE Транс. Нечеткая система. 2024, 32, 23:18–23:30. [Перекрестная ссылка]
30. Картахена, О.; Ожбот, М.; Саес, Д.; Шкрянц, И. Развивающийся интервал нечеткого прогнозирования для обнаружения неисправностей в теплообменнике. Прил. Мягкий компьютер. 2023, 145, 110625. [CrossRef]
31. Шах, Дж.; Ван, В. Развивающийся нейро-нечеткий классификатор для диагностики неисправностей зубчатых систем. ИСА Транс. 2022, 123, 372–380. [Перекрестная ссылка] [ПабМед]
32. Йе, Ф.; Перретт, Дж.; Чжан, Л.; Лайли, Ю.; Ван, Ю. Саморазвивающаяся система для планирования последовательности разборки роботов в условиях неопределенного взаимодействия. Робот. Вычислить. Интегр. Производитель 2022, 78, 102392. [CrossRef]
33. Ахвиади, М.; Ван, В. Адаптивный развивающийся нечеткий метод прогнозирования динамических систем. IEEE Транс. Нечеткая система. 2021, 30, 841–849. [Перекрестная ссылка]
34. Кордовил, Л.; Коутиньо, П.; Бесса, И.; Пейшото, М.; Паларес, Р. Обучение управлению, инициируемому событиями, на основе развивающихся данных, управляемых данными. нечеткие гранулированные модели. Межд. J. Робастное нелинейное управление 2022, 32, 2805–2827. [Перекрестная ссылка]
35. Роша, М.; Алвес, К.; Кейруш, Э.; Оливейра, Ф.; Черт, М.; Агиар, Э. Тепловое моделирование силовых трансформаторов на основе модифицированной многопараметрической гауссианы с изменяющимся многомерным членством в множестве и эволюционирующей многопараметрической гауссианой с переменным размером шага. Дж. Контроль. Автомат. Электр. Сист. 2022, 33, 1044–1055. [Перекрестная ссылка]
36. да Силва Жуниор, Джорджия; Сильва, А. Простой и эффективный метод поэтапного вменения недостающих данных для развития нео-нечетких данных. сеть. Эвол. Сист. 2022, 13, 201–220. [Перекрестная ссылка]
37. Лугхофер, Э.; Пратама, М. Онлайн-последовательный ансамбль прогнозирующих нечетких систем. Эвол. Сист. 2022, 13, 361–386. [Перекрестная ссылка]
38. Гу, Х.; Шен, К. Самоадаптивная система нечеткого обучения для прогнозирования потоковых данных. Инф. наук. 2021, 579, 623–647. [Перекрестная ссылка]
39. Пратама, М.; Заин, К.; Лугхофер, Э.; Пардеде, Э.; Рахаю, Д.А. Масштабируемая сеть для учителей, обеспечивающая полуконтролируемые крупномасштабные потоки данных. Инф. наук. 2021, 576, 407–431. [Перекрестная ссылка]
40. Гу, Х. Многослойная ансамблевая развивающаяся система нечеткого вывода. IEEE Транс. Нечеткая система. 2020, 29, 24:25–24:31. [Перекрестная ссылка]
41. Шейкер А.; Хюллермайер, Э. TSK-Streams: Изучение нечетких систем TSK для регрессии потоков данных. Данные Мин. Знать. Дисков. 2021, 35, 1941–1971. [Перекрестная ссылка]
42. Ге, Д.; Цзэн, ХJ. Потоки данных обучения в режиме онлайн — развивающийся нечеткий системный подход с самообучающимися/адаптируемыми порогами. Инф. наук. 2020, 507, 172–184. [Перекрестная ссылка]
43. Джуниор, С.; Оливейра Серра, Дж. Интеллектуальное прогнозирование временных рядов на основе развивающейся распределенной нейро-нечеткой сети. Вычислить. Интел. 2020, 36, 1394–1413. [Перекрестная ссылка]
44. Алвес, К.; Черт, М.; Оливейра, Ф.; Агиар, Э. Расширенное совместное обучение с участием членов множества с использованием ядра рекурсивного метода наименьших квадратов, применяемого для теплового моделирования силовых трансформаторов. Электр. Система питания Рез. 2020, 184, 106334. [CrossRef]
45. Соарес, Э.; Ангелов П.; Гу, Х. Многомодельный классификатор нулевого порядка с автономным обучением для классификации тонов сердца. Прил. Мягкий компьютер. J. 2020, 94, 106449. [CrossRef]
46. Блажич С.; Скрянц, И. Инкрементная нечеткая кластеризация C-регрессии на основе потоковых данных для идентификации локальной модели и сети. IEEE Транс. Нечеткая система. 2019, 28, 758–767. [Перекрестная ссылка]
47. Чжао Дж.; Ян, Л.; Ван, Л.; Ван, В. Обобщенный гетерогенный нечеткий классификатор типа 2 и его промышленное применение. IEEE Пер. Нечеткая система. 2019, 28, 2287–2301. [Перекрестная ссылка]
48. Гарсия, К.; Эсмин, А.; Лейте, Д.; Шкрянц, И. Развивающиеся нечеткие системы из потоков данных с пропущенными значениями: с применением к распознаванию временных образов и прогнозированию криптовалюты. Распознавание образов. Летт. 2019, 128, 278–282. [Перекрестная ссылка]
49. Пирес, Д.; Серра, Г.О. Методология развития идентификации нечеткого фильтра Калмана. Межд. J. Управление автомат. Сист. 2019, 17, 793–800. [Перекрестная ссылка]
50. Шахпараст, Х.; Мансури, Э.; Джахроми, М. AFCGD: Адаптивный нечеткий классификатор, основанный на градиентном спуске. Мягкий компьютер. 2019, 23, 4557–4571. [Перекрестная ссылка]
51. Масиэль, Л.; Баллини, Р.; Гомид, Ф. Развитие нечеткого моделирования для прогнозирования кривой доходности. Межд. Дж. Экон. Автобус. Рез. 2018, 15, 290–311. [Перекрестная ссылка]
52. Саад, Х.; Иса, Н.; Ахмед, ММ; Саад, А. Устойчивый метод идентификации структуры развивающейся нечеткой системы. Экспертная система. Прил. 2018, 93, 267–282. [Перекрестная ссылка]
53. Заин, К.; Пратама, М.; Лугхофер, Э.; Фердаус, М.; Кай, К.; Прасад, М. Аналитика больших данных на основе PANFIS MapReduce. Процессия Вычислить. наук. 2018, 144, 140–152. [Перекрестная ссылка]
54. Андоновский Г.; Мушиц, Г.; Блажиц, С.; Шкрянц, И. Развивающаяся идентификация модели для мониторинга процессов и прогнозирования нелинейных систем. англ. Прил. Артиф. Интел. 2018, 68, 214–221. [Перекрестная ссылка]
55. Абдулла, С.; Аль-Хашми, А. ТиСЕФЕ: Развитие нечеткой системы временных рядов для классификации сетевого трафика. Межд. Ж. Коммун. Сеть. Инф. Безопасность. 2018, 10, 116–124. [Перекрестная ссылка]
56. Ху, З.; Бодянский Ю.; Тищенко О.; Бойко О. Адаптивное прогнозирование нестационарных нелинейных временных рядов на основе Развивающаяся взвешенная нейро-нео-нечеткая модель ANARX. arXiv 2016, arXiv:1610.06486.

Machine Translated by Google

57. Пратама, М.; Лу, Дж.; Анаватти, С.; Лугхофер, Э.; Лим, К. П. Инкрементальная нечеткая нейронная сеть, основанная на метакогнитивных способностях. Нейрокомпьютинг 2016, 171, 89–105. [Перекрестная ссылка]

58. Пратама, М.; Лу, Дж.; Лугхофер, Э.; Чжан, Г.; Анаватти, С. Классификатор лесов типа 2 для постепенного обучения при изменении концепций. Нейрокомпьютинг 2016, 191, 304–329. [Перекрестная ссылка]

59. Ализаде, С.; Калхор, А.; Джамалабади, Х.; Арарби, Б.; Ахмадабади, М. Локальный онлайн-выбор входных данных посредством развивающейся гетерогенной системы нечеткого вывода. IEEE Транс. Нечеткая система. 2016, 24, 1364–1377. [Перекрестная ссылка]

60. Масиэль, Л.; Гомиде, Ф.; Баллини, Р. Развитие подхода Fuzzy-GARCH для моделирования и прогнозирования финансовой волатильности. Вычислить. Экон. 2016, 48, 379–398. [Перекрестная ссылка]

61. Иглесиас, Дж.; Тьембло, А.; Ледезма, А.; Санчис, А. Интеллектуальный анализ веб-новостей в развивающейся среде. Инф. Фьюжн 2016, 28, 90–98. [Перекрестная ссылка]

62. Ахмед, ММ; Иса, Н. Развивающаяся нечеткая система выходного контекста для эффективной базы правил. Экспертная система. Прил. 2015, 42, 1972–1986. [Перекрестная ссылка]

63. Ахмед, ММ; Иса, Н. Модель детализации информации для развития контекстно-ориентированной нечеткой системы. Прил. Мягкий компьютер. Дж. 2015, 33, 183–196. [Перекрестная ссылка]

64. Лугхофер, Э.; Чернуда, К.; Киндерманн, С.; Пратама, М. Обобщенные интеллектуальные развивающиеся нечеткие системы. Эвол. Сист. 2015, 6, 269–292. [Перекрестная ссылка]

65. Моштаги, М.; Бездек Дж.; Леки, К.; Карунасекера, С.; Паланисвами, М. Развитие нечетких правил обнаружения аномалий в потоках данных. IEEE Транс. Нечеткая система. 2014, 23, 688–700. [Перекрестная ссылка]

66. Й.Е. Бодянский, А.; Винокурова О. Эволюционирующая вейвлет-нейро-нечеткая самообучающаяся система. Прил. Мягкий компьютер. 2014, 14, 252–258. [Перекрестная ссылка]

67. Хесус Рубио, Дж.; Перес-Круз, Дж. Развивающаяся интеллектуальная система для моделирования нелинейных систем с входом в мертвую зону. Прил. Мягкий компьютер. Дж. 2014, 14, 289–304. [Перекрестная ссылка]

68. Иглесиас, Дж.; Ледезма, А.; Санчис, А. Развивающаяся классификация поведения пользователей UNIX. Эвол. Сист. 2014, 5, 231–238. [Перекрестная ссылка]

69. Пратама, М.; Анаватти, С.; Лугхофер, Э. Генефис: На пути к эффективной местной сети. IEEE Транс. Нечеткая система. 2013, 22, 547–562. [Перекрестная ссылка]

70. Рамассо, Э.; Гуриво, Р. Оценка оставшегося срока полезного использования путем классификации прогнозов, основанных на нейро-нечеткой системе и теория функций доверия. IEEE Транс. Надежный. 2014, 63, 555–566. [Перекрестная ссылка]

71. Масиэль, Л.; Гомиде, Ф.; Баллини, Р. Расширенное развивающееся нечеткое моделирование с совместным обучением: приложение для прогнозирования волатильности доходности активов. Эвол. Сист. 2014, 5, 75–88. [Перекрестная ссылка]

72. Лемос, А.; Каминьяс, В.; Гомид, Ф. Адаптивное обнаружение и диагностика неисправностей с использованием развивающегося нечеткого классификатора. Инф. наук. 2013, 220, 64–85. . [Перекрестная ссылка]

73. Ордоньес, Ф.Дж.; Иглесиас, Дж.; Толедо, П.; Ледезма, А.; Санчис, А. Распознавание онлайн-активности с использованием развивающихся классификаторов. Экспертная система. Прил. 2013, 40, 1248–1255. [Перекрестная ссылка]

74. Тунг, С.; Квек, К.; Гуан, К. eT2FIS: развивающаяся система нейронного нечеткого вывода типа 2. Инф. наук. 2013, 220, 124–148. . [Перекрестная ссылка]

75. Калхор, А.; Арарби, Б.; Лукас, К. Развитие нечеткой модели Такаги-Сугено, основанной на переключении на соседние модели. Прил. Мягкий компьютер. Дж. 2013, 13, 939–946. [Перекрестная ссылка]

76. Заранди, М.; Хадаванди, Э.; Турксен, И. Гибридная нечеткая интеллектуальная агентная система для прогнозирования цен на акции. Межд. Дж. Интелл. Сист. 2012, 27, 947–969. [Перекрестная ссылка]

77. Ленг, Г.; Цзэн, XJ; Кин, Дж. Улучшенный подход к самоорганизации нечеткой нейронной сети, основанный на мерах сходства. Эвол. Сист. 2012, 3, 19–30. [Перекрестная ссылка]

78. Ласота, Т.; Телек, З.; Травински, Б.; Травински, К. Исследование развития нечетких систем eTS, применяемых к оценке недвижимости. Ж. -Многозначный журнал. Мягкий компьютер. 2011, 17, 229–253.

79. Иглесиас, Дж.; Ангелов П.; Ледезма, А.; Санчис, А. Развивающаяся классификация поведения агентов: общий подход. Эвол. Сист. 2010, 1, 161–171. [Перекрестная ссылка]

80. Ангелов П.; Кордон, А. Адаптивные логические датчики, основанные на развитии нечетких моделей. IEEE Транс. Сист. Мужик, Киберн. Часть Б. Киберн. 2009, 40, 529–539. [Перекрестная ссылка]

81. Фердаус, ММ; Дам, Т.; Алам, С.; Фам, Д.Т. X-Fuzz: развивающийся и интерпретируемый нейрофаззи-обучающийся для потоков данных. IEEE Транс. Артиф. Интел. 2024, 1–12. [Перекрестная ссылка]

82. Ян, Л.; Чжао, Т.; Се, Х.; Precup, RE OSSEFS: онлайновая полуконтролируемая ансамблевая нечеткая система для обучения потокам данных с помощью недостающие значения. Экспертная система. Прил. 2024, 255, 124695. [CrossRef]

83. Ху, Л.; Сюй, Х.; Рен, В.; Хан, М. Иерархическая развивающаяся нечеткая система: метод многомерных хаотических временных рядов Онлайн-предсказание. IEEE Транс. Нечеткая система. 2024, 32, 3329–3341. [Перекрестная ссылка]

84. Мэй, З.; Чжао, Т.; Гу, Х. Динамически развивающаяся нечеткая система для потокового прогнозирования данных. IEEE Транс. Нечеткая система. 2024, 1–14. [Перекрестная ссылка]

Отказ от ответственности/Примечание издателя: Заявления, мнения и данные, содержащиеся во всех публикациях, принадлежат исключительно отдельному автору(ам) и соавторам(ам), а не MDPI и/или редактору(ам). MDPI и/или редактор(ы) не несут ответственности за любой вред людям или имуществу, возникший в результате любых идей, методов, инструкций или продуктов, упомянутых в контенте.

Machine Translated by Google

computation

MDPI

Статья

Оценка динамики фактора психологической паники, Риск глюкозы и влияние эстрогена на модель рака молочной железы

Зараа Аамер 1 , Ширин Джавад 1, Белал Батиха 2, Али Хасан Али 3,4,*, Фирас Ганым 5 и Алина Альб Лупаш 6,*

1 факультет математики, научный колледж Багдадского университета, Багдад 10071, Ирак; zahraa.aamer1703a@sc.uobaghdad.edu.iq (ZA); shireen.jawad@sc.uobaghdad.edu.iq (SJ)
2 Факультет естественных наук и информационных технологий, математический факультет, Университет Джадара, Ирбид 21110, Иордания; b.bateha@jadara.edu.jo
3 Институт математики Дебреценского университета, Pf. 400, H-4002 Дебрецен, Венгрия
4 Исследовательский центр Университета Джадара, Университет Джадара, Ирбид 21110, Иордания
5 Факультет математики, Колледж наук, Университет Шарджи, Шарджа 27272, Объединенные Арабские Эмираты; fgahmed@sharjah.ac.ae
6 Факультет математики и информатики Университета Орадя, улица Университетов, 1, 410087 Орадя, Румыния
* Переписка: ali.hasan@science.unideb.hu (AHA); alblupas@gmail.com (AAL)

Аннотация: Заражение раком обычно вызывает у заболевших людей состояние ужаса. Изучение того, как избыток глюкозы, избыток эстрогена и тревога взаимодействуют, влияя на скорость размножения клеток рака молочной железы и на модель ответа иммунной системы, необходимо для разработки способов остановить распространение рака. В данной статье предлагается математическая модель для исследования влияния психологической паники, избытка глюкозы и избытка эстрогена на взаимодействие рака и иммунитета. Предложенная модель точно описана. Целью динамического анализа модели является выявление потенциальных мест равновесия. По данным анализа можно установить четыре положения равновесия. Анализ устойчивости показывает, что все точки равновесия последовательно демонстрируют устойчивость при определенных условиях. Транскритическая бифуркация возникает, когда за точку бифуркации принимается избыток глюкозы. Численное моделирование используется для подтверждения теоретического исследования, которое показывает, что психологическая паника, избыток глюкозы и избыток эстрогена могут вносить значительный вклад в распространение опухолей и слабость иммунной функции.

Цитирование: Аамер З.; Джавад, С.; Батиха, Б.; Али, АХ; Ганим, Ф.; Лупаш А.А. Оценка динамики фактора психологической паники, риска глюкозы и эстрогена Влияние на модель рака молочной железы. Расчет 2024, 12, 160. https://doi.org/10.3390/вычисление12080160

Академический редактор: Симеоне Марино

Поступила: 23 мая 2024 г.
Пересмотрено: 12 июля 2024 г.
Принято: 2 августа 2024 г.
Опубликовано: 8 августа 2024 г.

Копирайт: © 2024 авторов. Licensee MDPI, Базель, Швейцария. Эта статья находится в открытом доступе. распространяется на условиях и конположениями Creative Commons Atлицензия на распространение (CC BY) (https://cre-ativecommons.org/licenses/by/4.0/).

Ключевые слова: психологическая паника; риск глюкозы; эстрогенный эффект; модель рака молочной железы; анализ стабильности

1. Введение

Группа заболеваний, которые в совокупности называются раком, — это заболевания, при которых клетки бесконтрольно делятся с большей скоростью, чем здоровые клетки, и имеют потенциал метастазирования в другие части тела [1]. Данные показывают, что число смертей от рака в 2010 году составило примерно 8,2 миллиона человек. Ожидается, что уровень смертности от рака будет постоянно увеличиваться, что приведет к примерно 13 миллионам смертей к 2030 году [2]. Рак молочной железы является вторым по распространенности типом рака у женщин, уступая только раку кожи и многим другим. Чуть менее 12% женщин в течение жизни заболевают инвазивным раком молочной железы [3]. Существует три основных фактора риска рака молочной железы: генетические факторы (например, семейный анамнез), гормональный дисбаланс (а именно эстроген) и факторы окружающей среды (включая употребление алкоголя, неправильное питание, воздействие токсинов, курение и т. д.). [4]. Для изучения динамического поведения раковых клеток в присутствии различных стимулов на протяжении многих лет были разработаны многочисленные математические модели. Например, Дехингия и др. разработала математическую модель для оценки влияния ожирения на рост опухоли и иммунный ответ, рассматривая его как фактор риска в исследовании, демонстрирующем, что накопленный жир в организме человека, страдающего ожирением, в значительной степени способствует образованию опухолей, тем самым повыш

Machine Translated by Google

факторы, связанные с выживанием [5]. Повышение уровня эстрогена потенциально может ускорить скорость образования опухоли [6,7]. Сорофа и др. [8] оценили, как эстроген влияет на динамику нормальных иммунологических клеток и рака молочной железы. Результаты показали, что повышенный уровень эстрогена может замедлить развитие иммунной системы и ускорить возникновение опухоли.

Было продемонстрировано, что большая часть энергии для клеток рака молочной железы поступает в результате гликолиза, при котором глюкоза превращается в лактат для получения энергии на протяжении всего процесса гликолиза [9,10]. Многочисленные исследования подтвердили, что раковые клетки имеют высокую потребность в глюкозе как источнике питания. Поэтому эффект глюкозы включен в модель опухоли, чтобы оценить ее влияние на клетки рака молочной железы. Например, Сан и др. изучили влияние лишения глюкозы на апоптоз клеток рака молочной железы в исследовании, показавшим, что потребление чрезмерного количества глюкозы может способствовать развитию и пролиферации раковых клеток, тогда как ограничение потребления глюкозы может уменьшить и подавить рост раковых клеток [11]. Повышенное потребление глюкозы может привести к патологическому состоянию и нарушению функций иммунной системы. Однако поддержание достаточного количества глюкозы имеет решающее значение для функционирования иммунной системы. В результате проникновение значительного количества глюкозы в иммунные клетки может оказывать вредное воздействие на иммунную систему. Следовательно, это приводит к нарушению функциональности иммунной системы, что инициирует патологические состояния [12].
Альхарби и др. создали модель, которая предлагает фундаментальное понимание процесса рака молочной железы у пациентов, у которых уже есть факторы риска, связанные с гипергликемией. Они определили, что их результаты могут оказаться полезными для будущей доставки и лечения лекарств от рака молочной железы [13].

С другой стороны, все больше литературы подчеркивает использование математических моделей для исследования влияния тревоги на передачу заболеваний [14,15]. Исследования в области медицины показали, что эмоциональный стресс может ускорить метастазирование раковых клеток у пациента. Стресс на психологическом уровне расширяет и утолщает кровеносные сосуды, что, в свою очередь, ускоряет миграцию раковых клеток и облегчает распространение болезни [16].
Согласно недавним исследованиям, гормоны, вырабатываемые стрессом, ускоряют рост раковых клеток в «лимфатической системе», что, в свою очередь, облегчает распространение этих клеток в другие части тела — процесс, известный как метастазирование [17–19].

Подводя итог, большинство предыдущих исследований показали, что диета с высоким содержанием глюкозы и высокий уровень эстрогена могут способствовать росту и пролиферации клеток рака молочной железы, повышая вероятность быстрого прогрессирования заболевания. С другой стороны, влияние высоких уровней эстрогена и глюкозы на иммунную систему человека было предметом очень немногих исследований. Экспериментальные данные свидетельствуют о том, что иммунные клетки уязвимы к вредному воздействию как высокого, так и низкого уровня глюкозы в крови, а также высокого уровня эстрогена [8,20]. Более того, недостаточно исследований о влиянии тревоги на модель иммунных клеток и рака молочной железы. Поэтому мы должны исследовать это явление, поскольку оно играет роль в минимизации возникновения катастрофических ситуаций. Следовательно, это исследование сосредоточено на изучении влияния тревоги на больных раком с ослабленным иммунитетом, которая может служить существенным фактором пролиферации опухолей и снижения эффективности иммунной системы.

Целью данного исследования является изучение динамики модели «иммунные клетки – рак молочной железы» в результате совместного влияния фактора психологической паники, повышенного потребления глюкозы и высокого уровня эстрогена, а также их вредного воздействия на нормальные, раковые и иммунные клетки. . Учитывая эти эффекты, мы предлагаем модель PPIGCNE взаимодействия психологической паники, иммунитета, глюкозы, рака и нормального эстрогена. Результаты этой статьи обеспечивают дополнительный контекст для [8] благодаря

(1) Анализ влияния глюкозы как фактора риска на прогрессирование рака молочной железы.

(2) Изучение влияния психологической паники на иммунную систему больных раком молочной железы, которая может играть ключевую роль в прогрессировании злокачественных новообразований и нарушении иммунной функции.

Machine Translated by Google

После описания конструкции модели мы намерены определить, как вышеуказанные эффекты влияют на динамику модели PPIGCNE. Кроме того, в этой статье будет исследовано понимание нелинейной динамики, демонстрируемой нашей моделью, посредством использования различных методологий, включая методы анализа устойчивости и бифуркации. В заключение мы проверим точность наших аналитических выводов посредством численного моделирования предлагаемой системы.

2. Предположения модели

В этой части мы построим модель, объединив множество экспериментальных исследований и математических моделей [21–23], объясняющих динамику прогрессирования опухоли Сформулирована модель взаимодействия психологической паники, повышенного потребления глюкозы и высокого уровня эстрогенов. Динамика модели PPIGCNE существенно влияет на развитие рака молочной железы, что делает его существенным фактором риска. Кроме того, мы анализируем взаимодействие вышеупомянутых факторов с клетками опухоли молочной железы. Взаимосвязь между иммунными клетками ( ), раковыми клетками ( ), нормальными клетками (молочных желез) ( ) и эффектом эстрогена ( ) изображены на рисунке 1.

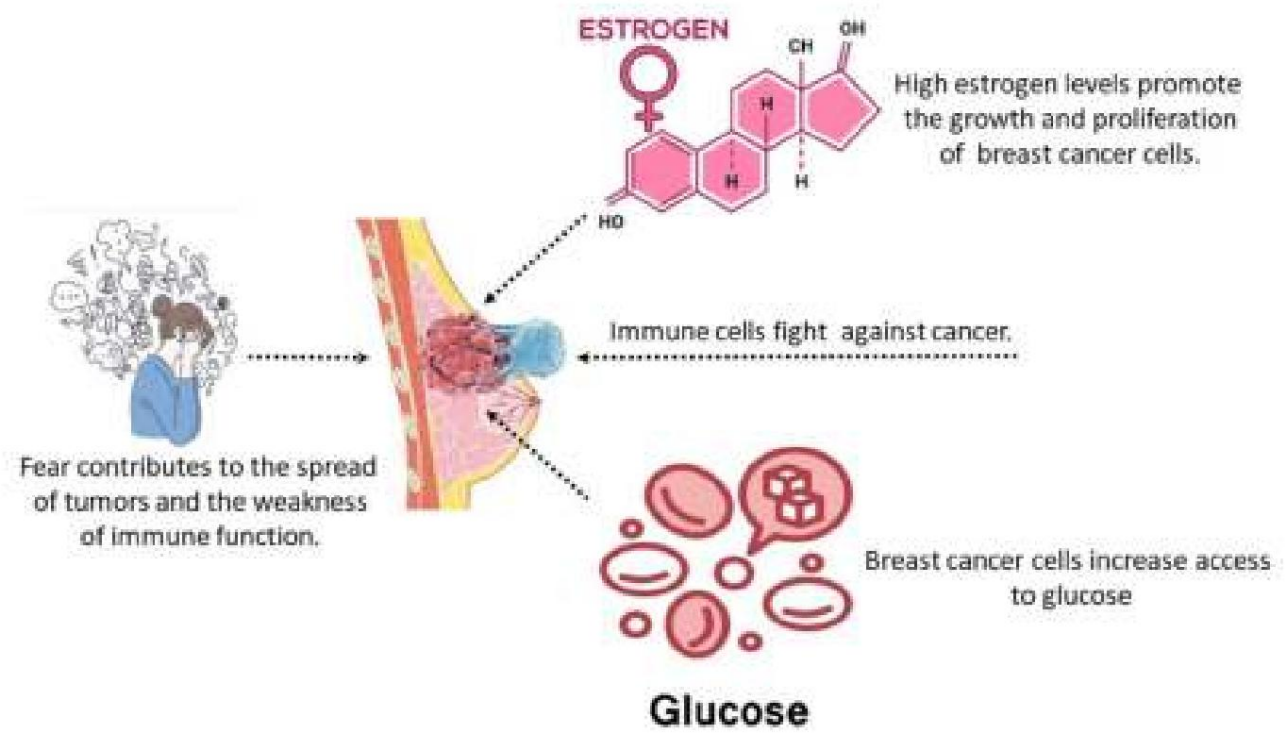


Рисунок 1. Схематическая схема модели PPIGCNE.

Реакция иммунной системы имеет решающее значение для защиты тканей молочной железы от злокачественных опухолей и обеспечения соответствующего ответа при распознавании опухолевых клеток. Присутствие опухолевых клеток стимулирует активацию иммунной системы. Динамическое представительство иммунных клеток

$$\frac{}{} = \frac{\Lambda}{1 +} + \frac{1}{1 +} \quad 2 \quad 3 \quad (+ \quad _1) . \tag{1}$$

Термин Λ (1 +/) обозначает последовательное образование иммунных клеток внутри организма, на которое негативно влияет психологический фактор страха при наличии рака. Функция страха интегрируется с использованием функции убывания), концепции, которую (,) знак равно 1 (1 +/ Wang et al. [24] впервые предложил. Учитывая его биологический последствия, (,) считается подходящим, поскольку

Machine Translated by Google

$$(0,) = 1, (, 0) = 1, \quad (,) = 0, \quad (,) = 0, \quad \frac{(,)}{} < 0, \frac{(,)}{} < 0.$$

В (1) 1 ⁄ (1 +), обозначаемый термином Михаэлиса-Ментен [25], указывает, что прес обозначает меру опухолевых клеток, вызывающих иммунный ответ [26]. 2 воздействие опухолевых клеток на иммунные клетки путем подавления иммунного ответа раковых клеток [26]. относится к скорости подавления иммунитета, вызванного эстрогеном [8]. (+) означает снижение количества иммунных клеток из-за избытка глюкозы и естественной смерти. ставка [13].

Клетки рака молочной железы T(t) состоят из аберрантных клеток, характеризующихся воспалением и быстрой пролиферацией клеток молочной железы, что приводит к образованию опухолей. Поэтому мы определяем уравнение, представляющее опухоль, как:

$$\frac{}{} = (1 -)- + . \quad (2)$$

Термин) представляет собой логистическую функцию роста опухолевых клеток, где представляет собой собственную скорость роста рака молочной железы и обозначает несущую способность клеток рака молочной железы. Термин 4 означает уничтожение раковых клеток иммунной системой организма. Результатом повреждения ДНК, вызванного эстрогеном, является то, что поврежденные нормальные клетки трансформируются в опухолевые клетки, в результате чего популяция опухолевых клеток увеличивается со скоростью 5% . Это приводит к фактору роста 5 в популяции опухолевых клеток [8]. 2 обозначает уровень смертности раковых клеток молочной железы. клеток из- указывает на образование нового рака за повышенного уровня глюкозы в организме пациента [13].

Здоровые клетки молочной железы обладают немодифицированной ДНК, которая управляет деятельностью всех клеток молочной железы во время их роста, деления и гибели [27]. Здоровые и злокачественные клетки молочной железы конкурируют за питание и другие ресурсы. Здоровые клетки молочной железы изображены

$$\frac{}{} = (1 -)- . \quad (3)$$

Термин (1 -) представляет собой логистическую функцию роста здоровых клеток молочной железы. Это срок представляет собой скорость деградации здоровых клеток молочной железы, вызванную опухолевыми клетками. Уменьшение здоровых клеток молочной железы из-за более высокого уровня эстрогена вызывает превращение нормальных клеток в опухолевые, что происходит со скоростью [8].

Эстроген, женский стероидный гормон, в небольших количествах вырабатывается плацентой у женщин и семенниками у мужчин. Он служит нескольким важным целям, включая содействие половому развитию, контроль менструального цикла женщины и управление физическими изменениями, связанными с половым созреванием. Поэтому он считается важнейшим гормоном для оптимальной трансформации тканей молочной железы. Эстроген признан фактором риска, связанным с развитием рака молочной железы. Эстроген играет роль в активации других гормонов, таких как релаксин, который, в свою очередь, стимулирует пролиферацию клеток молочной железы [28]. Эстроген способствует пролиферации опухолевых клеток при их наличии. Он действует как канцероген, повреждая ДНК и превращая нормальные эпителиальные клетки в раковые опухолевые клетки [29,30]. Динамику эстрогена можно описать следующ

$$\frac{}{} = . \quad (4)$$

где представляет скорость, с которой вырабатывается повышенное количество эстрогена, и скорость, с которой эстроген вымывается из системы организма. представляет

После тщательной оценки этих факторов мы предлагаем следующий набор дифференциальных уравнений для определения поведения клеток рака молочной железы:

Machine Translated by Google

$$\begin{aligned} \frac{dT}{dt} &= \frac{\Lambda}{1+I} + \frac{\rho_1 T}{1+I} - \mu_2 T - \alpha_3 T(I+\tau_1), \\ \frac{dI}{dt} &= \rho_1 T(1-\tau_1) - \mu_4 I + \alpha_5 C_2 I + \alpha_6 I, \\ \frac{dC_2}{dt} &= \rho_2 C_2(1-\tau_2) - \mu_6 C_2 - \alpha_7 C_2 I, \\ \frac{dG}{dt} &= \tau_3 I - \mu_G G. \end{aligned} \tag{5}$$

Параметры модели и их интерпретация пояснены в таблице 1.

Таблица 1. Интерпретация параметров модели PPIGCNE.

Параметр	Интерпретация	Ценности	Единица	Источник
Λ	Скорость производства иммунных клеток в организме.	0,5	(клеток/	[30]
I	Уровень психологической паники от рака.	0,1	день) безразмерный	Оцененный
ρ_1	Скорость высвобождения иммунных клеток раковыми клетками.	0,1	1/(клеток·день)	[30]
μ_2	Период полураспада эффекторных клеток	0,4	(день)	[30]
α_3	Скорость инактивации иммунных клеток вследствие воздействия опухолевых клеток.	0,2	1/(клеток·день)	[30]
τ_1	Скорость ингибирования иммунных клеток из-за высокого уровня эстрогена.	0,09	1/(мг/дл·день) 1/	[8]
μ_4	Скорость подавления иммунных клеток из-за высокого уровня глюкозы в крови.	0,2	(мг/дл·день)	[30]
α_5	Уровень смертности эффекторных клеток.	0,2	(клеток/	[30]
ρ_2	Собственная скорость роста рака молочной железы.	0,4	день) (клеток/	[8]
τ_2	Несущая способность клеток рака молочной железы.	1,5	день)	[8]
α_6	Скорость, с которой эффекторные клетки уничтожают опухолевые клетки.	0,2	(клетка) 1/	[30]
α_7	Скорость трансформации поврежденных нормальных клеток в опухолевые клетки, вызванная эстрогеном.	0,2	(клеток·день) 1/	[8]
μ_G	Уровень смертности клеток рака молочной железы.	0,05	(нг/мл·день)	[8]
ρ_G	Внутренняя скорость роста здоровых клеток молочной железы.	0,35	(клеток/	[8]
C_{2max}	Несущая способность здоровых клеток молочной железы.	1	день)	[8]
μ_6	Скорость деградации здоровых клеток молочной железы, вызванная опухолевыми клетками.	0,25	(клеток/день)	[30]
α_7	Уменьшение здоровых клеток молочной железы, вызванное более высоким уровнем эстрогена.	0,1	(клетка) 1/	[29]
τ_3	Скорость более высокой выработки эстрогена.	0,19	(клеток·день)	[8]
μ_G	Скорость вымывания эстрогена из организма.	0,05	1/(нг/мл·день) нг/мл/день нг/мл/день	[8]

3. Результаты динамической оценки

3.1. Положительность и ограниченность решения.

В следующих теоремах положительность и равномерно ограниченность всех решений модели PPIGCNE в $\mathbb{R}^4_+$ подтверждаются.

Теорема 1. Все решения модели PPIGCNE $T(t)$, $I(t)$, $C_2(t)$ и $G(t)$ с начальными условиями $(T(0), I(0), C_2(0), G(0))$ положительно инвариантны $\mathbb{R}^4_+$.

Доказательство теоремы 1. Пусть $\Omega = (T, I, C_2, G)$, и $\Omega(t) = [T(t), I(t), C_2(t), G(t)]$, где $\Omega(t)$: и $\mathbb{R}^4_+ \to \mathbb{R}^4_+$), $i = 1,2,3,4$. Тогда система PPIGCNE станет:

$$\frac{d\Omega}{dt} = \Omega_i(t),$$

с $\Omega(0) = (T(0), I(0), C_2(0), G(0)) = 0$. Ясно, что для любого $\Omega(0) \in \mathbb{R}^4_+$, такой, что $t = 0$, тогда $\Omega_i(t) \geq 0$ (при $i = 1,2,3,4$). Теперь для любого решения с $\Omega_0 \in \mathbb{R}^4_+$, скажем $\Omega(t) = \Omega(t; \Omega_0)$, таков, что $\Omega(t) \in \mathbb{R}^4_+$, для всех $t > 0$. Таким образом, система PPIGCNE положительно инвариант [31].

Теорема 2. Все решения модели PPIGCNE равномерно ограничены.

Доказательство теоремы 2. Пусть $(T(0), I(0), C_2(0), G(0)) \in \mathbb{R}^4_+$ быть начальным условием для PPIGCNE, тогда, используя метод Бернулли, получим

$$\frac{dC_2}{dt} = \rho_2 C_2(1-\tau_2) - \mu_6 C_2 - \alpha_7 C_2 I \leq \rho_2 C_2(1-\tau_2) - \mu_6 C_2 \leq \frac{1}{\tau_2 + (0)\, e^{-\rho_2 t}}$$

Таким образом,

$$\lim_{t \to \infty} \sup C_2(t) \leq \frac{1}{\tau_2}.$$

Machine Translated by Google

Используя стандартную теорию сравнения [32] для последнего уравнения PPIGCNE, получаем

$$\lim \quad [\ (\ )] \quad \overline{\ \ }_3$$

Из второго уравнения PPIGCNE имеем

$$\overline{\ \ } = \ _1 \ (1 - \ _1 \ )- \ _4 \ + \ _5 \ \ \ _2 \ + \ \ \ _1 \ \ \ _1 \ _1 \ ^2 + .$$

Используя метод Бернулли, получаем

$$(\ ) \quad \frac{\ _1 +}{\ _1 \ _1 \ \ \ \ \ + \ ) \ (0) \ (\ 1+ \ ) + (\ 1}$$

Таким образом,

$$\lim \quad [\ (\ )] \quad \frac{\ _1 +}{\ _1 \ _1}.$$

Теперь, используя стандартную теорию сравнения [32], получаем

$$\overline{\ \ } = \frac{\Lambda}{1 +} + \frac{1}{\ _1 +} \quad \ _2 \quad \ _3 \quad (\ + \ \ _1) \quad \Lambda - (\ + \ \ \ _1)$$

$$\lim \quad [\ (\ )] \quad \frac{\Lambda}{(\ + \ \ _1)}.$$

Следовательно, соответствующая доменная область для модели PPIGCNE:

$$= \{(\ , \ \ , \ , \ ) \quad ^4_+ : (\ ) \quad \frac{\Lambda}{(\ + \ \ _1)}, (\ ) \quad \frac{\ _1 +}{\ _1 \ _1}, (\ ) \quad \frac{1}{\ _2}, (\ ) \quad \overline{\ \ }_3\}.$$

3.2. Существование равновесий

Обнуление левой части модели PPIGCNE приведет к равновесию решений уравнений модели:

1. Точка равновесия без опухолей и клеток $= (\bar{\ }, 0,0, \ \ )$, где $\bar{\ } = \frac{\Lambda \ _3}{3 +(\ + 1 \ ) 3}$ и $= \overline{\ \ }_3$ молочной железы 1 . Важно отметить, что остается постоянным в течение выражение всех точек равновесия, в их составе.

2. Точка равновесия без опухолей $2 = (\hat{\ }, 0, \hat{\ }, \ \ )$, где $\hat{\ } = \frac{\Lambda s}{e3\mu 3+(g+\mu 1 \ )s}$, и $\hat{\ } = \frac{2 \ \ 73}{2 \ 2}$. Для $\hat{\ } > 0$, мы должны иметь

$$\ _2 > \frac{73}{} \tag{6}$$

С биологической точки зрения эта точка относится к здоровому случаю, поскольку опухоль исчезает, а иммунная система и нормальные клетки остаются. Это подтверждается следующим. Низкий уровень эстрогена приводит к тому, что среда опухоли становится неподходящей для роста, что способствует уничтожению раковых клеток иммунными клетками.

равновесия без клеток молочной железы 3 $= (\check{\ }, \check{\ }, 0, \ \ )$, где 3. Точка $\check{\ } = \frac{\ _1 \ 11 \ \ \ \ \

Machine Translated by Google

$(0) = {}_5,$

$( ) = ' \quad {}_{11}{}^{4} + {}_{21}{}^{3} + {}_{31}{}^{2} + {}_{41} + {}_5,$

$( ) = 4 \quad {}_1{}^{3} + 3 \quad {}_2{}^{2} + 2 \quad {}_3 + {}_4.$

Таким образом, если выполняется любой из следующих критериев, то $( )$ имеет единственный положительный корень, скажем $= \check{}$, в интервале (0, 1) согласно теореме о промежуточном значении

$$(0) > 0, (\quad {}_1) < 0 \text{ и } \quad ' ( ) < 0, \tag{7}$$

$$(0) < 0, (\quad {}_1) > 0 \text{ и } \quad ' ( ) > 0 \tag{8}$$

Для $\check{} > 0$, мы должны иметь

$$> {}_1, \tag{9}$$

где ${}_1 = 1(1 \quad 1) + {}_2$. С биологической точки зрения условие (9) означает, что эта точка классифицируется как риск глюкозы. Это связано с тем, что уровень глюкозы (г) выше скорости роста опухоли, что является фактором, приводящим к росту раковых клеток со скоростью, значительно превышающей скорость роста нормальных клеток. В результате распространения опухоли больная оказывается в тяжелом положении, что в конечном итоге приводит либо к мастэктомии, либо к смерти пациентки.

4. Сосуществующая точка $4 = (\quad , \quad , \quad , \quad *)$, где $= \frac{23 \quad 63 \quad - 7}{22}$, $=$

$\frac{1 \quad *2 + 2 \quad + 3}{4}$, и

${}_1 = {}_{1212},$

${}_2 = {}_{2\,2(1 + \quad 2)} + {}_{56},$

${}_3 = {}_{53(6} \quad 7)$, и является корнем следующего уравнения

$$( ) = {}_1{}^{5} + ({}_1 + {}_2){}^{4} + ({}_2 + {}_3){}^{3} + ({}_3 + {}_5){}^{2} + (\Lambda {}_4 + {}_4 + {}_5) + {}_4$$

где

${}_1 = {}_{21},$

$_2$ знак равно $-(1\,2 +)1 \quad \frac{3}{3} - (1 + 2) 2,$

${}_3 = 1(1 \quad {}_{13} \frac{}{3} \quad {}_1 \quad 1\,1) + 2(1\,1 \quad {}_{12} \quad {}_3 \frac{}{3} \quad 1) \quad {}_{23},$

${}_4 = \quad 3(1\,3 \frac{}{3} + \quad {}_1 + \quad 1),$

${}_5 = \quad 2(1\,3 \frac{}{3} + \quad {}_1 + \quad 1\,1) + 3(1 \quad {}_{12} \quad {}_3 \frac{}{3} \quad 1).$

Четко,

$(0) = {}_4 > 0$

$( ) = ' \quad {}_{511} + (+ 4(\quad {}_2) \quad {}_{41} + (+ 2 + \quad {}_3) \quad {}_{31} + ( ) {}_3 + \quad {}_5) \quad {}_{21} + \quad {}_4 + \quad {}_4 + \quad {}_5) \quad 1 +) \quad {}_4$

$( ) = 5 \quad {}_1{}^{4} \quad {}_{1} + \quad {}_2 \quad 3(\quad {}_2 + \quad {}_3{}^{3} \quad {}_2 + \quad {}_3{}^{2} + 2(\quad {}_3 + \quad {}_5 \quad (\Lambda) + (\Lambda {}_4 + \quad {}_4 + \quad {}_5 \cdot$

Таким образом, если выполняются следующие критерии, то $( )$ имеет единственный положительный корень, скажем $=$ в интервале (0, 1) согласно теореме о промежуточном значении

$$(\quad {}_1) < 0 \text{ и } \quad ' ( ) < 0, \tag{10}$$

Для > 0 и > 0, мы должны иметь

$$23 > \quad 63 \quad + \quad 7, \tag{11}$$

$$1 \quad {}_{2+} \quad {}_2 \quad + \quad {}_3 > 0. \tag{12}$$

Сосуществующая точка обозначает стадию взаимодействия иммунных клеток, злокачественных, нормальных и эстрогеновых. На этом этапе каждая клетка ведет ожесточенную борьбу за выживание. Появление опухоли запускает активацию иммунных клеток.

Machine Translated by Google

3.3. Анализ стабильности

Поведение локальной устойчивости вокруг предыдущих точек равновесия рассматривается в этот раздел. Матрицу Якоби модели PPIGCNE можно выразить следующим образом:

$$= \begin{bmatrix} \frac{1}{1} & \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \frac{1}{4} \\ \frac{2}{1} & \frac{2}{2} & \frac{2}{3} & \frac{2}{4} \\ \frac{3}{1} & \frac{3}{2} & \frac{3}{3} & \frac{3}{4} \\ \frac{4}{1} & \frac{4}{2} & \frac{4}{3} & \frac{4}{4} \end{bmatrix} = (\quad)_{4\times4},$$

где $_{11} = \frac{1}{(1+)}$ 2 3 (+ 1), $_{12} = \frac{\Lambda}{2(1+)} + \frac{_{11}}{(1+)}$ 2, $_{13} = 0$, $_{14} = {}_{3,21} = {}_{4,22} = {}_{1}$ 2 $_{11}$ 4 2 + , $_{23} = {}_{5,24} = {}_{5,31} = 0$, $_{32} = {}_{6,33} = {}_{2}$ 2 $_{22}$ 6 7, $_{34} = {}_{7,41} = {}_{42} = {}_{43} = 0$, $_{44} = {}_{3}$.

Локальный анализ системы PPIGCNE в трех упомянутых выше точках равновесия рассчитывается как

(1) Матрица Якобиана при $_{1} = (\bar{}, 0, 0,$) задается как:

$$(\ _{1}) = \begin{bmatrix} {}_{3} - (+ 1) & \frac{_{1}}{_{1}} 2 & 0 & {}_{3} \\ 0 & {}_{1} 4 2 + {}_{5} & 0 & \\ 0 & 0 & {}_{2} 7 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & {}_{3} \end{bmatrix}$$

Собственные значения $_{1}$) равны $= {}_{3}$ (+ 1) < 0, является $_{12} = {}_{1} 4 2 +$, $_{13} = {}_{2} 7$, (и $_{14} = {}_{3}$ 11 < 0. Тогда $_{1}$ локально асимптотической стабильной, если

$$_{2} < {}_{7}, \quad (13)$$

$$< {}_{2} \quad (14)$$

где $_{2} = {}_{4}\bar{} + {}_{2} + 1$. Условие (13) показывает, что мастэктомия может произойти, когда скорость уменьшения здоровых клеток молочной железы, вызванная более высоким уровнем эстрогена, превышает внутреннюю скорость роста здоровых клеток молочной железы. Кроме того, с биологической точки зрения условие (14) означает, что раковые клетки зависят от своей способности поглощать глюкозу и размножаться. Следовательно, уровень глюкозы ниже этого уровня будет существенно ингибировать раковые клетки, тем самым снижая их силу и способность к размножению и распространению. И наоборот, для > $_{2,1}$ седловая точка. Для = точка. $_{2,}$ затем ($_{1}$) имеет нулевое собственное значение, что делает 1 негиперболическим

(2) Матрица Якобиана при $_{2} = (\hat{}, 0, \hat{},$) задается как:

$$(\ _{2}) = \begin{bmatrix} {}_{3} & (+ 1) \Lambda + \frac{\hat{}}{_{1}} & \hat{} 2 & 0 & \hat{} 3 \\ 0 & {}_{1} 4 \hat{} \hat{} 2 + & {}_{5} \hat{} & {}_{5} \hat{} & \\ 0 & {}_{6} & {}_{2} 2 & {}_{22} 7 & 7 \\ 0 & 0 & 0 & {}_{3} \end{bmatrix}$$

Собственные значения ($_{2}$) являются

$_{21} = {}_{3}$ (+ 1) < 0, $_{22} + {}_{23} = (1 {}_{4}\hat{} \hat{} 2 + + {}_{2} 2 \hat{} 22 {}_{7}), \hat{} \hat{}$

$_{22.23} = 12 + {}_{2} 122 {}_{27} \hat{} {}_{24} 2 {}_{24} \hat{} + {}_{47} 22 + 2 {}_{222}$

$72 + {}_{2} 2 {}_{22} 7 {}_{56}$,

$_{24} = {}_{3} < 0.$

Machine Translated by Google

Это значит 2 является локально асимптотически устойчивой точкой тогда и только тогда, когда выполняются следующие условия:

$$< \quad _3 \qquad (15)$$
$$_{22.23} > 0\},$$

где $_3 = 2\ _{22}\ \hat{}\ +\ _7\ +\ _4\hat{}+\ _2\ (\ 1 + 2).$

(3) Матрица Якобиана при $_3 = (\check{},\check{}, 0, \quad)$ задается как:

$$(\ _3) = \begin{bmatrix} \frac{1}{1+} & \check{} & \check{} & \check{} \\ 2\ \ 3 - (+1) & \frac{\Lambda}{(1+\check{})^2} + \frac{1\ 1}{(1+\check{})^2} & 2\ \ 0 & 3 \\ \check{} & \check{} & \check{} & \check{} \\ 4 & 1\ 2\ 1\ 1 & 4\ 2+ & 3\check{} \\ 0 & 0 & 2\ \ 7 & 0 \\ 0 & 0 & 6\ 0 & 0\ _3 \end{bmatrix}$$

Затем, ($_3$) имеет следующие собственные значения

$$_{31} + \ _{32} = (\ 1\ _1 + \frac{\check{}}{\check{}} + \ _{22} + 2\ 1\ 1)\check{} + 2 + \ _1 + \ _1\ (\ _3 + \ _4\check{} + 2),$$

$$_{31.32} = (\ 1\ _1 + \frac{\check{}}{\check{}} \ _2\ \ _3\ 1)\ (\ 1\ 2\ 1\ 1\ \check{}\ _4\ \check{}\ 2 +) \frac{\Lambda\ _4}{(1+\check{})^2} + \frac{1\ 1\ 4}{(1+\check{})^2} + \ _{24}\ \check{\check{}},$$

$$_{33} = \ _2\ \ _6\ \ _7\ ,$$

$$_{43} = \ _3 < 0.$$

Это значит 3 является локально асимптотически устойчивой точкой тогда и только тогда, когда выполняются следующие условия:

$$_{31} + \ _{32} < 0, \text{ и } \ _{31.32} > 0, \qquad (16)$$

$$_2 > \ _6 + \ _7 \ . \qquad (17)$$

(4) Матрица Якобиана при $_4 = (\ ,\ ,\ ,\ )$ можно записать как:

$$(\ _4\ ) = \begin{bmatrix} _{11} & _{12} & 0 & _{14} \\ _{21} & _{22} & _{23} & _{24} \\ 0 & _{32} & _{33} & _{34} \\ 1 & 1 & 0 & 0 — \ _3 \end{bmatrix},$$

где

$$_{11} = \frac{1}{1+}\ \ _2\ \ _3 \qquad _{1,12} = \frac{\Lambda}{2(1+\ )} + \frac{1\ 1}{(1+*)^2}\ \ _2\ ,$$

$$_{14} = \ _3\ ,\ _{21} = \ _4\ ,\ _{22} = \ _1\ \ _2\ 1\ 1\ \ _4\ \ _2 + \ ,\ _{23} = \ _5\ ,$$

$$_{24} = \ _5\ ,\ _{32} = \ _6\ ,\ _{33} = \ _2\ \ _2\ 2\ 2\ \ _6\ \ _7\ ,\ _{34} = \ _7\ .$$

Итак, характеристическое уравнение ($_4$) можно записать как:

$$(\ _3\ )(\ ^3 + \ _1\ ^2 + \ _2 + \ _3) = 0, \qquad (18)$$

где = ($_{11}$

$_1$ + = 11(= 11($_{22}$ $_{22}$ + 33),

$_2$ $_{33}$ $_{23}$ + $_{32}$ $_{22}$ 11 33) $_{22}$ $_{33}$ + $_{23}$ $_{32}$,

$_3$ $_{23}$ $_{32}$),

= $_{1\ 2}$ $_3$ = (11 + 23 $_{22}$ + 33)[11($_{23}$ + $_{32}$ $_{22}$ $_{11}$ 33) $_{22}$ $_{33}$ + $_{23}$ $_{32}$]

(11($_{22}$ $_{33}$ $_{32}$)).

Machine Translated by Google

Таким образом, согласно правилу Рауса–Гурвица, 4 будет асимптотически устойчивым, если

$$_1 > 0, \quad _2 > 0 \text{ и } \quad > 0. \tag{19}$$

Чтобы достичь здорового состояния, мы изучим глобальную стабильность вокруг 2 изучить динамику системы PPIGCNE в регионах, далеких от точки равновесия 2 .

Теорема 3. $_2$ является глобальной асимптотической стабильной при выполнении следующих условий:

$$_2 \quad \{ \frac{^2_6}{_{11}}, \frac{4\ ^2_7}{3} \} \quad \}, \tag{20}$$

где $_4 =$ $\frac{\hat{} \quad \Lambda \quad ^2}{1+ \quad 1+ \quad 2\hat{})}$ $_3$ $_{1,} \frac{4\ ^2_3}{3}$ $_3$ $\{4(\ 1$ $11\}$.

Доказательство теоремы 3. Рассмотрим положительно определенную функцию, приведенную ниже:

$$= \frac{(\ )^2}{2} + + (\qquad \hat{}\ 1 \ln \tilde{}) + \frac{(-\ )^2}{2}.$$

Таким образом,

$$\frac{\Lambda}{} = (\frac{}{1+} + \frac{1}{1+} \quad 2\ )(-\hat{}) - \quad _3(- \quad *)(-\hat{}) - (-\hat{})2 \quad (\ _3 \quad + + \quad _1)$$

$$+ \quad _{11} \quad ^2 \quad _4 \quad + \quad _5 \quad (- * \tilde{}) + 6 \quad _5 \quad (-\hat{}) - \quad)\ _2 +$$

$$2\ 2(\quad)^2 \quad (-\hat{}) - \quad _7 \quad (-\hat{}) - (- \quad _3(- \quad *)^2$$

Поэтому,

$$\frac{}{} \quad \frac{}{+ +} \quad ^2$$

$$\frac{}{2} \quad ^1 \quad (\quad \hat{}) + \quad \frac{}{3_2}(-$$

$$[\ 3 \qquad \tilde{})]$$

$$\frac{}{2}(\quad \hat{}) + \quad 3\ \frac{}{2}(-$$

$$[\ 2\ 2 \qquad \tilde{})]$$

$$\frac{}{+ +} \quad \frac{}{}$$

$$\frac{}{2} \quad ^1 \quad (\quad \hat{}) + \quad 1\ \bar{1}$$

$$[\ 3 \qquad \qquad]2$$

$$\frac{}{2}(\quad \hat{}) + \quad 3\ \frac{}{2}(- \qquad + \quad _5 \quad (- \quad *\tilde{})$$

$$[\ 2\ 2 \qquad \tilde{})]$$

$$+ \quad _5 \quad *(-\hat{}) + - \qquad _4 \qquad ^2.$$

Тогда $\dot{V} \leq 0$ можно преобразовать в отрицательно определенную форму при условиях (20). Следовательно, – функция Ляпунова и $_2$ это ГАЗ.

Таким образом, устойчивое состояние без рака $_2$ удовлетворяет требованиям локальной стабильности, делая точку глобально стабильной. С биологической точки зрения под иммунной системой понимается процесс избирательного уничтожения опухолевых клеток при соблюдении условий (20).

Machine Translated by Google

3.4. Транскритическая бифуркация

Транскритическая бифуркация происходит, когда две точки равновесия сталкиваются и обмениваются своей устойчивостью. В следующих теоремах мы исследуем возможность возникновения транскритического расщепления. Многие ученые используют теорему Сотомайора для определения существования транскритической бифуркации ТВ, см., например, [31–38]. Для этого определения модель PPIGCNE можно перефразировать в следующих векторных формах:

$$\dot{} = ( ) \text{ с } = ( ) \text{ и } = \begin{pmatrix} 1(, , ,) \\ 2(, , ,) \\ 3(, , ,) \\ 4(, , ,) \end{pmatrix},$$

где $= 1,2,3,4$ — уравнения правой части системы PPIGCNE. У нас есть последующие результаты, касающиеся локальной бифуркации вокруг точки равновесия без клеток молочной железы 3 . Теперь для ненулевого вектора $= (\quad _{1,2,3,4})$:

$$^{2}(,) = \begin{bmatrix} 2\left[\frac{1}{2(1+)}\right]^{2} & 2]12 & 314 + [2\Lambda & \frac{2\ 11}{(1+)} & 3]2^{2} \\ 2\ 412 & 2\ 2112 + 2\ 534 & & & \\ 623 & 2\ 2223 & 2\ 734 & & \\ [& 0 & & &] \end{bmatrix},$$

Следующая теорема определяет ТВ модели PPIGCNE вблизи 3 .

Теорема 4. При $= ing$, модель PPIGCNE, в 3 имеет транскритическую бифуркацию, если условия выполнены

$$\begin{aligned} & {}^{2} = \\ & {}^{[1]}_{1} \quad \frac{11}{4} \\ & ( ) [2 \quad (\ _{3}, \ ^{*})(, \quad)] \quad 0\}. \end{aligned} \tag{21}$$

Доказательство теоремы 4. Модель PPIGCNE at имеет нулевое собственное значение, скажем 31 , в $=$, где можно рассчитать с помощью следующего уравнения:

$$31.32 = (1\ ^{1} + \quad 2 \quad 3 \quad 1)(1 \quad 2\ 11 \quad ^{4} \quad 2 +) \frac{\Lambda \ _{4}}{(1+)^{2}} + \frac{114}{(1+)^{2}} + \ _{24} = 0.$$

Здесь 31.32 определяется локальной устойчивостью 3 . Матрица Якобиана $^{*}(\ _{3}) = (\ _{3}, \quad)$, становится:

$$^{*}(\ _{3}) = \begin{bmatrix} 11 & \frac{\Lambda}{(1+)2(1+)2} + \frac{11}{} & 2 & 0 & 3 \\ 4 & 22 & 5 & 0 & \\ 0 & 0 & 2\ 6 & 7 & 0 \\ [0 & 0 & 0 & & 3] \end{bmatrix},$$

где $_{11} = \frac{1}{1+} \quad 2 \quad 3 \quad (\quad + \ 1)$ и $_{22} = \ _{1} \ 2\ 11 \quad ^{4} + \ 2$. Сейчас, пусть $= (1^{[1]}_{,2} \ ^{[1]}_{,3} \ ^{[1]}$, 4 [1]) и $= (1^{[1]}_{,2} \ ^{[1]}_{,3} \ ^{[1]}$, [1]) представляют собой собственные векторы соответствующее нулевому собственному значению оператора $(\ _{3})$ и $(\quad _{3})$, соответственно. Прямое вычисление ция дает $= (1 \ 2\ 1\ 1 \frac{^{4} + \ 2}{4}$, 1,0,0) и $= (1, 11 \quad \frac{5 \quad 11}{(2\ 6\ 7\ )4} \quad \frac{3}{3})$, где $2 \quad 6 \quad 7 \quad 0$. Тогда

Machine Translated by Google

$$= (,) = (1 \quad , \frac{2}{}, \frac{3}{}, \frac{}{4}) = (\quad , 0,0) .$$

Так, ($_3$,) = (ˇ, ˇ, 0,0) и, следовательно,

$$( ) \quad (_3, *) = (1, 1 \frac{}{4} \frac{5}{(2 \check{6} 7 *) 4} \frac{11}{3}) (\check{}, \check{}, 0,0) = \check{} + 11 \frac{\check{}}{4}$$

$$( ) [\quad (_3, *)] = (1, 11 \frac{}{4} \frac{5}{(2 \check{6} 7) 4} \frac{11}{3}) (\quad ^{[1]}_1, 1,0,0) = [1] + \frac{11}{\check{}4}$$

$$( ) [2 \quad (_3, *)(,)] \text{ знак равно } 2 ([3] \frac{(1 4)}{} 2) \quad ^{[3]}_{(2} \quad 4 + \quad 1 1)) + (2\Lambda \frac{^2}{(1+) 3} \quad \frac{^2}{(1+) 3}).$$

Следовательно, требования транскритической бифуркации выполняются при условии 21.

3.5. Численное моделирование и обсуждения

Численная проверка необходима для завершения аналитических исследований. В этом разделе мы визуально подтвердили точность наших аналитических результатов для системы PPIGCNE с помощью программного обеспечения MATLAB [39–44]. Моделирование проводилось с использованием значений параметров, указанных в таблице 1. Равновесные значения, соответствующие данным, приведенным в таблице 1, составляют = 1,74, = 0,541, = 0,37. См. рисунок 2.

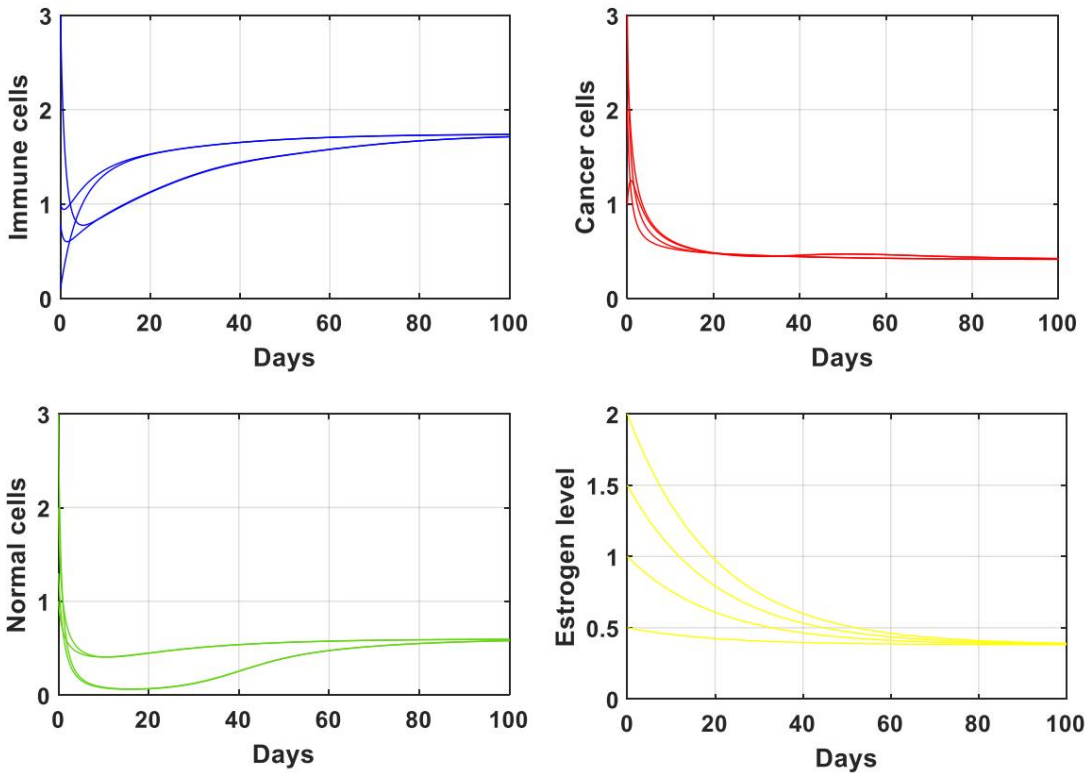


Рисунок 2. Решение системы PPIGCNE с данными представлено в таблице 1. Начальные состояния иммунных клеток, клеток рака молочной железы, нормальных клеток и уровень эстрогена: (0) = 0,25, 0,75,1,3,2,7 (клеток/нг), (0) = 0,8,1,4,1,6,2,4 (клеток/нг), (0) = 0,94, 0,84 (клеток/нг), 0,74,1,4, и (0) = 0,5, 1, 1,5, 2 нг/мл.

Теперь мы рассмотрим три сценария, чтобы понять динамическое поведение модели PPIGCNE и оценить влияние психологического страха, высокого уровня эстрогена и высокого уровня глюкозы на прогрессирование опухоли. Затем результаты трех случаев будут сравниваться. Следующие три случая:

Machine Translated by Google

а) Эффект психологической паники

Цель этого случая — продемонстрировать влияние уровня психологического страха на взаимодействие между иммунными клетками и клетками рака молочной железы. Рисунок 3 объясняет эффективность модели PPIGCNE при различных значениях уровня психологической паники от рака, т.е. Было обнаружено, что психологическая паника оказывает негативное влияние на эффективность иммунной системы. Повышенный стресс приводит к значительному снижению иммунных клеток. В результате опухолевые клетки растут быстрее. Несмотря на заметное снижение эффективности иммунной системы, модель PPIGCNE, несмотря на превышение уровней психологического страха, не достигла хаоса, но асимптотически приблизилась к сосуществующей точке 4 . Более того, на рисунке 4 показано более точное влияние психологического стресса на функциональность иммунных клеток, а также скорость роста и деления злокачественных клеток. Чтобы смягчить риски для здоровья, с которыми сталкиваются пациенты с раком молочной железы, необходимо психиатрическое лечение. Кроме того, необходимы некоторые внешние стратегии для улучшения работы иммунной системы.

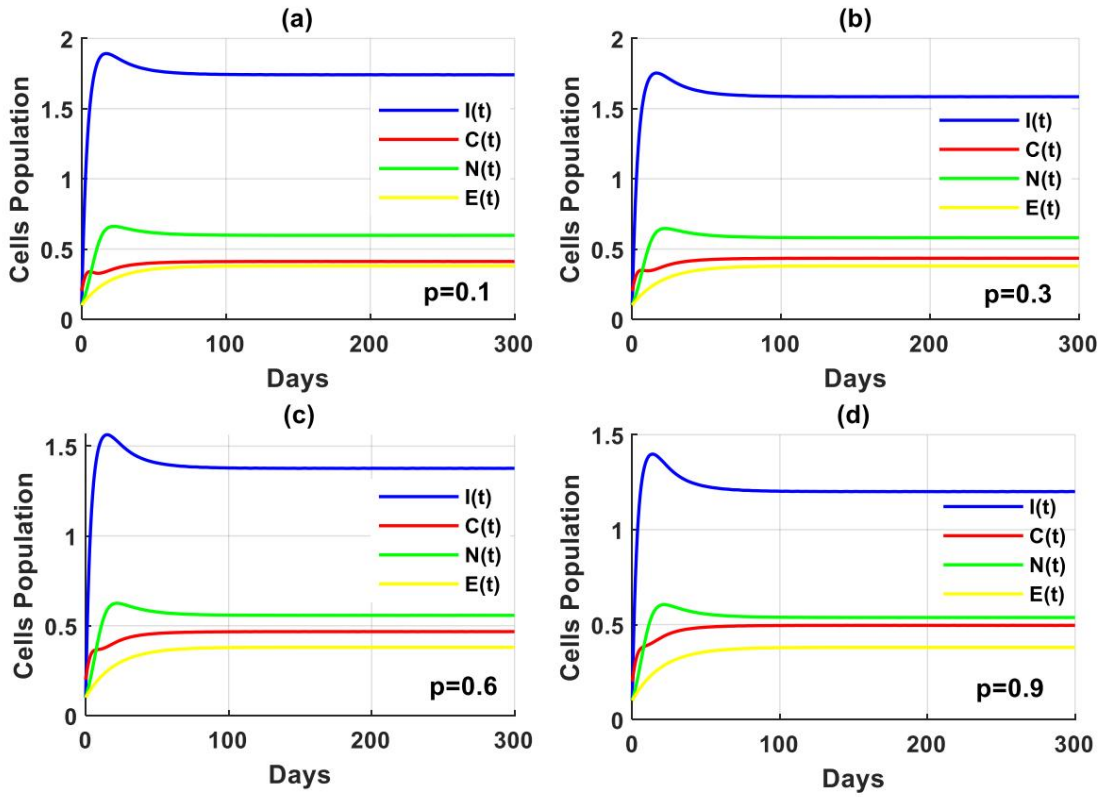


Рисунок 3. Решение системы PPIGCNE с различными значениями психологического страха и начальными состояниями иммунных клеток, клеток рака молочной железы, нормальных клеток и уровня эстрогена: (0) = 0,25 (клеток/нг), (0) = 0,3 (клеток/нг), (0) = 0,3 (клеток/нг) и (0) = 0,12 нг/мл.

Machine Translated by Google

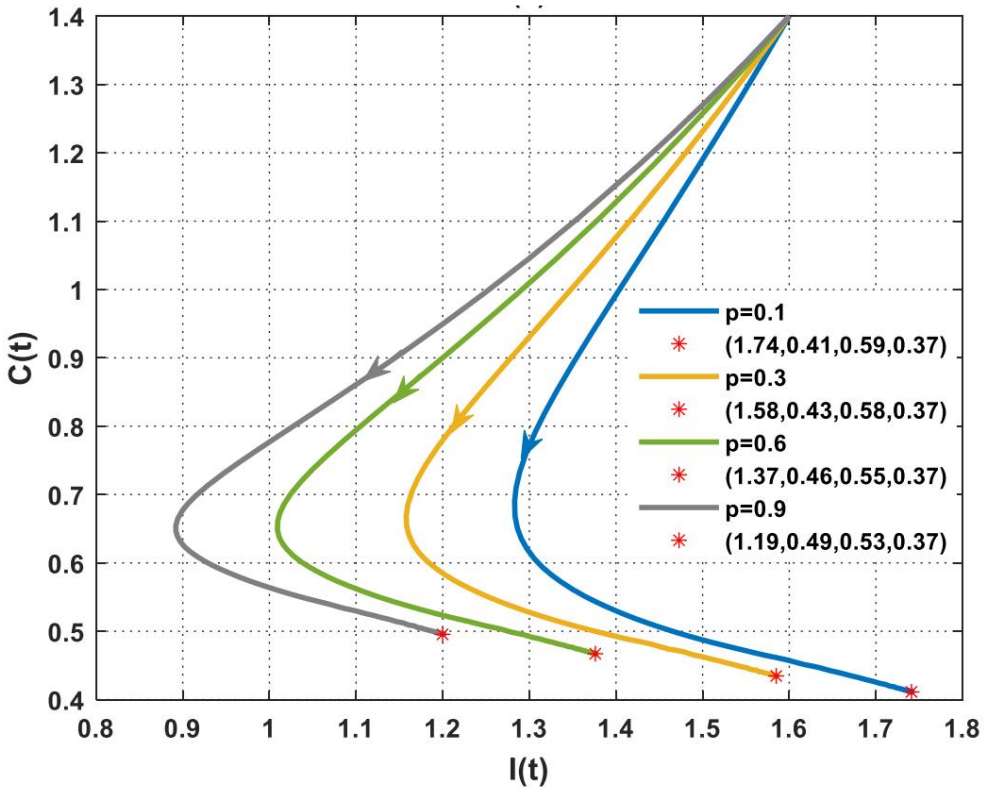


Рисунок 4. Динамика иммунных и раковых клеток при различных значениях и исходном состоянии иммунных клеток, клеток рака молочной железы, нормальных клеток и уровня эстрогена: (0) = 1,6 (клеток/нг), (0) = 1,4 (клеток/нг), (0) = 0,8 (клеток/нг) и (0) = 0,8 нг/мл. ( ) представляет конечное состояние решения, а число в скобках обозначает точку равновесия с различными значениями .

(б) Влияние избытка глюкозы. В

отсутствие опухолевых клеток наблюдалось воздействие избытка глюкозы, которое нарушало функциональность иммунной системы (рис. 5). Кроме того, решение системы PPIGCNE при различных значениях сначала испытывает рост, а затем асимптотически сходится к точке свободного рака 2 . Кроме того, наблюдалось значительное снижение количества иммунных клеток в присутствии опухолевых клеток, как показано на рисунке 6. Кроме того, раствор системы PPIGCNE вследствие избытка глюкозы попадает в клетки молочной железы-= (˘ , ˇ, 0,) = (0,51, 1,24, 0, 0,37) для 046 точка свободного равновесия 3 что система PPIGCNE сталкивается подтверждает результат теоремы 4, которая утверждает, . Этот результат с транскритической бифуркацией при параметре глюкозы = 0,46 (пожалуйста, см. рисунок 6). Вышеупомянутое в конечном итоге приводит либо к смерти пациентки, либо к мастэктомии. На основании полученных данных можно сделать вывод, что существует прямая корреляция между повышенным уровнем глюкозы и пролиферацией и скоростью деления раковых клеток. И наоборот, можно наблюдать обратную зависимость между повышенным уровнем глюкозы и реакцией иммунной системы на борьбу со злокачественными клетками. Пожалуйста, посмотрите на рисунок 7, чтобы лучше понять, что происходит, когда уровень глюкозы высок, как когда раковых клеток нет, так и когда они есть.

Machine Translated by Google

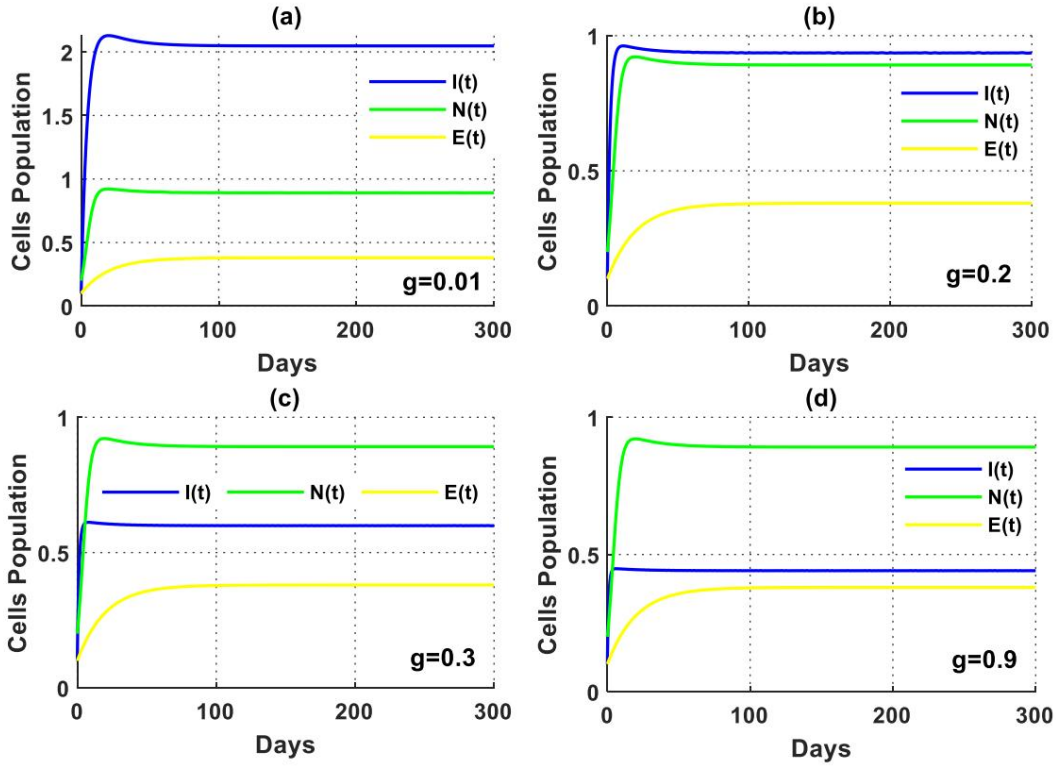


Рис. 5. Решение системы PPIGCNE в отсутствие опухолевых клеток с различными значениями и начальные состояния иммунных клеток, клеток рака молочной железы, нормальных клеток и уровня эстрогена составляют (0) = 0,25 (клеток/нг), (0) = 0,3 (клеток/нг) и (0) = 0,12 нг/мл.

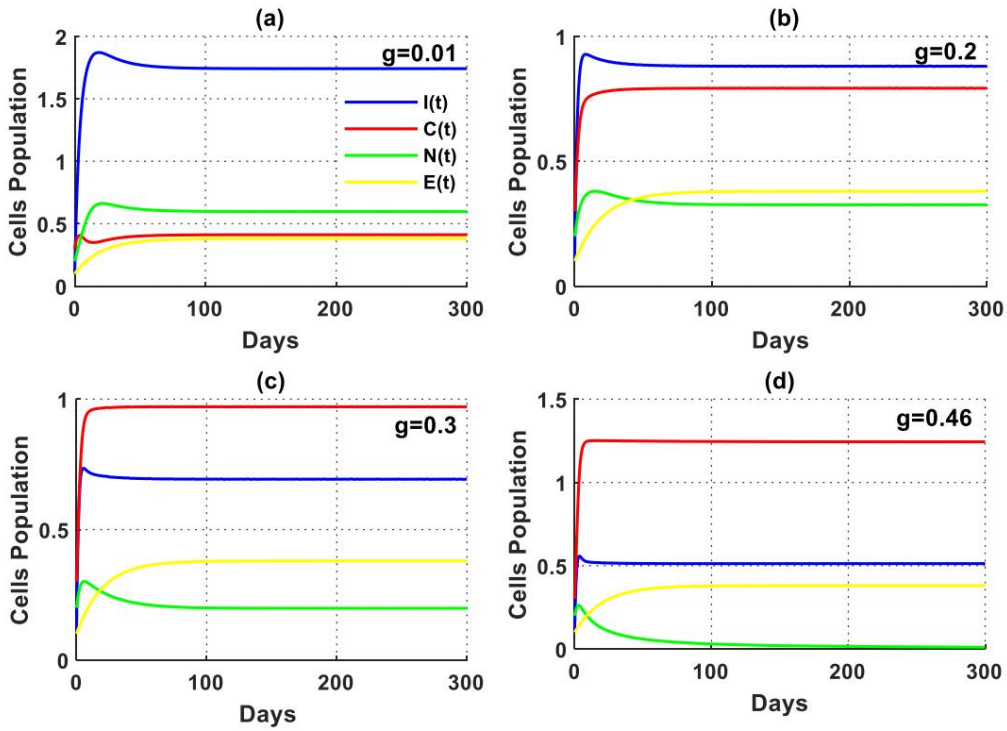
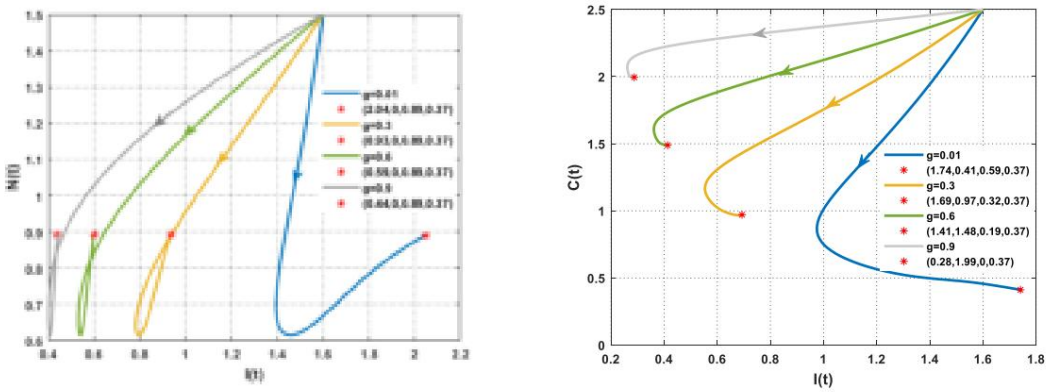


Рисунок 6. Решение системы PPIGCNE с различными значениями и начальными состояниями иммунных клеток, клеток рака молочной железы, нормальных клеток и уровнем эстрогена: (0) = 0,25 (клеток/нг), (0) = 0,3 (клеток/нг), (0) = 0,3 (клеток/нг) и (0) = 0,12 нг/мл.

Machine Translated by Google



(а) (б)

Рисунок 7. Производительность системы PPIGCNE при различных значениях . (а) Динамика иммунных и нормальных клеток в отсутствие опухолевых клеток с различными значениями и исходными условиями: (0) = 1,6 (клеток/нг), (0) = 1,4 (клеток/нг), (0) = 1,5 (клеток/нг) и (0) = 0,8 нг/мл. (б) Динамика иммунных и раковых клеток при различных значениях и начальных условиях:
(0) = 1,6 (клеток/нг), (0) = 2,4 (клеток/нг), (0) = 1,5 (клеток/нг) и (0) = 0,8 нг/мл.

(в) Влияние избытка эстрогена. В этом сценарии моделирование проводится путем изменения значений скорости более высокой продукции эстрогена как в отсутствие, так и в присутствии опухолевых клеток. В отсутствие опухолевых клеток раствор системы PPIGCNE асимптотически приближается к точке равновесия свободной опухоли 3 с различными значениями (см. рисунок 8). При наличии опухолевых клеток решение системы PPIGCNE сходится к сосуществующей точке 4 когда < 0,12. При 0,12 решение системы PPIGCNE принимает вид = (˘, ˘, 0,) = асимптотически к точке равновесия без клеток молочной железы (1,01, 3 0,41, 0, 2,59). См. рисунок 9. Численные решения в целом показали, что в присутствии избытка эстрогена количество иммунных и нормальных клеток уменьшается, причем больше всего страдают нормальные клетки (см. рисунок 10a), а опухолевые клетки растут (см. рисунок 10b).

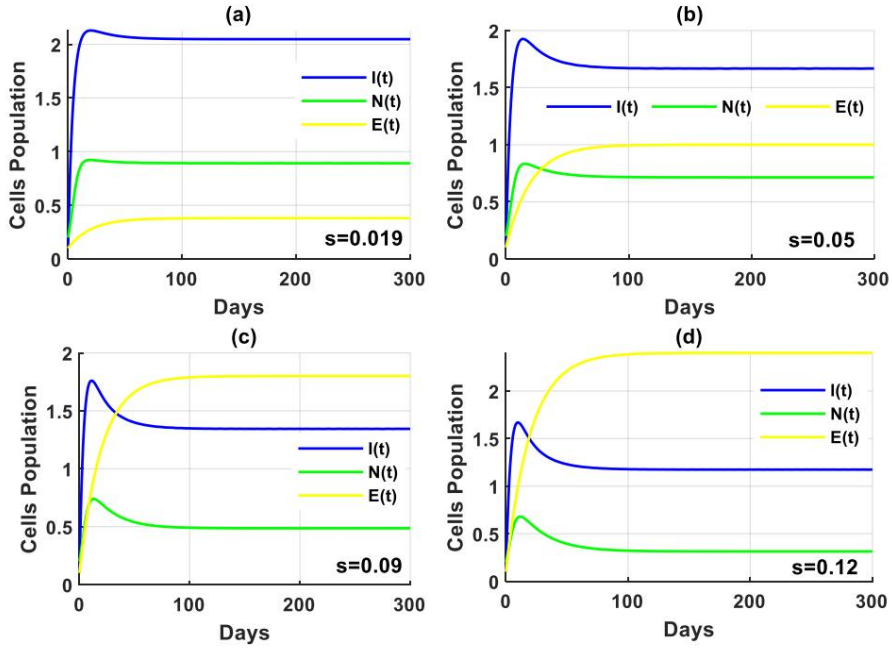


Рис. 8. Решение системы PPIGCNE в отсутствие опухолевых клеток с различными значениями и начальные состояния иммунных клеток, клеток рака молочной железы, нормальных клеток и уровня эстрогена составляют (0) = 0,25 (клеток/нг), (0) = 0,3 (клеток/нг) и (0) = 0,12 нг/мл.

Machine Translated by Google

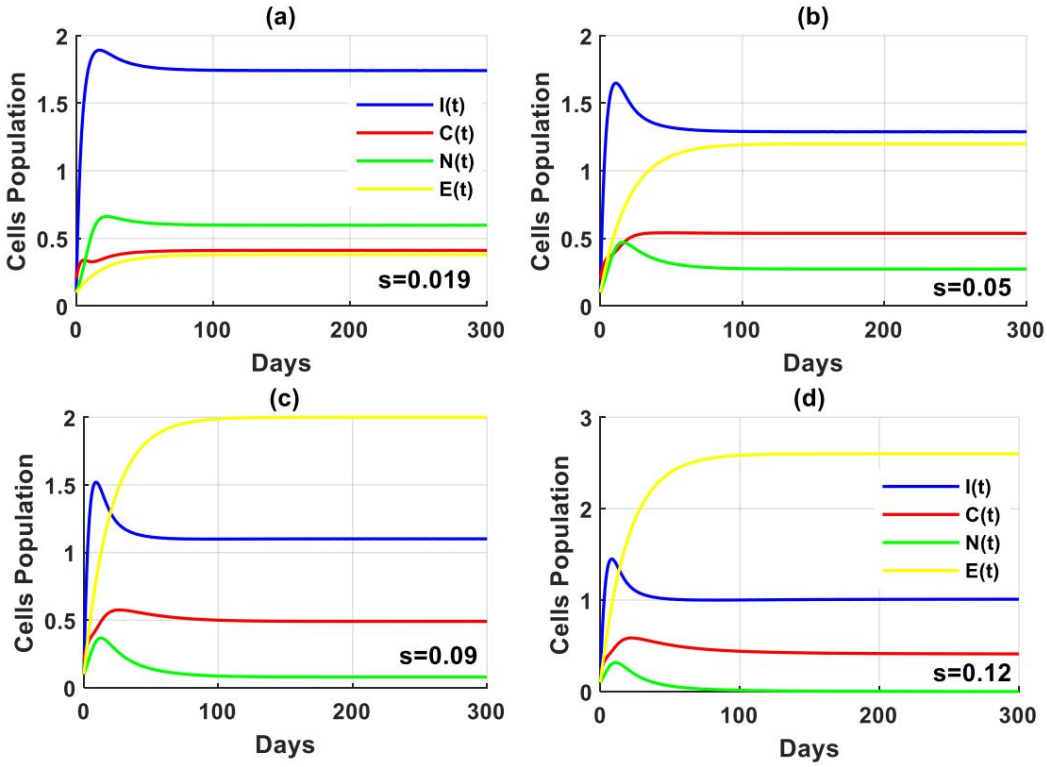
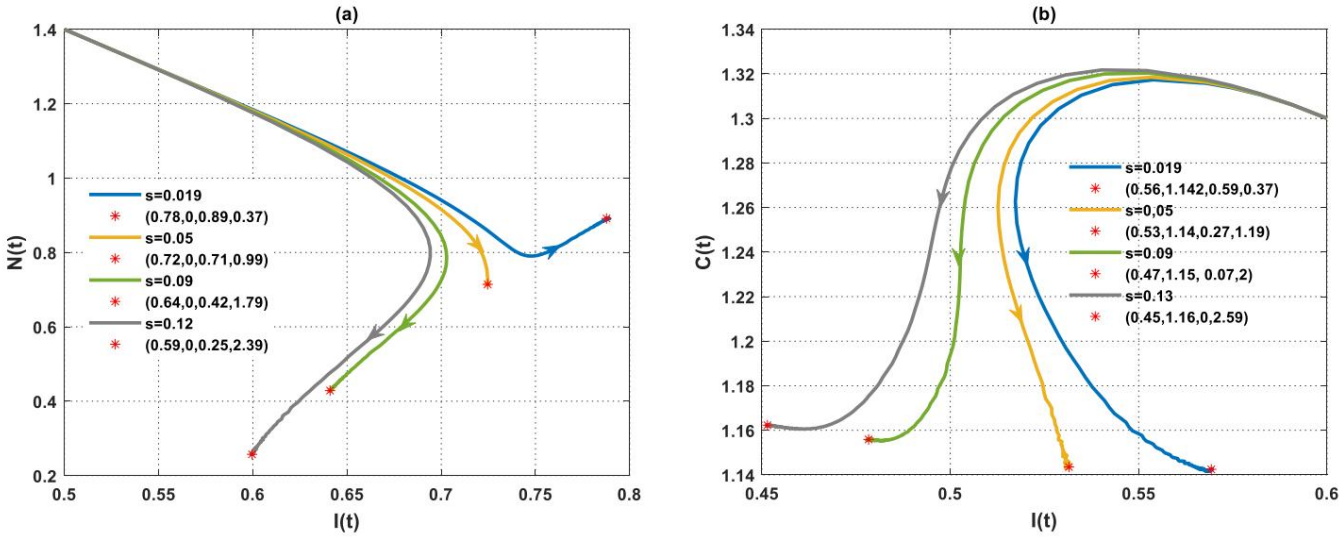


Рисунок 9. Решение системы PPIGCNE с различными значениями и начальными состояниями иммунных клеток, клеток рака молочной железы, нормальных клеток и уровнем эстрогена: (0) = 0,25 (клеток/нг), (0) = 0,3 (клеток/нг), (0) = 0,3 (клеток/нг) и (0) = 0,12 нг/мл.



(а) (б)

Рисунок 10. Производительность системы PPIGCNE при различных значениях . (а) Динамика иммунных и нормальных клеток в отсутствие опухолевых клеток с различными значениями и исходными условиями: (0) = 0,5 (клеток/нг), (0) = 1,4 (клеток/нг), (0) = 1,4 (клеток/нг) и (0) = 0,8.
нг/мл. (б) Динамика иммунных и раковых клеток при различных значениях и исходных условиях: (0) = 0,6 (клеток/нг), (0) = 1,3 (клеток/нг), (0) = 1,4 (клеток/нг). /нг) и (0) = 0,8
нг/мл.

Machine Translated by Google

Примечание 1. Биологическая интерпретация начальных значений, меньших единицы, в раковой системе, использованная на рисунках 2–10, относится к параметру, связанному с развитием или распространением раковых клеток, например скорости пролиферации или фактора роста. в математической модели. Если это начальное значение меньше единицы, деление клеток происходит медленнее, чем смерть раковых клеток. Первоначально это может означать менее агрессивный рак (и наоборот , если исходное значение больше единицы). Такая же интерпретация и для остальных переменных.

4. Выводы

Динамика рака молочной железы при наличии психологического страха, избытка глюкозы и избытка эстрогенов представлена в виде системы дифференциальных уравнений. Установлены положительность и ограниченность предложенной системы. Проиллюстрированы условия существования и локальная устойчивость возможных равновесий. Была изучена глобальная стабильность вокруг точки равновесия свободного рака молочной железы. Определен необходимый порог уровня глюкозы для достижения состояния здоровья. С точки зрения математики этот порог эквивалентен закритической бифуркации. Численное моделирование подтвердило аналитические выводы. А именно, было рассчитано пороговое значение транскритической бифуркации, указывающее точку, в которой нормальные клетки (клетки молочной железы) переходят от персистирующего состояния к эрадикации. Развитие рака молочной железы у человека зависит от способности иммунной системы бороться с опухолевыми клетками. Установлено, что обилие эстрогенов и глюкозы в организме приводит к нестабильности. Это говорит о том, что увеличение количества эстрогена и глюкозы приводит к более высокой скорости роста опухоли, тем самым способствуя развитию рака молочной железы. Можно предположить, что нерегулируемые уровни эстрогена и глюкозы могут привести к тому, что иммунная система будет неспособна эффективно бороться с раковыми клетками, что приведет к неспособности контролировать заболевание. Результаты этого исследования потенциально могут привести к разработке оптимального протокола терапии рака, который очень помож

Наши предстоящие исследования будут сосредоточены на укреплении иммунной системы посредством регулярного приема витаминов.

Вклад авторов: Концептуализация, ZA; Курирование данных, SJ; Формальный анализ, SJ; Приобретение финансирования, AAL; Расследование, ZA и BB; Методология, ZA и SJ; Администрация проекта, AHA; Ресурсы, ББ и ААЛ; Программное обеспечение, АГА; Надзор, ФГ; Валидация, ВВ и FG; Визуализация, АГА; Письменность — первоначальный вариант, ZA и SJ; Написание — рецензирование и редактирование, AHA, FG и AAL. Все авторы прочитали опубликованную версию рукописи и согласились с ней.

Финансирование: Публикация этого исследования была поддержана Университетом Оради.

Заявление Институционального наблюдательного совета: Неприменимо.

Заявление об информированном согласии: Не применимо.

Заявление о доступности данных: данные содержатся в статье.

Конфликты интересов: Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Ссылки

1. Абернати, К.; Абернати, З.; Бакстер, А.; Стивенс, М. Глобальная динамика модели конкуренции рака молочной железы. Отличие. уравнение Дин. Сист. 2020, 28, 791–805.
2. Всемирная организация здравоохранения. Глобальный план действий по профилактике неинфекционных заболеваний и борьбе с ними на 2013–2020 гг.; Мир Организация здравоохранения: Женева, Швейцария, 2013 г.
3. Тарвер Т. Американское онкологическое общество. факты и цифры о раке, 2014 г. J. Consum. Интернет-здоровье 2012, 16, 366–367. 4. Патель, М.; Нагл, С. Роль интеграции моделей в моделировании сложных систем: пример из биологии рака; Springer: Берлин/Гейдельберг, Германия, 2010 г.; ISBN 3642156037.
5. Дехингия, К.; Яо, Ю.-З.; Садри, К.; Дас, А.; Сармах, Гонконг; Зеб, А.; Inc, M. Исследование модели лечения рака и ожирения с помощью квадратичный оптимальный подход к управлению для достижения лучших результатов. Результаты Физ. 2022, 42, 105963.
6. Аль-Нахди, А.С.; Идрис, М. Нелинейная динамика эстроген-положительного рака молочной железы с интеграцией экспериментальных данных: новый подход пространственного моделирования. Математика. Биология. англ. 2023, 20, 21163–21186.
7. Мизяк П.; Баран, М.; Блащак, Э.; Пшибышевска-Подставка, А.; Калафут, Дж.; Смок-Калват, Дж.; Дмошиньска-Граничка, М.; Келбус, М.; Степулак, А. Передача сигналов эстрогеновых рецепторов при раке молочной железы. Раков 2023, 15, 4689.

Machine Translated by Google

8. Муфудза, Ч.; Сорофа, В.; Чияка, ЕТ Оценка влияния эстрогена на динамику рака молочной железы. Вычислить. Математика. Методы Мед. 2012, 2012, 473572.
9. Алмейда, Л.; Денис, Дж.А.; Ферран, Н.; Лоренци, Т.; Прунет, А.; Саббах, М.; Вилла, К. Эволюционная динамика раковых клеток, лишенных глюкозы: результаты экспериментально обоснованного математического моделирования. JR Soc. Интерфейс 2024, 21, 20230587.
10. Барбоза, АМ; Мартел, Ф. Нацеливание на транспортеры глюкозы для терапии рака молочной железы: эффект натуральных и синтетических соединения. Раки 2020, 12, 154.
11. Сан, С.; Сан, Ю.; Ронг, Х.; Бай, Л. Высокий уровень глюкозы способствует пролиферации и метастазированию рака молочной железы за счет нарушения ангиотензиногена. выражение. Биология. Отчет 2019, 39, BSR20190436.
12. Шомали Н.; Махмуди Дж.; Махмудпур, А.; Замири, Р.Э.; Акбари, М.; Сюй, Х.; Шоторбани, С.С. Вредное воздействие большого количества глюкозы на иммунную систему: обновленный обзор. Биотехнология. Прил. Биохим. 2021, 68, 404–410.
13. Олблоуи, А.Х.; Маан, Н.; Альхарби, С.А. Роль факторов риска глюкозы в развитии рака молочной железы человека: оценка нелинейной динамической модели. Математика 2022, 10, 3640.
14. Тритар, А.А.; Аббубакар, Х.; Хан, А.; Абдельджавад, Т. Математическое моделирование эпидемии COVID-19 с воздействием страха. ЦИМ Математика. 2023, 8, 6447–6465.
15. Доши, Д.; Карунакар, П.; Сухабоги, младший; Прасанна, Дж.С.; Махаджан, С.В. Оценка страха перед коронавирусом среди населения Индии с помощью страх перед масштабами COVID-19. Межд. Дж. Мент. Наркоман здоровья. 2021, 19, 2383–2391.
16. Вринтен, К.; МакГрегор, LM; Генрих, М.; фон Вагнер, К.; Уоллер, Дж.; Уордл, Дж.; Блэк, ГБ. Чего люди боятся по поводу рака? Систематический обзор и метасинтез страхов рака среди населения в целом. Психоонкология 2017, 26, 1070–1079.
17. Никнамян, С. Влияние стресса, тревоги, страха и депрессии на причину рака у людей. Являюсь. Дж. Биомед. наук. Рез. 2019, 3, 363–370.
18. Гормли, М.; Кнобф, Монтана; Фордерштрассе, А.; Ауизерат, Б.; Хаммер, М.; Флетчер, Дж.; Д'Эрамо Мелкус, Г. Изучение влияния геномного тестирования на страх рецидива рака среди людей, переживших рак молочной железы. Психоонкология 2021, 30, 1322–1331.
19. Лебель С.; Томей, К.; Фельдштейн, А.; Битти, С.; МакКаллум, М. Предсказывает ли страх рецидива рака медицинскую помощь людям, пережившим рак? использовать? Поддерживать. Care Cancer 2013, 21, 901–906.
20. Фон Ах Морано, А.Е.; Дорнелес, врач общей практики; Перес, А.; Лира, Ф.С. Роль гомеостаза глюкозы в иммунной функции в ответ на физическую нагрузку: влияние условий низкой или высокой энергии. Дж. Клеточная Физиол. 2020, 235, 3169–3188.
21. Джавад, С.; Зима, М.; Рахман, З.-АСА; Аль-Ясир, YIA; Зеб, А. Динамическое поведение модели роста рака с Химиотерапия и укрепление иммунной системы. Математика 2023, 11, 406.
22. Тан, Т.-Ц.; Шах, З.; Бонья, Э.; Ян, Р.; Шутайви, М.; Алрешиди, Н. Моделирование и анализ рака молочной железы с побочными реакциями химиотерапии с помощью дробной производной. Вычислить. Математика. Методы Мед. 2022, 2022, 5636844.
23. Альхарби, С.А.; Рамбели, А.С. Новая модель на основе ОДУ для конкуренции опухолевых клеток и иммунной системы. Математика 2020, 8, 1285.
24. Ван Х.; Занетт, Л.; Цзоу, Х. Моделирование эффекта страха во взаимодействиях хищник-жертва. Дж. Математика. Биол. 2016, 73, 1179–1204.
25. Кузнецов В.А.; Макалкин И.А.; Тейлор, Массачусетс; Перельсон А.С. Нелинейная динамика иммуногенных опухолей: параметр оценка и глобальный бифуркационный анализ. Бык. Математика. Биол. 1994, 56, 295–321.
26. Де Пиллис, Л.Г.; Радунская А. Математическая модель опухоли с иммунной резистентностью и лекарственной терапией: оптимальный подход к контролю. Вычислить. Математика. Методы Мед. 2001, 3, 79–100.
27. Гейтенби, Р.А. Потенциальная роль метаболических изменений, вызванных трансформацией, во взаимодействии опухоль-хозяин. Рак Рез. 1995, 55, 4151–4156.
28. Абдулкреам Альхарби, С.; Дехингия, К.; Джахман Алькарни, А.; Алсулами, М.; Аль Карни, А.А.; Дас, А.; Хинсал, Э. Исследование ODE- на основе модели риска рака молочной железы с массой тела. Прил. Математика. наук. англ. 2023, 31, 2259059.
29. Уифки, Р.; Оке, С.И. Математическая модель эстрогенового парадокса при лечении рака молочной железы. Дж. Математика. Биол. 2022, 84, 28.
30. Дас, А.; Дехингия, К.; Рэй, Н.; Сармах, Х.К. Анализ стабильности таргетной модели химиотерапии и рака. Математика. Модель. Контроль 2023, 3, 116–126.
31. Саху, Б.; Пориа, С. Модель больного хищника-жертвы с общими взаимодействиями типа Холлинга. Прил. Математика. Вычислить. 2014, 226, 83–100.
32. Хаббард, Дж. Х.; Уэст, Б.Х. Дифференциальные уравнения: подход динамических систем: обыкновенные дифференциальные уравнения; Спрингер: Берлин/Гейдельберг, Германия, 2013 г.; Том 5.
33. Алебрахим, Дж.; Ибрагим, TQ; Ариф, генеральный директор; Хамди, А.А.; Базигифан, О.; Али, А.Х. Стабилизирующий эффект иммиграции мелких жертв о конкурентной динамике хищник-жертва. Математика. Вычислить. Модель. Дин. Сист. 2024, 30, 605–625.
34. Ахмед, М.; Джавад, С. Бифуркационный анализ роли хороших и плохих бактерий в разложении токсинов в кишечнике под влиянием добавок антибиотиков и пробиотиков. В материалах конференции AIP; Издательство AIP: Мелвилл, Нью-Йорк, США, 2024 г.; Том 3097.
35. Бассим, ВБ; Салем, Эй Джей; Али, А.Х. Новое аналитическое исследование динамических систем «добыча-хищник», включающее эффекты скрытности. и - Улучшение навыков побега и хищничества. Оптимизация контроля результатов. 2024, 16, 100449.
36. Тритар, А.А.; Джавад, С.; Маджид, С.Дж.; Нисар, К.С. Влияние ветровых потоков и глобального потепления в динамике добычи-хищника модель. Оптимизация контроля результатов. 2024, 15, 100424.
37. Джавад, СР; Аль Нуайми, М. Анализ устойчивости и бифуркаций между взаимодействиями четырех видов под влиянием конкуренция, хищничество и сбор урожая. Иракский журнал научных исследований. 2023, 64, 1369–1390.
38. Хасан, СК; Джавад, С.Р. Влияние взаимного взаимодействия и сбора урожая на модель пищевой цепи. Иракский журнал научных исследований. 2022, 63, 2641–2649.

Machine Translated by Google

39. Тритар, А.А.; Джавад, С.; Шах, К.; Абдельджавад Т. Как освещение в СМИ влияет на модель пандемии COVID-19 с прямым и непрямая передача? Дж. Математика. Вычислить. наук. 2024, 35, 169–181.
40. Али, А.; Джавад, С. Анализ стабильности истощения растворенного кислорода для модели фитопланктон-зоопланктон в водной среде. среда. Иракский журнал научных исследований. 2024, 65, 2736–2748.
41. Мондаль, Б.; Тритар, А.А.; Ск, Н.; Алькуда, Массачусетс; Абдельджавад, Т. Сложная динамика в двухвидовой системе с Кроули-Функция ответа Мартина: роль сотрудничества, дополнительной еды и сезонных возмущений. Математика. Вычислить. Симул. 2024, 221, 415–434.
42. Пахира Р.; Мондаль, Б.; Тритар, А.А.; Алькуда, Массачусетс; Абдельджавад, Т. Разработка расчета стоимости выбросов углерода на основе нечеткой логики. встроенная модель инвентаря с эффектами памяти. Айн Шамс англ. Дж. 2024, 15, 102746.
43. Тритар А.А. Математическое моделирование растительно-травоядного сообщества с дополнительным воздействием пищи на окружающую среду. Иракский журнал научных исследований. 2023, 64, 3551–3566.
44. Ск, Н.; Мондаль, Б.; Тритар, А.А.; Алькуда, Массачусетс; Абдельджавад, Т. Бистабильность и тристабильность в детерминированной модели жертва-хищник: переходы и возникающие закономерности в ее стохастическом аналоге. Фракталы Солитонов Хаоса 2023, 176, 114073.

Отказ от ответственности/Примечание издателя: Заявления, мнения и данные, содержащиеся во всех публикациях, принадлежат исключительно отдельному автору(ам) и участникам(ам), а не MDPI и/или редактору(ам). MDPI и/или редактор(ы) не несут ответственности за любой вред людям или имуществу, возникший в результате любых идей, методов, инструкций или продуктов, упомянутых в контенте.