Machine Translated by Google

Enzyklopädie

Autor und Herausgeber

Elzein Salah Elzein

IEEE-Mitglied

- Beiträge zum Thema Informatik

IEEE Publisher, Großbritannien



Dieser Inhalt ist vertraulich

Machine Translated by Google

Berechnung

MDPI

Artikel

Quantifizierung der gesundheitsökonomischen Kompromisse: Mathematisch Modell der Dynamik der COVID-19-Pandemie

Dhika Surya Pangestu[1], Sukono 2,*, Nursanti Anggriani[2] und Najib Majdi Yaacob 3

[1] Mathematik-Postgraduiertenprogramm, Universitas Padjadjaran, Sumedang 45363, West-Java, Indonesien;
[2] dhika17001@mail.unpad.ac.id Fachbereich Mathematik, Fakultät für Mathematik und Naturwissenschaften, Universitas Padjadjaran, Sumedang 45363,
[3] West-Java, Indonesien; nursanti.anggriani@unpad.ac.id Biostatistics and Research Methodology Unit, School of Medical Sciences, Universiti Sains Malaysia Health Campus, Kubang Kerian 16150, Kelantan, Malaysia; najibmy@usm.my * Korrespondenz: sukono@unpad.ac.id

Zusammenfassung: Die COVID-19-Pandemie hat eine komplexe Situation geschaffen, die ein Gleichgewicht zwischen Kontrollmaßnahmen wie Ausgangssperren und Lockerungen der Beschränkungen erfordert. Kontrollmaßnahmen können die Ausbreitung des Virus begrenzen, aber auch wirtschaftliche und soziale Probleme verursachen. Lockerungen der Beschränkungen können die wirtschaftliche Erholung unterstützen , aber das Risiko einer Virusübertragung erhöhen. Mathematische Ansätze können helfen, diese Kompromisse zu schließen, indem sie die Wechselwirkungen zwischen Faktoren wie Virusübertragungsraten, öffentlichen Gesundheitsmaßnahmen und wirtschaftlichen und sozialen Auswirkungen modellieren. Eine Studie mit einem Modell für Anfällige-Infizierte-Anfällige (SIS) mit modifizierter diskreter Zeit wurde durchgeführt, um die Kosten für den Umgang mit COVID-19 zu ermitteln. Die Ergebnisse zeigten, dass ohne staatliche Intervention die Zahl der von Gesundheitseinrichtungen abgewiesenen Patienten und die Kosten für den Umgang mit einer Pandemie erheblich anstiegen. Die Lockdown-Intervention führte im Vergleich zur sozialen Distanzierung zu der geringsten Zahl abgewiesener Patienten, aber die Kosten für den Umgang mit der Pandemie im Lockdown-Szenario blieben höher als die der sozialen Distanzierung. Diese Forschung zeigt, dass mathematische Ansätze helfen können, kritische Momente in einer Pandemie zu identifizieren, wie z. B. begrenzte Kapazitäten des Gesundheitssystems oder hohe Übertragungsraten, die eine schnelle Reaktion und geeignete Maßnahmen erfordern. Durch den Einsatz mathematischer Analysen können Entscheidungsträger wirksamere und reaktionsschnellere Strategien entwicke

Schlüsselwörter: Pandemie; Behandlungskosten; epidemiologische Modelle; Trade-off-Modelle

check for updates

Zitat: Pangestu, DS; Sukono; Anggriani, N.; Yaacob, NM Quantifizierung der Gesundheitsökonomie Kompromisse: Mathematisches Modell von Dynamik der COVID-19-Pandemie. Berechnung **2024,** 12, **139. https:// doi.org/ 10.3390/computation12070139**

Wissenschaftliche Herausgeber: Babak Shiri und Zahra Alijani

Empfangen: 11. Mai 2024
Überarbeitet: 21. Juni 2024
Akzeptiert: 28. Juni 2024
Veröffentlicht: 8. Juli 2024

Copyright: © 2024 bei den Autoren. Lizenznehmer MDPI, Basel, Schweiz.

Dieser Artikel ist ein Open Access-Artikel vertrieben unter den Bedingungen und Bedingungen der Creative Commons Namensnennungslizenz (CC BY) (https:// creativecommons.org/licenses/by/ 4.0/).

1. Einleitung

In der Geschichte der Pandemien gab es mehrere große Pandemien, die Millionen von Menschen auf der ganzen Welt betrafen. Zu den wichtigsten Pandemien der Geschichte zählt die Beulenpandemie von 1331–1353. Diese Pandemie verbreitete sich weltweit und tötete über 75 Millionen Menschen, also etwa 30 % der **damaligen Weltbevölkerung [1]. Der Spanischen Pandemie von 1918–1920, die durch das Influenzavirus ausgelöst wurde, fielen weltweit über 50 Millionen Menschen zum Opfer [2]. Die HIV/AIDS-Pandemie von 1981 bis heute begann in Afrika und hat weltweit Millionen von Menschen das Leben gekostet [3]. Die SARS-Pandemie begann 2002–2004. Das SARS-Virus wurde erstmals in China entdeckt, verbreitete sich weltweit und forderte über 700 Todesopfer [4]. Die COVID-19-Pandemie von 2019 bis heute wurde durch das SARS-CoV-2-Virus verursacht und dauert Dies sind nur einige Beispiele für große Pandemien, die im Laufe der Geschichte aufgetreten sind, und sie zeigen, wie wichtig es ist, zukünftige Pandemien zu verstehen und sich darauf vorzubereiten. Die Reaktion auf eine Pandemie variiert je nach Art der Pandemie und den betroffenen Ländern. Im Allgemeinen gibt es mehrere Schritte, die Regierungen und Gesundheitsorganisationen unternehmen, um mit einer Pandemie fertig zu werden, wie Impfung, Isolation und Quarantäne, Tests und Kontaktverfolgung, Ausgangssperren, Aufklärung und wirtschaftliche Hilfe [6]. Reaktionen auf Pandemien müssen auf die Bedingungen un**

Machine Translated by Google

und müssen im Laufe der Zeit oft angepasst und aktualisiert werden [7]. Bei Entscheidungen und **Maßnahmen zur Bekämpfung der Pandemie müssen Aspekte der öffentlichen Gesundheit, der Wirtschaft und der Menschenrechte berücksichtigt werden .**

Finanzierungssysteme während einer Pandemie spielen eine wichtige Rolle bei der Bewältigung der wirtschaftlichen und sozialen Folgen der Pandemie [8]. Es gibt mehrere Möglichkeiten, die zur Überwindung der Pandemie notwendigen Maßnahmen und Programme zu finanzieren, darunter die Regierung: Regierungen nutzen häufig Finanzierungsquellen wie Steuern und Schulden, um Regierungsprogramme und wirtschaftliche Hilfe für von der Pandemie betroffene Einzelpersonen und Unternehmen zu finanzieren. Spenden: Spenden von Einzelpersonen, Institutionen und Unternehmen können helfen, die während einer Pandemie notwendigen Gesundheits- und Sozialprogramme zu finanzieren. Kredite: Kredite von Banken und anderen Finanzinstituten können helfen, staatliche und private Programme und Maßnahmen zur Bekämpfung der Pandemie zu finanzieren. Internationale Hilfe: Hilfe von anderen Ländern und internationalen Institutionen kann helfen, staa Bei Finanzierungssystemen während einer Pandemie sollte das Gleichgewicht zwischen der Finanzierung der zur Bekämpfung der Pandemie erforderlichen Maßnahmen und der Gewährleistung, dass die finanzielle Belastung die Gesellschaft und die Wirtschaft langfristig nicht negativ beeinflusst, berücksichtigt werden [10]. Finanzierungsrichtlinien und -programme während einer Pandemie sollten auf die Bedingungen und Merkmale der aktuellen Pandemie zugeschnitten sein und müssen im Laufe der Zeit häufig angepasst und aktualisiert werden.

Mehrere Disziplinen spielen bei der Bewältigung der Pandemie eine wichtige Rolle [11]. Die Rolle mathematischer Modelle der Epidemiologie bei der Bewältigung von Pandemien besteht darin, Erkenntnisse und Vorhersagen über die Ausbreitung und Auswirkungen einer Krankheit zu liefern [12]. Diese Modelle können Entscheidungsträgern helfen, fundierte Entscheidungen darüber zu treffen, wie Ressourcen zugewiesen und Interventionen zur Eindämmung der Ausbreitung der Krankheit umgesetzt werden sollen. Durch die Simulation verschiedener Szenarien können diese Modelle ein genaueres Verständnis der potenziellen Auswirkungen verschiedener Interventionsstrategien liefern, einschließlich der potenziellen Vor- und Nachteile jeder Strategie. Diese Informationen können dann verwendet werden, um die öffentliche Gesundheitspolitik und die Ressourcenzuweisung zu steuern sowie Interventionen zu priorisieren, die bei der Eindämmung der Ausbreitung der Krankheit am wahrscheinlichsten wirksam sind **[13]. Letztendlich kann die Verwendung mathematischer Modelle der Epidemiologie eine wichtige Rolle dabei spielen, die Zahl der Infektionen und Todesfälle während einer Pandemie zu verringern und die Ausbreitung der Krankheit so schnell und e**

Es gab mehrere Studien, die versucht haben, die Gesundheitsausgaben abzuschätzen, die zur Überwindung von COVID-19 erforderlich sind. Die von Dudine et al. (2020) durchgeführte Forschung konzentriert sich auf die Gesundheitsausgaben auf Länderebene. Diese Gesundheitsausgaben werden mithilfe eines diskreten stochastischen Modellansatzes für Anfälligkeit, Infektion und Genesung (SIR) modelliert **[15]. Die Gesundheitsausgaben der Menschen werden dann geschätzt, indem die Anzahl der infizierten Menschen, die in Gesundheitseinrichtungen behandelt werden müssen, multipliziert wird . Andere Studien konzentrierten sich auf die Gesu Torres Rueda et al. (2021) schätzten die Gesundheitsausgaben in Ländern mit niedrigem Einkommen mithilfe des Susceptible-Exposed-Infected-Recovered (SEIR)-Modells. Das SEIR-Modell wurde mithilfe eines diskreten Ansatzes erstellt, und die Gesundheitsausgaben wurden anhand der Kosten geschätzt, die für Notfallmaßnahmen , Tests und die Nachverfolgung positiver Fälle erforderlich sind, sowie der Kosten, die für die Behandlung aktiver und verstorbener Fälle von COVID-19** erforderlich sind **[16].** In einer anderen Studie wurde versucht, die potenziellen Auswirkungen **nicht-pharmazeutischer Interventionen, wie z. B. Einschränkungen sozialer Aktivitäten, auf die Kapitalakkumulation und die wirtschaftliche Entwicklung in verschiedenen Zeiträumen zu untersuchen [17]. Die von Cook et al. (2020) durchgeführte Forschung konzentriert sich auf die potenziellen Auswirkungen nicht-pharmazeutischer Interventionen auf die Modellakkumulation und die wirtschaftliche Entwicklung in verschiedenen Zeiträumen. Diese Studie integriert das** Wirtschaftsmodell vom Typ SOLOW mit dem SIR-Modell, um die potenziellen Auswirkungen der **durchgeführten wirtschaftlichen Interventionen zu modellieren [18]. Darüber hinaus wird dieser epidemiologische Modellansatz auch verwendet, um die Auswirkungen der Unfähigkeit des Staates, Einschränkungen sozialer Aktivitäten durchzusetzen, auf Haushalte mit niedrigem Einkommen** zu untersuchen **[18].** Eine andere Studie verwendete einen epidemiologischen Ansatz, um **die Wirksamkeit der COVID-19-Impfung bei der Reduzierung der Gesundheitsausgaben abzuschätzen [19]. Eine weitere Studie untersuchte die Auswirkungen von vorzeitigem Tod und**

In früheren Studien zur Modellierung der Kosten der Bewältigung einer Pandemie wurde die Auswirkung staatlicher Interventionen auf die Wirtschaft nicht diskutiert. Auch Modelle, die die

Machine Translated by Google

Auswirkungen staatlicher Eingriffe auf die Wirtschaft diskutieren nie die damit verbundene Gesundheitsfinanzierung . Obwohl diese beiden Faktoren die Gesamtausgaben für die Bewältigung einer Pandemie beeinflussen können, wird in dieser Studie ein Modell erstellt, um die Gesundheitskosten abzuschätzen, die zur Bewältigung der COVID-19-Pandemie in einem Land erforderlich sind. Das erstellte Modell berücksichtigt die Möglichkeit von Änderungen des Schweregrads von COVID-19-Patienten, die (2020) [15]. Dies ist realistischer, wenn man bedenkt, dass sich der Schweregrad von COVID-19-Patienten in der Praxis tatsächlich ändern kann. Zu diesem Zweck wird ein diskretes epidemiologisches mathematisches Modell mit Interventionen verwendet, um die Anzahl der **Menschen, die im Laufe der Zeit eine Krankenhausbehandlung benötigen, zu prognostizieren .**

In dieser Studie wird eine mathematische Modellierung durchgeführt, um die Kosten für die Bewältigung einer Pandemie sowie die Kompromisse abzuschätzen. Diese Studie stellt umfassend dar, wie viel es kostet, und schätzt die möglichen Änderungen der Sterblichkeit sowie die Änderungen der wirtschaftlichen Kosten für jede erforderliche Maßnahme. Das SIS-Modell wird aufgrund seiner Nähe zum auftretenden Phänomen verwendet, nämlich der Möglichkeit, dass Patienten, die für geheilt erklärt wurden , sich erneut infizieren. Das Modell berücksichtigt auch den Einfluss von

Interventionen der Regierung. So kann jeder Interventionsschritt eine andere Wirkung haben, sei es Lockdown, Quarantäne oder Impfung. Dann werden für jeden unternommenen Schritt auch seine Auswirkungen auf die Kosten und mögliche Kompromisse zwischen der Reduzierung der Fallzahlen und der Minimierung der Behandlungskosten berücksichtigt. Daher bewertet das in dieser Studie entwickelte Modell nicht nur den Umgang mit Pandemiefällen im Hinblick auf die Fallzahlen und die Ausbreitungsrate, sondern auch seine Auswirkungen auf die wirtschaftlichen Bedingungen. Diese werden dann in Gesundheitskosten umgerechnet . Das Modell liefert Informationen über die Kosten für den Umgang mit der infizierten Bevölkerung, die Kosten der Intervention und den Kompromiss zwischen beiden. Somit sind die von diesem Modell generierten Informationen umfassend für die Politikgestaltung der Regierung. Die vom Modell bereitgestellten Informationen weisen letztendlich Mittel für das Bevölkerungsmanagement sowie für Interventionen zur Eindämmung der Ausbreitung der Krankheit zu. Da diese Studie evaluativer Natur ist, können die durch diese Forschung generierten Zuweisungen dann mit den von der Regierung getätigten Ausgaben verglichen und dann weiter ausgewertet werden. Es bleibt zu hoffen, dass die bereitgestellten Informationen der Regierung als Input dienen können, um im Falle einer Pandemie wieder eine ausgereifte Politik zu verfolgen, sodass der Schwerpunkt der durchgeführten Interventionen nicht nur auf der kurzfristigen Reduzierung der Zahl liegt, sondern auch auf der Rettung der Bevölkerung als Ganzes übe

2. Überblick 2.1.

Epidemiologisches mathematisches Modell

Mathematische Modelle der Epidemiologie sind Werkzeuge zur Vorhersage und zum Verständnis der Ausbreitung von Krankheiten in Bevölkerungen [21,22]. Diese Modelle berücksichtigen die Beziehung zwischen infizierten Menschen, Menschen, die anfällig für eine Infektion sind, und Menschen, die sich erholt haben oder gegen die Krankheit immun sind. Mathematische Modelle der Epidemiologie können Forschern und politischen Entscheidungsträgern helfen, die Ausbreitung von Krankheiten vorherzusagen, die Wirksamkeit von Präventions- und Behandlungsstrategien zu bewerten und geeignete Maßnahmen des öffentlic Mathematische Modelle der Epidemiologie basieren in der Regel auf Systemen von Differentialgleichungen, die Veränderungen der Anzahl von Personen in verschiedenen Gruppen im Laufe der Zeit beschreiben. Beispielsweise ist das SIR-Modell (susceptible-infected-recovered) eines der am häufigsten verwendeten mathematischen Modelle der Epidemiologie. Das SIR-Modell geht davon aus, dass die Bevölkerung in drei Gruppen unterteilt ist: anfällige Personen (S), infizierte Personen (I) und Personen, die genesen sind oder gegen die Krankheit immun sind **(R). Die für das SIR-Modell verwendete Differentialgleichung lautet wie folgt:**

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

Grundlegendes SIR-Modell

1. Änderungsrate von anfällig zu infiziert pro Zeiteinheit

$$\frac{dS}{dt} = \ddot{y}\ddot{y}SI \quad \textbf{(2)}$$

Machine Translated by Google

2. Änderungsrate von Infizierten zu Genesenen pro Zeiteinheit

$$\frac{dI}{} = \ddot{y}SI \ddot{y} \ddot{y}I\, dt \quad \textbf{(3)}$$

3. Wiederhergestellte Heilungsrate pro Zeiteinheit

$$\frac{dR}{dt} = \ddot{y}I \quad \textbf{(4)}$$

wobei *ÿ* **die Übertragungsrate,** *ÿ* **die Heilungs- oder Sterberate und** t **die Zeit ist. Die Studie von Wearing et al. (2005) liefert eine ausführliche Erklärung epidemiologischer mathematischer Modelle, einschließlich des SIR-Modells und anderer in der Epidemiologie verwendeter Modelle [25]. Sie diskutieren Anwendungen epidemiologischer mathematischer Modelle bei der Vorhersage der Ausbreitung von Infektionskrankheiten wie Grippe, Masern und HIV sowie bei der Abschätzung der Auswirkungen von Impfungen und anderen Präventivmaßnahmen. Sie diskutieren auch numerische Techniken zum Lösen** von **Differentialgleichungen und die Verwendung empirischer Daten zur**

Neben dem SIR-Modell gibt es auch das SIS-Modell (susceptible-infected-susceptible). Im SIS-Modell wird davon ausgegangen, dass die infizierte Bevölkerung keine langfristige Immunität besitzt und einzelne Personen wieder anfällig werden, sodass eine erneute Infektion möglich ist. Die für das SIS-Modell verwendete Differentialgleichung lautet wie folgt:

$$N(t) = S(t) + I(t) \quad \textbf{(5)}$$

Neben den SIR- und SIS-Modellen gibt es auch andere epidemiologische mathematische Modelle, wie das SEIR-Modell (susceptible-exposed-infected-recovered) und das komplexere Kompartimentmodell. Alle mathematischen Modelle der Epidemiologie haben jedoch dasselbe Ziel: Sie sollen dazu beitragen, die Ausbreitung von Krankheiten in **der Bevölkerung zu verstehen und zu kontrollieren .**

2.2. Diskretes epidemiologisches mathematisches

Modell **Diskrete epidemiologische mathematische Modelle werden verwendet, um die Ausbreitung von Krankheiten in diskreten Populationen zu modellieren. Diese Modelle werden in der Epidemiologie häufig verwendet, um die Ausbreitung von Krankheiten unter Individuen in diskreten Populationen vorherzusagen. Einige Beispiele für häufig verwendete diskrete epidemiologische mathematische Modelle sind das SIR- Modell (susceptible-infected-recovered) und das SEIR-Modell (susceptible-exposed-infected-recovered). In beiden Modellen werden Individuen in der Population basierend auf ihrem Infektionsstatus in Klassen eingeteilt . Bei der epidemiologischen Modellierung verwenden die meisten entwickelten Modelle im Allgemeinen einen kontinuierlichen Ansatz [26] In der Realität werden vorhandene epidemiologische Daten jedoch im Allgemeinen in diskreten Zeitabständen erfasst . Daher sind diskrete Modelle angesichts der Art und Weise der Datenerfassung geeigneter . Darüber hinaus sind diskrete Epidemiemodelle aufgrund der Ähnlichkeit der Datenaufzeichnungsmethode für Nicht-Mathematiker** viel intuitiver und einfacher umzusetzen . **Dies macht diskrete Modelle für Nicht-Mathematiker leichter zu akzeptieren und zu verstehen. Bisher gab es mehrere Studien mit diskreten Krankheitsübertragungsmodellen [27–29]. Für die einfachsten diskreten Epidemiemodelle werden die Gleichungen (6)–(8) verwendet. In diskreter Form lautet die Gleichung also wie folgt:**

$$St+1 = St \ddot{y} \ddot{y}StIt \quad \textbf{(6)}$$

$$Es+1 = Es + \ddot{y}StEs \ddot{y} \ddot{y}Es \quad \textbf{(7)}$$

$$Rt+1 = Rt + \ddot{y}It \quad \textbf{(8)}$$

Dabei ist t **die Zeit,** *ÿ* **die Heilungsrate,** *ÿ* **die Infektionsrate und** N **die Gesamtbevölkerung.**

Machine Translated by Google

2.3. Markow-Kette

Markow-Ketten werden häufig verwendet, um dynamische Entwicklungen abzuschätzen, die Übergänge zwischen beobachtbaren endlichen Zustandsräumen beinhalten. Die Methodik ist intuitiv und einfach anzuwenden , insbesondere in Situationen, in denen verschiedene Stadien **zusätzlich zur Entwicklung der Situation den Beobachtungszustand bestimmen .** Folglich wird diese Idee **in Studien und Anwendungen in der Epidemiologie** weithin anerkannt **[30]. Die diskrete Markow-Kette behauptet, dass der gegenwärtige Zustand der Beobachtung vollständig vom Zustand des vorherigen Zeitschritts im diskreten Beobachtungsintervall abhängt. Mathematisch bedeutet dies, dass die Wahrscheinlichkeit, dass der beobachtete Zustand** i **zum Zeitpunkt** t in den Zustand j **zum Zeitpunkt** t + 1 **überg**

$$pi,j(t) = Pr[I(t + 1) = j \mid I(t) = i] \quad \textbf{(9)}$$

wobei I(t) **die Identifikation des beobachteten Zustands zum Zeitpunkt t ist. Die einstufige Übergangswahrscheinlichkeit wird als** pi,j(t) definiert **oder kann auch als tägliche Übergangswahrscheinlichkeit bezeich Für die Übergangswahrscheinlichkeit wird der** t-Schritt vorwärts entlang der Beobachtungen als pi,j(t) **bezeichnet .**

2.4. Mittlerer absoluter Prozentfehler (MAPE)

Bei einer Vorhersage müssen die Ergebnisse des Modells ausgewertet werden, um die Genauigkeit des Modells bei der Erstellung von Vorhersagen sicherzustellen. Bisher wurden verschiedene Maße verwendet, und die am häufigsten verwendeten Maße sind der absolute prozentuale Fehler (APE) und der mittlere absolute prozentuale Fehler (MAPE). Die Formeln zur Berechnung v

$$APE = \frac{Xt \ddot{y} \hat{X}_{T}}{Xt}, \quad \textbf{(10)}$$

$$MAPE = \frac{\ddot{y}_{t=1}^{N} \frac{|Xt \ddot{y} \hat{X} t|}{Xt}}{N} \times \textbf{100 \%,} \quad \textbf{(11)}$$

Die Genauigkeit der Prognosen wird als gut eingestuft, wenn die erzielten APE- und MAPE-Werte weniger als 20 % betragen [31].

3. Materialien und Methoden

3.1. Materialien

Gegenstand des Modells dieser Studie ist ein Modell zur Ermittlung der Kosten für die Bewältigung einer Pandemie. Dieses Modell umfasst auf einzigartige Weise die Komponenten Kosten für die Behandlung der infizierten Bevölkerung, Kosten für Interventionen und den Kompromiss zwischen beiden. Die Kosten für die Behandlung infizierter Bevölkerungen, die in dieser Studie berücksichtigt werden, sind Behandlungskosten, Kosten für zusätzliche Gesundheitseinrichtungen, Sterblichkeitskosten und Nachverfolgungskosten. Die Kosten für staatliche Interventionen, die in dieser Studie berücksichtigt werden, sind Kosten für soziale Distanzierung und Lockdown-Kosten. Schließlich werden Kompromisse berücksichtigt, um ein

Die Kosten für die Bewältigung einer Pandemie werden mithilfe eines diskreten SIS-Modells mit Interventionen und demografischen Daten modelliert. Anschließend werden die Projektionsergebnisse des Modells mit einem auf Inhaltsstoffen basierenden Kostenmodell kombiniert. Der demografische Aspekt wird berücksichtigt, da COVID-19 in Indonesien seit etwa drei Jahren wütet. Um die Genauigkeit des Modells zu erhöhen, wird der demografische Aspekt berücksichtigt.

Die in dieser Studie verwendeten Daten sind die Anzahl der COVID-19-Fälle in West-Java. Die in dieser Studie verwendeten Fälle sind positiv, genesen, verstorben und aktiv. Die verwendeten Daten stammen aus dem Zeitraum März 2020–August 2022 während der COVID-19-Pandemie. Der Datensatz enthält 3632 Einträge, mit 908 Einträgen für jeden Fall [32]. Für Gesundheitseinrichtungen werden die Daten zur indonesischen Bettenbelegungsrate (BOR) verwendet. Die Daten wurden von der COVID-19-Task Force bezogen. Dieser Datensatz stammt aus dem Zeitraum März 2020–August 2022 [33]. Für Daten zu den Kosten staatlicher Interventionen verwendete diese Studie die offiziellen WHO-Richtlinien für Richtlinien und Reaktionsmaßnahmen für COVID-19, um die in einem Land durchzuführenden In

Vor ihrer Verwendung wurden die Daten auf ihre Qualität geprüft. Bei den COVID-19-Falldaten wurden die Daten auf Konsistenz geprüft, indem die Anzahl der kumulierten Fälle zwischen

Machine Translated by Google

t und t + 1. Kumulative Falldaten gelten als konsistent, wenn die Anzahl der Fälle in t + 1 ÿ der Anzahl der Fälle in t ist. Darüber hinaus werden die Daten bei aktiven Fällen durch Vergleich mit vorhandenen Daten aus der Quelle und den von Forschern berechneten Daten überprüft. Wenn ein Fehler oder Unterschied gefunden wird, wird dieser mit der Datenquelle abgeglichen, bevor weitere Analysen durchgeführt werden.

3.2. Methoden

In dieser Forschung werden zwei Phasen durchgeführt, nämlich die Modellentwicklungsphase und die Phase der numerischen Illustrationsanalyse, die wie folgt beschrieben werden: Zunächst wird die Modellentwicklungsphase durch eine eingehende Untersuchung insbesondere der von Dudine et al. [15] durchgeführten Forschung durchgeführt, in der die Formulierung eines COVID-19-Kostenmodells unter Verwendung des SIR-Modells erörtert wird. Das bestehende Modell wurde dann in dieser Studie modifiziert, indem die Möglichkeit eines Übergangs im Schweregrad der Symptome bei mit COVID-19 infizierten Patienten hinzugefügt wurde. Die Modellformulierung zur Ermittlung der Kosten im Umgang mit COVID-19 wird unter Verwendung eines zeitdiskreten Übergangsmöglichkeitsansatzes durchgeführt. Zweitens wird die Phase der numerischen Illustrationsanalyse durchgeführt, um zu zeigen, wie die Anwendung des Modells bei der Ermittlung der Kosten im Umgang mit COVID-19 erfolgte, und um zu beschreiben, wie sich die Bevölkerungsdynamik in der COVID-19-Pandemie basierend auf dem erstellten Modell entwickelte. Für die Analyse der numerischen Illustration werden hier die im Modell verwendeten Parameter basierend auf den vorhandenen Daten geschätzt.

Das Flussdiagramm für diese Untersuchung ist in Abbildung 1 dargestellt.

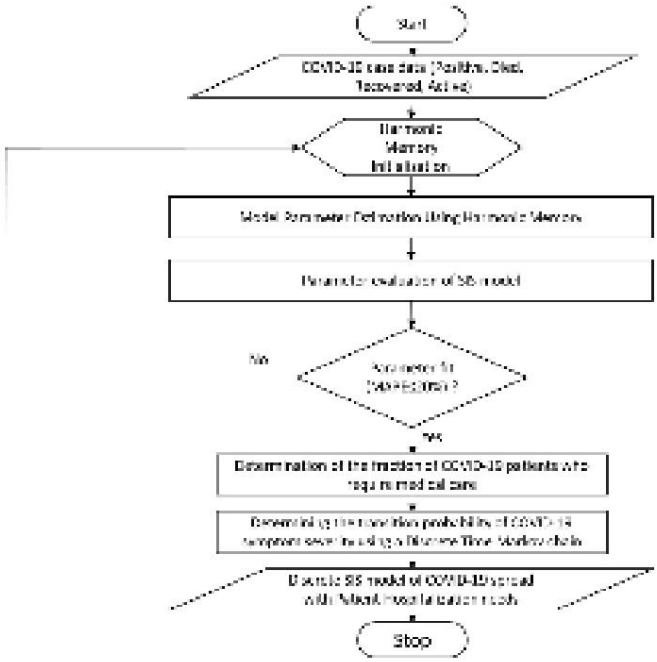


Abbildung 1. Modellierungsschritte.

Die Modellierung der Bevölkerungsdynamik der COVID-19-Ausbreitung mit dem Krankenhausbedarf der Patienten erfolgt durch Eingabe der verfügbaren Pandemie-Falldaten. In diesem Fall sind die verfügbaren Daten COVID-19-Daten. Die Daten werden dann verwendet, um die Parameter des in dieser Studie erstellten SIS-Modells zu schätzen. Die für diese diskrete SIS-Modellierung verwendeten Parameter umfassen: Die Anzahl der Personen, von denen angenommen wird, dass sie bei t = 0 immun sind, beträgt 0. Die Dauer der Infektion beträgt k . Da es eine Übergangsmöglichkeit gibt, kann die Dauer der Infektion (1ÿtrp) $\frac{1}{\text{betragen}}$. Behandelte und nicht infizierbare

1 variieren, so dass kH $\frac{}{} = \frac{1}{1\ (1ÿtrp)\ ,\ kRNH\text{-}\ \text{Anteile}}$ $\frac{}{} = \frac{1}{(1ÿtpr2)\ ,\ kNH}$ 1 und $\frac{}{} = \frac{1}{}$

sind ÿ. Die Parameterschätzung wurde iterativ durchgeführt und die Iteration wurde gestoppt, als die Parameter angepasst waren. Die Parameter galten als angepasst, wenn die resultierende Fehlergröße bei einer vorgegebenen Anzahl von Iterationen minimal war. Als Fehlerkriterium wurde der mittlere absolute prozentuale Fehler (MAPE) verwendet. Nachdem die Parameter angepasst wurden, wird der Anteil der COVID-19-Patienten bestimmt, die medizinische Versorgung benötigen, und die Wahrscheinlichkeit des Übergangs

Machine Translated by Google

der Schwere der Symptome bei COVID-19-Patienten wird geschätzt. Das Modell berücksichtigt auch die Auswirkungen verschiedener Interventionen und Kontrollmaßnahmen auf die Ausbreitung des Virus. Durch die Anpassung von Parametern wie Übertragungsrate und Genesungsrate kann das Modell verschiedene Szenarien simulieren, um die Entscheidungsfindung im Bereich der öffentlichen Gesundheit zu unterstützen. Insgesamt bietet dieser Ansatz ein wertvolles Instrument zur Vorhersage des Verlaufs der Pandemie und zur Bewertung potenzieller Strategien zur Eindämmung ihrer Auswirkungen.

4. Ergebnisse

In diesem Abschnitt werden die in dieser Studie erzielten Ergebnisse beschrieben. In dieser Studie wurden zwei Ergebnisse erzielt, nämlich Modellierungsergebnisse und Ergebnisse der numerischen Simulation.

4.1. Modellierungsergebnis

In dieser Studie wird ein COVID-19-Ausbreitungsmodell erstellt, das die Möglichkeit einer Veränderung der Schwere der Symptome bei infizierten Patienten sowie die Möglichkeit einer erneuten Infektion berücksichtigt. Das erstellte Modell besteht aus drei Bereichen: anfällig (S), infiziert (I) und anfällig (S). Das erstellte epidemiologische mathematische Modell wird verwendet, um die COVID-19-Pandemie in verschiedenen Szenarien zu modellieren.

In Gleichung (5) ist S(t) **die Anzahl der anfälligen Populationen zum Zeitpunkt** t **und** I(t) **die Anzahl der infizierten Populationen zum Zeitpunkt t. Das schematische Diagramm der Ausbreitung von COVID-19, auf das sich diese Studie bezieht, ist in Abbildung 2 dargestellt.**

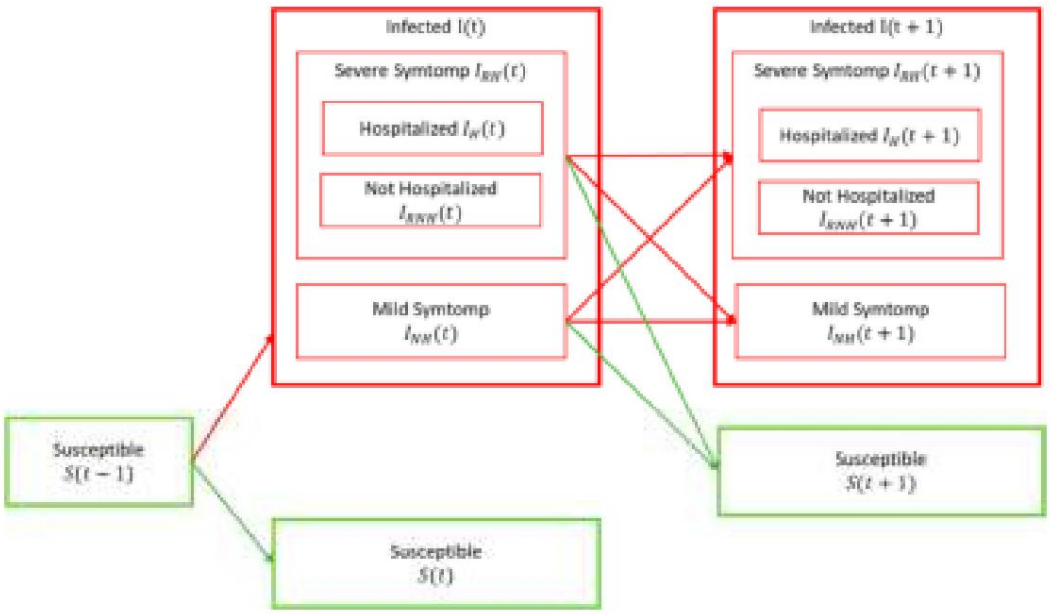


Abbildung 2. COVID-19-Patientendynamik.

Die Erklärung zu Abbildung 2 lautet wie folgt: ÿ1 (ÿ **1) • Eine Person, die im Zeitraum**
t ÿ **1;** S(t ÿ 1) anfällig **ist, kann im nächsten Zeitraum ( ) ( ) mit COVID-19 infiziert werden und in die Gruppe der** **infizierten** I(t) aufgenommen **werden oder**
anfällig S(t) bleiben. **( ) • Eine infizierte Person** I(t) **kann leichte Symptome** INH(t) **oder ( ) ( ).**
schwere Symptome IRH(t) haben. **( ),**

( ),

Bei INH(t) **wird davon ausgegangen, dass der Patient keine Behandlung in einer Gesundheitseinrichtung wie etwa einem Krankenhaus benötigt. Bei** IRH(t) hingegen wird davon ausgegangen, dass der Patient ärztliche Behandlung in **einer Gesundheitseinrichtung benötigt .**

( )

• Aufgrund der begrenzten Kapazität der Gesundheitseinrichtungen können nicht alle Patienten mit schweren Symptomen **( ),** **( )**
von IRH(t) **in Gesundheitseinrichtungen behandelt werden. Dies führt zu einer behandelten schweren Symptomgruppe** **( )** **( )**
IH(t) **und einer unbehandelten schweren Symptomgruppe** IRNH(t). **( ) •** Zwischen IRH(t) **und** INH(t)
( )
können Übergänge in der Symptomschwere auftreten . Da IRH(t) aus IH(t) **und** IRNH(t) **besteht , werden Übergänge in der Symptomschwere in Abbildung 3 beschrieben.**

Machine Translated by Google

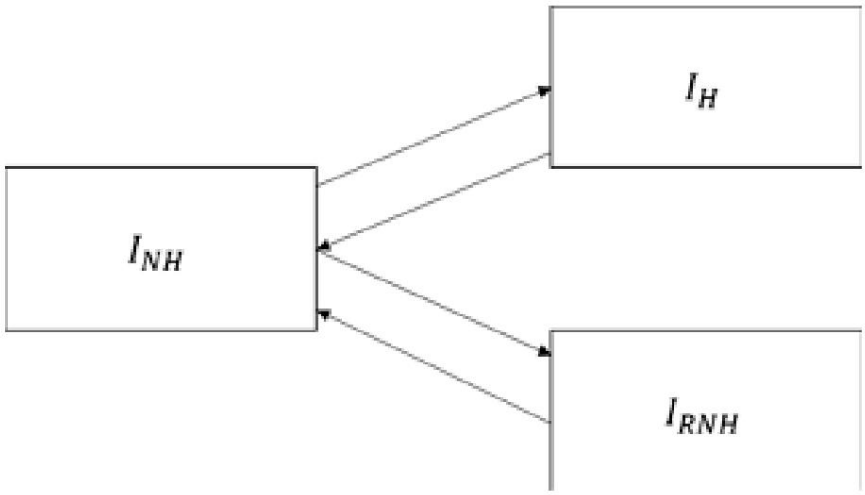


Abbildung 3. Diagramm zum Übergang der Symptomschwere.

Aus dieser Erklärung und Abbildung 3 ist bekannt, dass das Kompartiment I **unterteilt ist in drei Teile, nämlich:**

- **Erfordert keine Behandlung in einer Gesundheitseinrichtung (** INH**). Es wird davon ausgegangen, dass in jedem nur ein Teil der Mitglieder des Kompartiments** I **muss behandelt werden, so dass die Der Rest kann sich selbst isolieren, ohne in Gesundheitseinrichtungen wie Krankenhäusern behandelt werden zu müssen. Für Gruppen, die positiv auf COVID-19 getestet wurden, aber keine Intensivpflege benötigen, Krankenhaus, wird die Notation** INH **verwendet.**
- **Benötigte Behandlung in einer Gesundheitseinrichtung, bekam sie aber nicht,** IRNH. **Es wird angenommen, dass es Es gibt in jedem Gebiet Gesundheitseinrichtungen, aber ihre Kapazität ist begrenzt, was die Möglichkeit mit sich bringt, von Patienten, die eine Behandlung benötigen, aber aufgrund dieses Problems nicht behandelt werden können. Gruppen, die positiv auf COVID-19 getestet wurden und eine Intensivpflege benötigen, diese aber nicht erhalten,** Es wird **die Notation** IRNH **verwendet. Gleichung (12) beschreibt** IRNH.

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

- **Hospitalisierte** IH. **Dies ist eine Gruppe, die medizinische Versorgung benötigt und erhält.** IH(t) **wird angezeigt in Gleichung (13).**

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

und zu jedem Zeitpunkt t gilt Gleichung (14).

$$I(t) = IH(t) + IRNH(t) + INH(t), \quad (14)$$

Als nächstes wird die Kapazitätsbeschränkung in Gesundheitseinrichtungen modelliert. Die Anzahl der Betten für Die Behandlung von COVID-19-Patienten zu Beginn der Pandemie B(0) ist in Gleichung (15) dargestellt.

$$B(0) = v \cdot B0, \quad (15)$$

wobei v **der Anteil der COVID-19-Behandlungsbetten zu Beginn der Pandemie ist und B0 ist die Gesamtzahl der Krankenhausbetten. Im Laufe der Zeit wird die Zahl der COVID-19-Patienten Anstieg, was zu einer Situation führt, in der die Anzahl der vorhandenen Krankenhauskapazitäten erhöht werden. Wenn zu jedem Zeitpunkt t die Anzahl der Betten** B(t − 1) **kleiner ist als die Anzahl der** IRH(t − 1), **dann wird die Bettkapazität auf Basis von** IRNH(t − 1) erhöht. **Die Existenz von Kapazitätsbeschränkungen machen den Ausbau von Betten nur für** n **Anteile von** IRNH(t − 1) möglich, Die Anzahl der zum Zeitpunkt t **verfügbaren Bettenkapazitäten wird durch Gleichung (16) dargestellt.**

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

Machine Translated by Google

Für jedes zusätzliche Bett wird angenommen, dass das Verhältnis zwischen der Anzahl der Betten mit Pflegepersonal und Ärzten bleibt unverändert, wie in den Gleichungen (17) und (18).

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

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

wobei TP **die Anzahl der Krankenschwestern und** TD **die Anzahl der Ärzte ist.** TP0 **und** TD0 **sind die Anzahl der Pflegekräfte und Ärzte im Zeitraum 0 oder zu Beginn der Pandemie. Darüber hinaus hat Abbildung 3** zuvor die Dynamik von COVID-19 mit der Anzahl der **Patienten, die medizinische Versorgung benötigen. Es wird davon ausgegangen, dass die Heilungschancen des Patienten und Der Tod hängt von der Schwere der Symptome und davon ab, ob der Patient eine Behandlung erhält. Dies wird durch die Gleichungen (19) und (20) gezeigt.**

$$dNH < dH < dRNH, \quad (19)$$

$$rNH > rH > rRNH, \quad (20)$$

wobei d **die Sterbewahrscheinlichkeit und** r **die Genesungschancen des COVID-19-Patienten sind. Danach bezeichnen wir mit** k die Wahrscheinlichkeit, dass der Patient das Abteil **I verlässt . Wahrscheinlichkeit, dass dies geschieht, ist, ob der Patient sich erholt oder stirbt. Die** k- **Relationen für** INH, IH, **und** IRNH **finden sich in den Gleichungen (21)–(23).**

$$kNH = dNH + rNH, \quad (21)$$

$$kH = dH + rH, \quad (22)$$

$$kRNH = dRNH + rRNH. \quad (23)$$

Patienten können Veränderungen in der Schwere der Symptome erleben, und dies hält die Patient in Kompartiment I, aber nur die Schwere des Symptoms ändert sich. Wenn p **die Wahrscheinlichkeit des Übergangs, dann die Wahrscheinlichkeit, dass kein Übergang stattfindet oder der Patient geht Kompartiment** I **wird durch Gleichung (24) gegeben.**

$$\mathbf{1} - p = \mathbf{k}, \quad (24)$$

und dies gilt für IH, IRNH **und** INH, wenn Gleichung (24) durch **die Gleichungen (21)–(23) ersetzt wird , dann lauten die Gleichungen (25)–(27) wie folgt:**

$$pb = \mathbf{1} - kNH, \quad (25)$$

$$pr = \mathbf{1} - kH, \quad (26)$$

$$pr2 = \mathbf{1} - kRNH, \quad (27)$$

Die Beziehung zwischen der Übergangswahrscheinlichkeit p **und der Wahrscheinlichkeit eines Patienten Das Verlassen des Abteils I ist in Abbildung 4 dargestellt.**

Machine Translated by Google

=1ÿ ,

=1ÿ ,

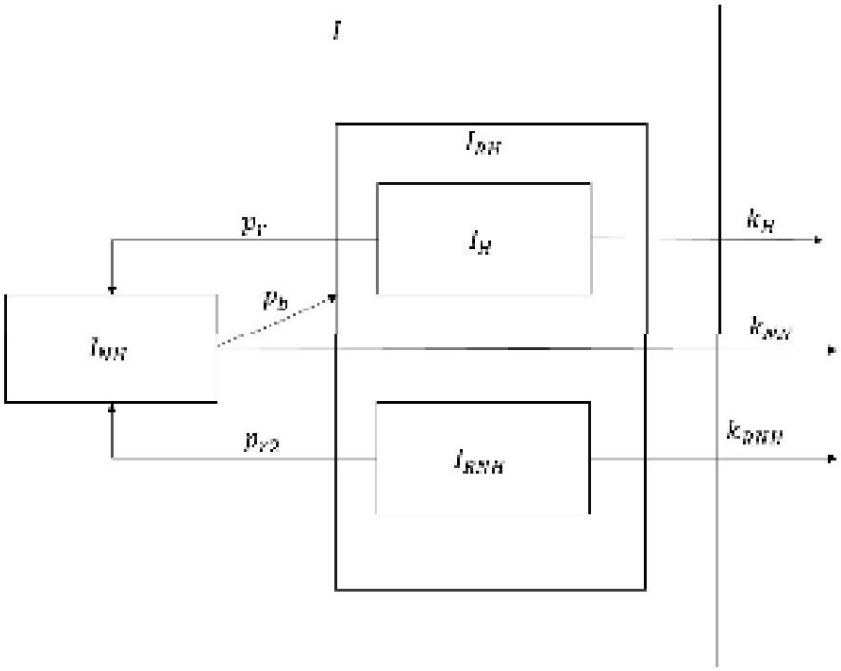


Abbildung 4. Diagramm p **und** k **in Kompartiment I.**

Darüber hinaus kann es bei COVID-19-infizierten Patienten aufgrund möglicher Übergänge in der Schwere der Symptome zu unterschiedlichen Behandlungsdauern kommen. Daher muss k **von Zeit zu Zeit berücksichtigt werden, wie in Gleichung (28).**

$$k(t) = \frac{\ddot{y}(S(t\ddot{y}1))}{I(t\ddot{y}1)\,rH} = \frac{IH(t\ddot{y}1)+rRNH\,IRNH(t\ddot{y}1)+rNH\,INH(t\ddot{y}1)+dH\,IH(t\ddot{y}1)+dRNH\,IRNH(t\ddot{y}1)+dNH\,INH(t\ddot{y}1)}{I(t\ddot{y}1)} = kH + kRNH\,\frac{IRNH(t\ddot{y}1)}{I(t\ddot{y}1)} + kNH\,\frac{INH(t\ddot{y}1)}{I(t\ddot{y}1)} \quad \text{(28)}$$

Die Gleichung lautet: I(tÿ1) .

Als nächstes entspricht die Anzahl der Patienten, die andere nicht mehr anstecken können, der Anzahl der an COVID-19 Verstorbenen und Genesenen.

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

Die Gleichung lautet: ÿS(t) = k(t)I(t ÿ 1). **(30)**

Nehmen wir nun an, dass ÿ(t) die durchschnittliche Anzahl der Menschen ist, die eine Person pro **Zeiteinheit** t **ansteckt , und** dass R0(t) **die Anzahl der Menschen ist, die eine ansteckende Person im Verlauf ihrer Infektion ansteckt. Dies ergibt Gleichung (31).**

$$R0(t) = \frac{\ddot{y}(t)}{k(t)}, \quad \textbf{(31)}$$

Aufgrund der gegebenen Erläuterung ergibt sich die Anzahl der Neuinfektionen zu jedem Zeitpunkt t **aus Gleichung (32).**

$$\ddot{y}I(t) = (I(t\ddot{y}1) \cdot \cdot \ddot{y}(t)\,\frac{S(t\ddot{y}1)}{N(t)}\,\ddot{y}\,\ddot{y}IH(t\ddot{y}1)) \cdot \cdot \ddot{y}(t)\,\ddot{y}\,in(t)\,, \quad \textbf{(32)}$$

N

1

Machine Translated by Google

ÿI(t) **ist immer positiv,** ÿ(t) ÿ ÿ $\overset{N}{\underset{1}{}}$ in(t), **wobei** i **die Art der staatlichen Intervention ist und** *ÿ* **der Anteil der infizierten Bevölkerung, der ordnungsgemäß unter Quarantäne gestellt wird, so dass für die gebildeten Kompartimente S, I,** S **die Gleichungen (33)–(37) gelten.**

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

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

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

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

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

Nach der Modellierung der Ausbreitung von COVID-19 und der Anzahl der Patienten, die eine Behandlung benötigen , wird eine Modellierung der Kosten zur Bewältigung der COVID-19-Pandemie durchgeführt. In dieser Studie werden drei Finanzierungsarten für die Kosten zur Bewältigung der COVID-19-Pand Der erste Typ sind die Behandlungskosten für Patienten, bei denen schwere Symptome von IH(t) auftreten.
Der zweite Typ umfasst die Kosten für zusätzliche Gesundheitseinrichtungen für Patienten mit schweren Symptomen, die mit der Begründung abgelehnt werden, dass die vorhandenen Gesundheitseinrichtungen voll ausgela
Als letztes sind die Kosten der Interventionen anzuführen, die während des Zeitraums t durchgeführt wurden. In dieser Studie werden **die Kosten für die Behandlung des COVID-19-Patienten** Cp **in Gleichung (38) formuliert,**

$$Cp(t) = cpTp(t) + cdTd(t) + cmIH(t), \quad (38)$$

Dabei sind cp **die Kosten für die Bezahlung des Pflegepersonals,** cd **die Kosten für die Bezahlung der Ärzte und** cm **die Kosten für Verwaltungsaufwand und Medikamente, die zur Behandlung von COVID-19-Patienten innerhalb einer Woche erforderlic Die Kosten für den Ausbau der Gesundheitseinrichtungen** Cb **werden in Gleichung (39) ausgedrückt:**

$$Cb = cb \cdot \max\{0, \max_{T}\{B(t) \ddot{y} B0\}\} + c \left\lceil \frac{\max\{0, \max_{T}\{B(t) \ddot{y} B0\}}{100} \right\rceil, \quad (39)$$

wobei ÿ . ÿ **die Floor-Funktion,** c **die Kosten für den Bau einer Gesundheitseinrichtung,** cb **die Kosten für die Schaffung eines neuen Bettes und** B(t) **die Anzahl der zum Zeitpunkt t verfügbaren COVID-19-Behandlungsbetten sind . Darüber hinaus werden die Kosten der Intervention mit Gleichung (40) berechnet.**

$$CI = C1t1 + C2t2 + C3t3 + \ldots + Cntn$$
$$CI = \ddot{y}_{ich=1}^{N} Ci\,ti \quad (40)$$

Es gibt verschiedene Interventionen, die in einem Zeitintervall durchgeführt werden können.

Interventionen können auch gleichzeitig zwischen Intervention 1, Intervention 2, **Intervention 3 usw. durchgeführt werden .** Die Kosten der Intervention werden daher mit Gleichung (40) berechnet.
Basierend auf den Gleichungen (38)–(40) **müssen die Gesamtkosten für die Behandlung** der CT von COVID-19-Patienten **in Gleichung (41) ermittelt werden.**

$$CT = t \cdot Cp(t) + Cb + CI. \quad (41)$$

4.2. Ergebnisse der Parameterschätzung

In dieser Studie wurden die verwendeten Parameter anhand realer Daten geschätzt, um Simulationsergebnisse zu liefern, die den tatsächlichen Phänomenen im Feld am nächsten kommen. In dieser Studie wurden 11 Parameter verwendet. Zehn sind geschätzte Parameter und einer wird angenommen, da keine Daten verfügbar sind.
In dieser Studie wird der Parameter n angenommen, also der Bettenanteil, der innerhalb der nächsten Woche hinzugefügt werden kann. In dieser Studie haben wir den Wert n = **0,05 verwendet. Wir verwenden diesen Wert unter Berücksichtigung des verwendeten Zeitintervalls; eine Woche ist eine kurze Zeitspanne, was bedeutet, dass es trotz der staatlichen Mittel immer noch eine Frist gibt, die die Anzahl der Betten, die hinzugefügt werden können, begrenzen kann. Darüber hinaus verwenden wir für andere geschätzte Parameter reale Daten**

Machine Translated by Google

im Zusammenhang mit der Definition dieser Parameter. Alle Parameterschätzungsergebnisse in dieser Studie sind in Tabelle 1 zusammengefasst.

- **Der Parameter** v **wird anhand von Daten zur Anzahl der Krankenhausbetten in West-Java im Jahr 2019 geschätzt.**
- **Der** dNH- **Parameter wurde anhand täglicher COVID-19-Mortalitätsdaten geschätzt. Der** dH, Die dRNH- Parameter werden anhand der dNH- Parameter **kalibriert, wobei die Todesfälle während der Quarantäne.**
- **Der** rNH- **Parameter wurde anhand täglicher COVID-19-Genesungsdaten geschätzt. Für Parameter** rH und rRNH wurden **anhand der während der Quarantäne aufgetretenen Heilungen** aus dem Parameter rNH **kalibriert .**
- **Der Parameter** k **wird unter Verwendung der Parameter** d **und** r **gemäß den Gleichungen (21)–(23) geschätzt.**
- **Der Parameter** p **wird unter Verwendung des Parameters** k **und der Gleichungen (25)–(27) geschätzt.**

Tabelle 1. Ergebnisse der Parameterschätzung.

Parameter	Definition	Wert	Details
N	Expandierbare Bettfraktion	0,05	Vermutet
–	Bettenanteil zu Beginn der Pandemie	0,1481	Geschätzt
dH	Sterbewahrscheinlichkeit von Patienten mit schweren Symptomen, die werden in Gesundheitseinrichtungen behandelt	0,0011	Geschätzt
dRNH	Sterbewahrscheinlichkeit von Patienten mit schweren Symptomen, die nicht in einer Gesundheitseinrichtung behandelt werden	0,0017	Geschätzt
dNH	Wahrscheinlichkeit des Todes eines Patienten, der keine Behandlung in einer Gesundheitseinrichtung	0,0006	Geschätzt
rH	Heilungswahrscheinlichkeit bei Patienten mit schweren Symptomen die in Gesundheitseinrichtungen behandelt werden	0,0654	Geschätzt
rRNH	Heilungswahrscheinlichkeit bei Patienten mit schweren Symptomen die nicht in Gesundheitseinrichtungen behandelt werden	0,0327	Geschätzt
rNH	Heilungswahrscheinlichkeit bei Patienten, die keine Behandlung in einer Gesundheitseinrichtung	0,0981	Geschätzt
k	Wahrscheinlichkeit, dass der Patient das Abteil I verlässt	0,0665	Geschätzt
pb	Wahrscheinlichkeit des Übergangs von leichten zu schweren Symptomen	0,0095	Geschätzt
pr	Wahrscheinlichkeit des Übergangs von schweren zu leichten Symptomen	0,0221	Geschätzt

Die in Tabelle 1 **angegebenen Parameter werden dann in dieser Arbeit für numerische Simulationen des COVID-19-Ausbreitungsmodells verwendet. Die Ergebnisse der Parameterschätzung werd Bevor das Modell in numerischen Simulationen eingesetzt wird, muss die Richtigkeit des Modells anhand die verwendeten Daten. Der Validierungsprozess stellt sicher, dass das Modell die reale Welt genau widerspiegelt Szenarien und können zuverlässige Vorhersagen für die Ausbreitung von COVID-19 liefern. Diese strenge Ansatz erhöht die Glaubwürdigkeit und Nützlichkeit der Simulationsergebnisse bei der Orientierung der Öffentlichkeit Gesundheitsinterventionen und Entscheidungsfindung. Dies wird grafisch erreicht, indem eine Simulation des Modells, das mit den in Tabelle 1 aufgeführten Parametern erstellt wurde. Abbildungen 5 und 6 zeigt ein Diagramm der Modellvorhersagen im Vergleich zu den Daten zu COVID-19-Fällen in West-Java.**

Abbildung 5 vergleicht Modellvorhersagen und reale Daten zu anfälligen oder empfänglichen (S) Populationen. Aus der Grafik ist ersichtlich, dass die in dieser Studie verwendeten Parameter geeignet für den Einsatz in numerischen Simulationen, wie die identischen Formen des Modells belegen Vorhersagediagramme und reale Daten. Die Grafik zeigt, dass die Vorhersagen des Modells genau sind verglichen mit den Originaldaten, und die Parameter sind für numerische Simulationen geeignet.

Die Übereinstimmung zwischen den Modellvorhersagen und den tatsächlichen Daten lässt darauf schließen, dass das Modell wirksam ist bei der Erfassung der Dynamik der COVID-19-Fälle in West-Java. Diese Validierung der Parameter Die verwendete Methode erhöht die Zuverlässigkeit der in dieser Studie durchgeführten numerischen Simulationen. Abbildung 6 vergleicht die Vorhersagen des Modells mit den realen Daten zur infizierten (I) Bevölkerung.

Machine Translated by Google

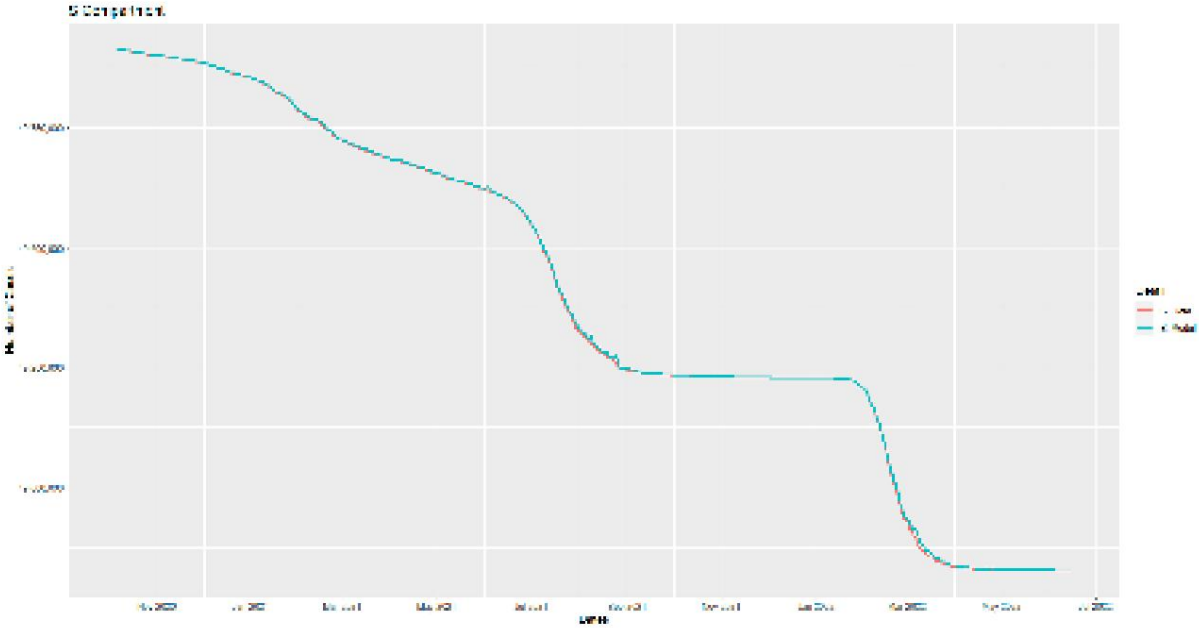


Abbildung 5. Vergleich zwischen Modellvorhersagen und Daten im S-Kompartiment.

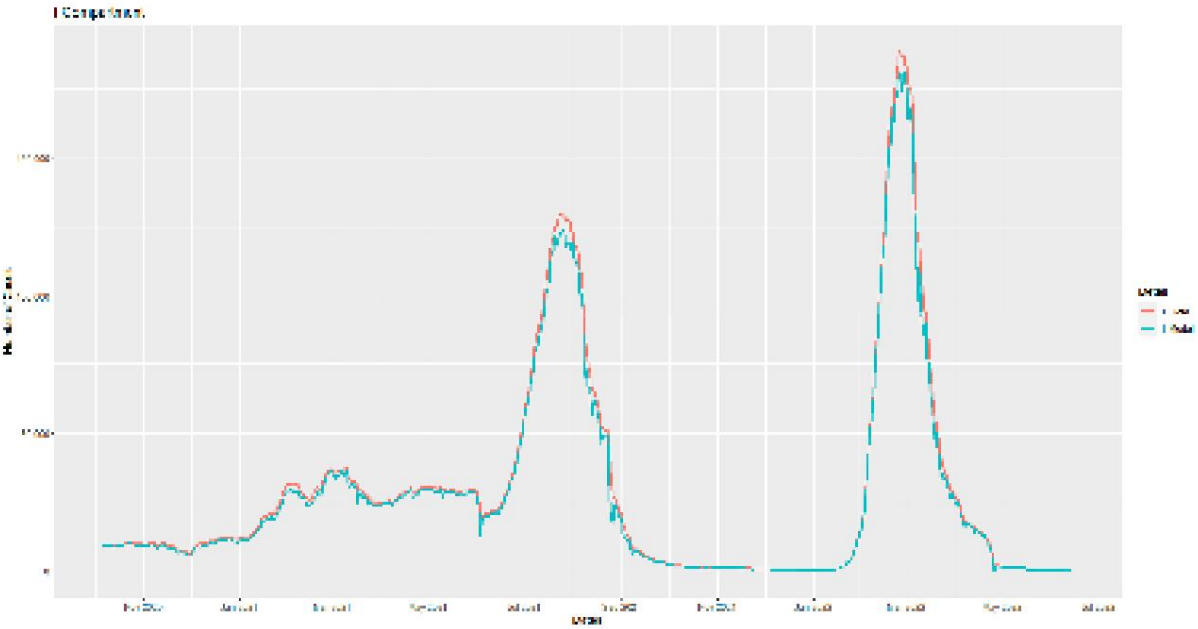


Abbildung 6. Vergleich zwischen Modellvorhersagen und Daten in Kompartiment I.

Um den Vorhersagegraphen des Modells in I zu erhalten, wird Gleichung (34) verwendet. Anhand des Graphen ist bekannt, dass die Vorhersageergebnisse des Modells mit den realen Daten übereinstimmen . Dies geht aus dem Simulationsgraphen hervor, der mit den Originaldaten identisch ist. Diese Übereinstimmung zwischen den Modellvorhersagen und den tatsächlichen Daten bestätigt die Genauigkeit der in der Studie verwendeten Parameter. Die Übereinstimmung zwischen dem Simulationsgraphen und den realen Daten unterstützt weiterhin die Zuverlässigkeit der durchgeführten numerischen Simulationen. Dies bedeutet, dass die Vorhersagen des Modells im Vergleich zu den Originaldaten genau sind und die Parameter für numerische Simulationen geeignet sind. Insgesamt weist die enge Übereinstimmung zwischen den Simulationsergebnissen und den realen Daten darauf hin, dass das Modell ein zuverlässiges Werkzeug zur Vorhersage von Ergebnissen in ähnlichen Szenarien ist. Die erfolgreiche Validierung der in der Studie verwendeten Parameter erhöht die Glaubwürdigkeit der durchgeführten n

Machine Translated by Google

4.3. Sensitivitätsanalyse

Vor der Verwendung der geschätzten Parameter in der numerischen Simulation wird für jeden Parameter eine Sensitivitätsanalyse durchgeführt. Dieses Verfahren hilft zu verstehen, wie Variationen in jedem Parameter die Gesamtausgabe des Modells beeinflussen, und erleichtert so die erforderlichen Anpassungen. Durch die Berechnung des MAPE in Fach I können Forscher die Genauigkeit des Modells bewerten und weitere Verfeinerungen zur Verbesserung der Zuverlässigkeit implementieren. Die Sensitivitätsanalyse wurde mit der One-at-a-time-Methode (OAT) durchgeführt, bei der jeder Parameter systematisch einzeln variiert wurde, während die anderen konstant gehalten wurden. Diese Methode ermöglicht eine klare und isolierte Bewertung der Auswirkungen jedes Parameters auf die Ausgabe des Modells. Durch die Anpassung eines Parameters nach dem anderen und die Beobachtung der entsprechenden Änderungen in den Leistungsmetriken des Modells, wie z. B. dem mittleren absoluten prozentualen Fehler (MAPE), wird es möglich, die Parameter mit dem größten Einfluss auf das Modell zu identifizieren. Dieser umfassende Ansatz erleichtert ein gründliches Verständnis der Sensitivität des Modells gegenüber verschiedenen Parametern und unterstützt so seine Verfeinerung zur Verbesserung der Genauigkeit und Robustheit. Darüber hinaus hilft die OAT-Methode dabei, potenzielle Wechselwirkungen zw Bei dieser Analyse werden die geschätzten Parameter um ±10 % variiert . Anschließend wird die Simulation durchgeführt und der mittlere absolute prozentuale Fehler (MAPE) für Kompartiment I berechnet. Die Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse, dargestellt in Abbildung 7, veranschaulichen die Auswirkungen von Parametervariationen auf die MAPE-Basislinie.

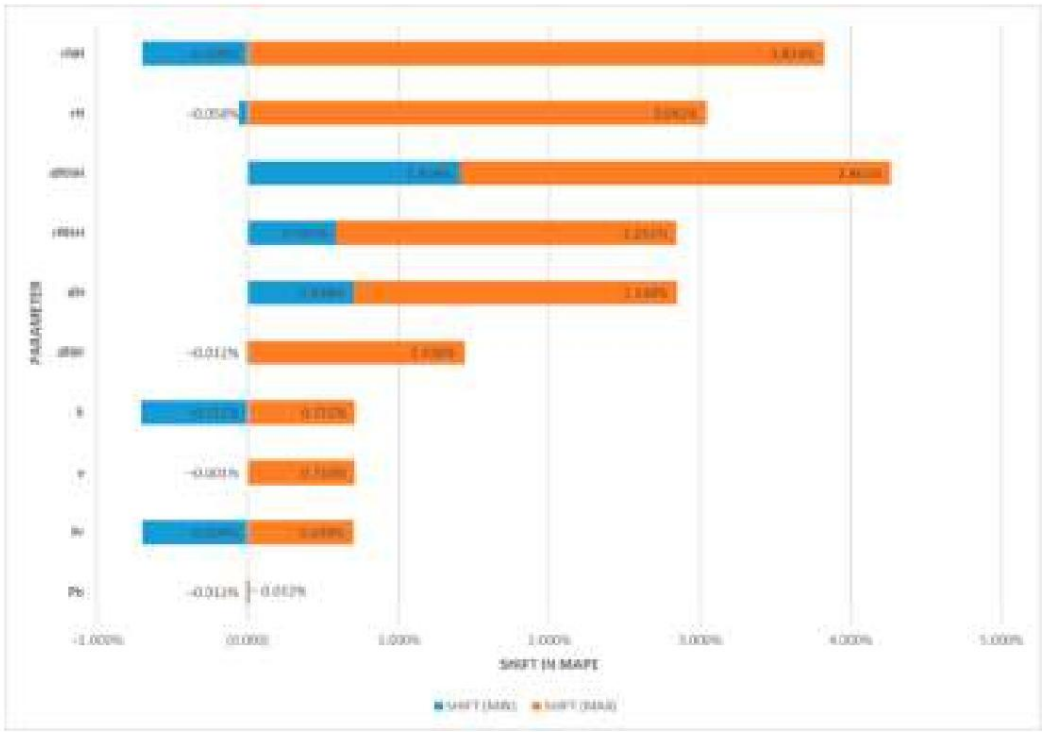


Abbildung 7. Änderung im MAPE.

Basierend auf Abbildung 7 bewirkt der Parameter die bedeutendste Änderung des MAPE, die 3,824 % beträgt. Darauf folgt der rH- **Parameter, der zu einer MAPE-Änderung von 3,042 % führt. Bemerkenswerterweise haben die Übergangsparameter nur minimale Auswirkungen auf MAPE. Beispielsweise ändert der Parameter MAPE um ÿ0,012 %, während der Parameter eine Änderung von 0,699 % verursacht . Abbildung 7 zeigt weiter, dass die Gesamtänderungen des MAPE relativ Bei einem MAPE-Basiswert von 7,12 % bleibt der MAPE-Wert trotz der größten Abweichung immer noch im 10-%-Bereich. Dies zeigt, dass der MAPE-Wert trotz der Parameterabweichungen innerhalb der akzeptablen Schwelle bleibt, da das maximale MAPE-Kriterium für diese Studie auf 20 % festgelegt ist. Insgesamt zeigen die Ergebnisse, dass die Übergangsparameter einen relativ geringen Einfluss auf die MAPE-Werte haben und die Änderungen innerhalb zulässiger Grenzen bleiben.**

Machine Translated by Google

Dies lässt darauf schließen, dass das Modell robust ist und Abweichungen in diesen Parametern effektiv berücksichtigen kann, ohne dass die Genauigkeit wesentlich beeinträchtigt wird.

4.4. Ergebnisse der numerischen Simulation

Ziel dieser numerischen Simulation ist es, die Bevölkerungsdynamik während der COVID-19-Pandemie darzustellen . Um ein Simulationsdiagramm jedes Bevölkerungsteils zu erhalten, wenden Sie die Gleichungen (33)–(37) an. Das Simulationsdiagramm bietet eine visuelle Darstellung, wie sich jeder Bevölkerungsteil im Laufe der Zeit auf der Grundlage der bereitgestellten Gleichungen verändert. Dies ermöglicht ein besseres Verständnis der Dynamik der COVID-19-Pandemie und hilft dabei, fundierte Entscheidungen bezüglich öffentlicher Gesundheitsmaßnahmen zu treffen. Die numerische Simulation in dieser Arbeit verwendet die in Tabelle 1 dargestellten Parameter. Die Abbildungen 8–10 zeigen die COVID-19-Bevölkerungsmuster ir

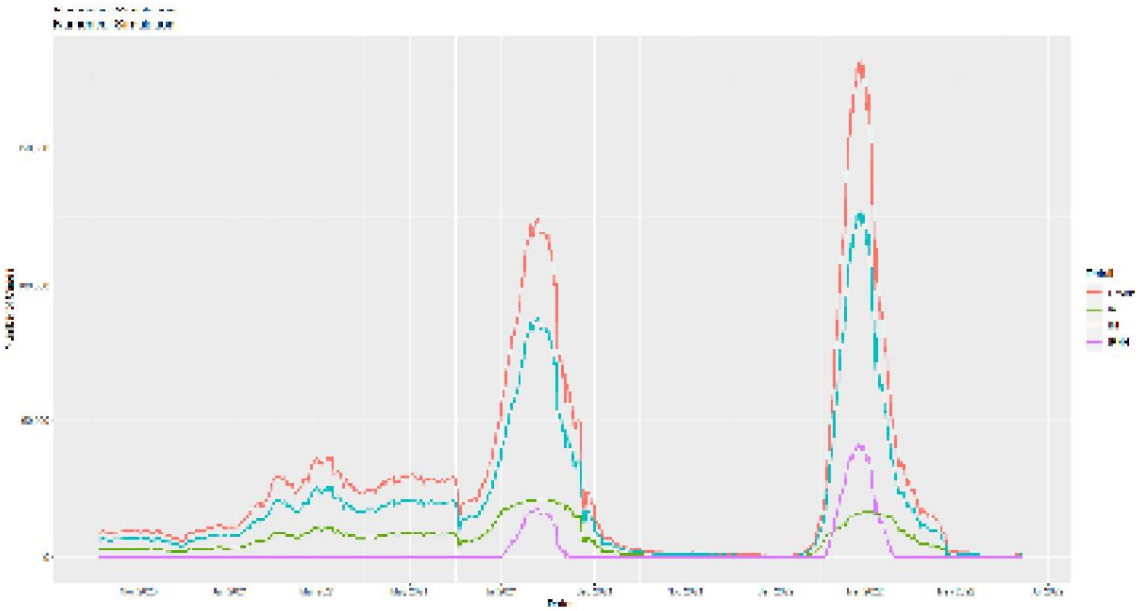


Abbildung 8. Ergebnisse der numerischen Simulation ohne Interventionsszenario.

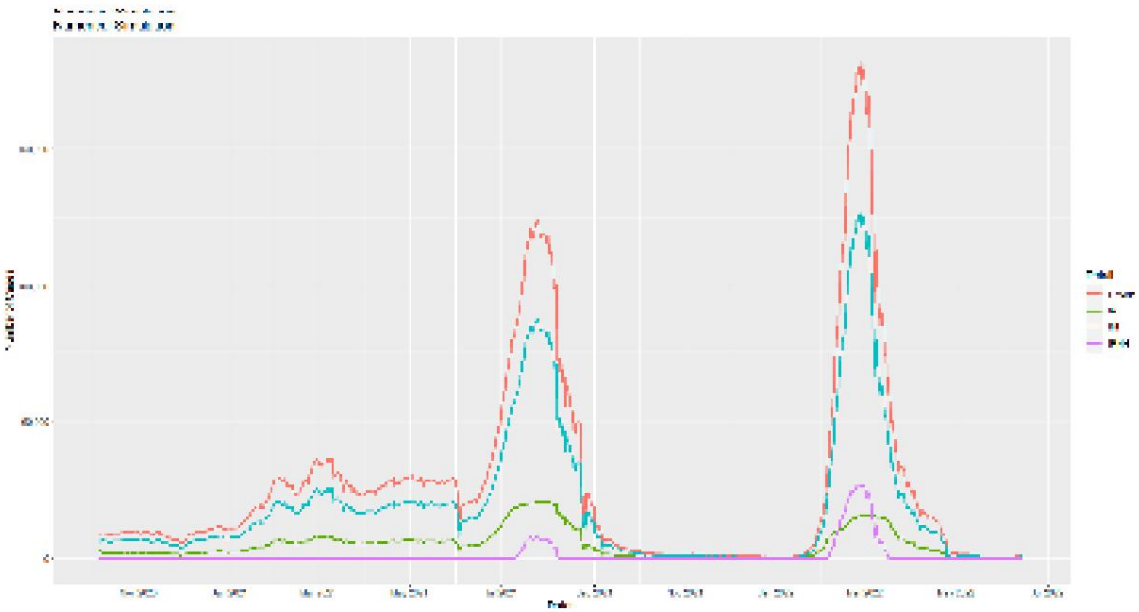


Abbildung 9. Ergebnisse der numerischen Simulation des Szenarios „Social Distancing“.

Machine Translated by Google

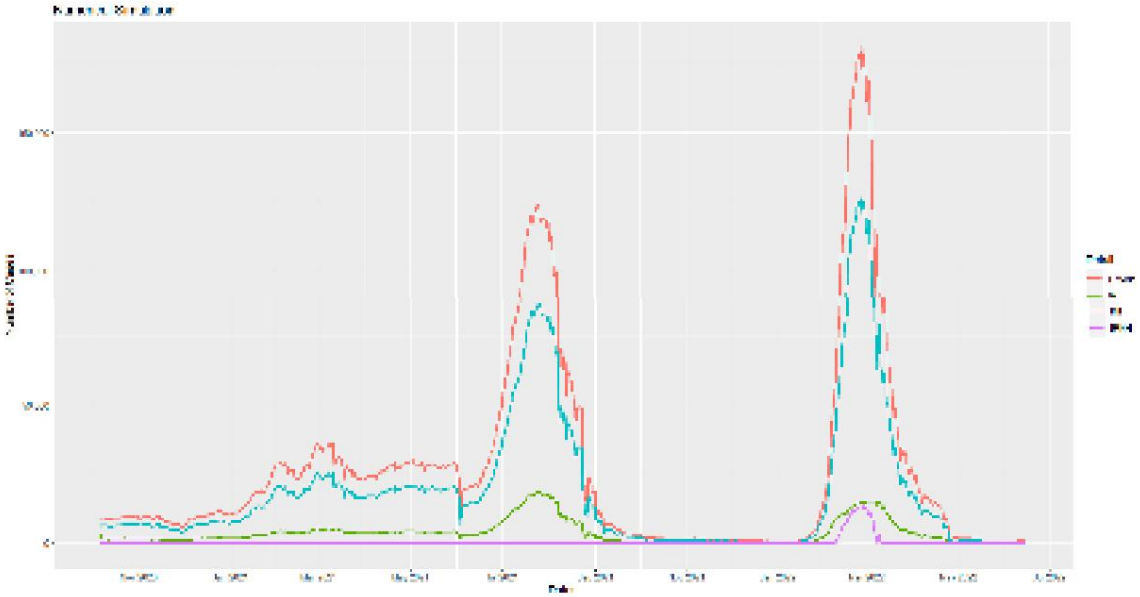


Abbildung 10. Ergebnisse der numerischen Simulation des Lockdown-Szenarios.

Abbildung 8 zeigt die Ergebnisse numerischer Simulationen der Ausbreitung der mit COVID-19 infizierten Bevölkerung unter Verwendung des erstellten Modells. In Abbildung 8 wird das Szenario ohne Intervention verwendet. Die Simulation zeigt einen raschen Anstieg der Zahl der infizierten Personen im Laufe der Zeit und unterstreicht die Bedeutung der Umsetzung von Interventionen zur Eindämmung der Ausbreitung des Virus. Diese Ergebnisse unterstreichen die potenzielle Wirkung von Präventivmaßnahmen auf die Eindämmung der Auswirkungen der Pandemie. Abbildung 8 zeigt , dass ohne Intervention die Zahl der COVID-19-Fälle sehr hoch ist. Darüber hinaus wurde im Szenario ohne Intervention der Regierung festgestellt, dass es zweimal zu einer Patientenabweisung kam, nämlich im August 2021 und im Februar 2022. Dies deutet darauf hin, dass das Gesundheitssystem in West-Java ohne Intervention überlastet werden könnte, was zu einer Patientenabweisung führen würde. Daher ist es für die Behörden von entscheidender Bedeutung, strenge Maßnahmen wie Ausgangssperren, Maskenpflicht und soziale Distanzierung durchzusetzen, um ein solches Szenario zu verhindern. Die Umsetzung dieser Interventionen kann dazu beitragen, die Belastung der Gesundheitseinrichtungen zu verringern und letztendlich Leben zu retten. Die Daten aus Abbildung 8 unterstreichen, wie wichtig die Umsetzung wirksamer Maßnahmen zur Eindämmung der Ausbreitung von COVID-19 ist, um derart hohe Fallzahlen und eine potenzielle Belastung d

Abbildung 9 zeigt die Ergebnisse numerischer Simulationen der Ausbreitung der mit COVID-19 infizierten Bevölkerung unter Verwendung des erstellten Modells. In Abbildung 9 wird das Szenario mit sozialer Distanzierungsintervention verwendet. Die Simulationsergebnisse zeigen eine signifikante Verringerung der Anzahl infizierter Personen im Vergleich zu Szenarien ohne soziale Distanzierungsmaßnahmen. Dies unterstreicht die Wirksamkeit der Umsetzung sozialer Distanzierungsinterventionen bei der Eindämmung der Ausbreitung von COVID-19. Abbildung 9 zeigt, dass mit der sozialen Distanzierungsintervention die Zahl der aufgetretenen COVID-19-Fälle im Vergleich zu ohne Intervention zurückgegangen ist . Darüber hinaus wurde im Szenario mit sozialer Distanzierungsintervention festgestellt, dass es zweimal zu einer Patientenabweisung kam, nämlich im August 2021 und Februar 2022, wobei die Anzahl der Ablehnungen im Vergleich zu ohne Intervention geringer war. Diese Ergebnisse deuten darauf hin, dass soziale Distanzierungsmaßnahmen eine entscheidende Rolle bei der Verringerung der Belastung der Gesundheitssysteme gespielt haben, indem sie einen Anstieg der Fälle verhindert haben. Die Daten unterstreichen die Bedeutung der weiteren Einhaltung dieser Interventionen, um die Auswirkungen der Pandemie abzumildern. Diese Ergebnisse deuten darauf hin, dass die Umsetzung sozialer Distanzierungsmaßnahmen die Ausbreitung von COVID-19 wirksam eindämmen und die Anzahl der Patientenabweisungen verringern kann. Die Ergebnisse unterstreichen die Bedeutung proaktiver Eingriffe be

Machine Translated by Google

Abbildung 10 zeigt die Ergebnisse numerischer Simulationen der Ausbreitung der mit COVID-19 infizierten Bevölkerung unter Verwendung des erstellten Modells. In Abbildung 10 wird das Szenario mit Lockdown-Intervention verwendet. Abbildung 10 zeigt, dass mit Lockdown-Intervention die Zahl der aufgetretenen COVID-19-Fälle im Vergleich zu keiner Intervention und sozialer Distanzierung ff zurückgegangen ist . Darüber hinaus wurde im Szenario mit Lockdown-Intervention festgestellt, dass es nur einmal, nämlich im Februar 2022, zu einer Patientenabweisung kam, wobei die Anzahl der Ablehnungen im Vergleich zu keiner Intervention und sozialer Distanzierung geringer war. Insgesamt deuten die Ergebnisse darauf hin, dass die Umsetzung einer Lockdown-Intervention die Ausbreitung von COVID-19 wirksam eindämmen und Patientenabweisungen minimieren kann. Dies unterstreicht die Bedeutung strenger Maßnahmen zur Eindämmung der Pandemie und zum Schutz der öffentlichen Gesundheit.

Anhand der Abbildungen 8–10 lässt sich feststellen, dass die Zahl der Patienten, die ff schwere Symptome aufweisen und behandelt werden müssen, im Allgemeinen 0 beträgt. Dies bedeutet, dass in den meisten Zeiträumen alle COVID- 19-Patienten mit schweren Symptomen ff trotz der Zunahme der Infektionsfälle eine Be Dies deutet darauf hin, dass das Gesundheitssystem in West-Java in der Lage ist, den Zustrom schwerer COVID-19-Fälle wirksam zu bewältigen. Die Daten aus dieser Simulation können für politische Entscheidungsträger wertvoll sein, um die Wirksamkeit verschiedener Maßnahmen im Bereich der öffentlichen Gesundheit zu bestimmen. Wenn der Anstieg der Infektionsfälle jedoch zu hoch ist, beispielsweise im Juni 2021 und Januar 2022, führt dies dazu, dass das Krankenhaus den Anstieg der Fälle nicht bewältigen kann und COVID-19-Patienten abgewiesen werden oder keine Behandlung erhalten. Bei der Überprüfung auf der Grundlage des verwendeten Szenarios wurde festgestellt, dass im Szenario der sozialen Distanzierung ff die Zahl der Patientenabweisungen geringer war als ohne Intervention, während es im Szenario des Lockdowns nur im Zeitraum Januar 2022 zu Ablehnungen kam. Dies unterstreicht, wie wichtig es ist, rechtzeitig und wirksam Maßnahmen im Bereich der öffentlichen Gesur Es unterstreicht auch die Notwendigkeit einer kontinuierlichen Überwachung und Anpassung von Strategien auf der Grundlage von Simulationsergebnissen, um optimale Ergebnisse sicherzustellen. Um zu bestimmen, wie die Auswirkungen auf die Gesundheitskosten vorbereitet werden müssen, werden die Gleichungen (40) und (41) verwendet. Die Grafik der Kosten , die von der Regierung vorbereitet werden müssen, ist in den Abbildungen 11–13 darges

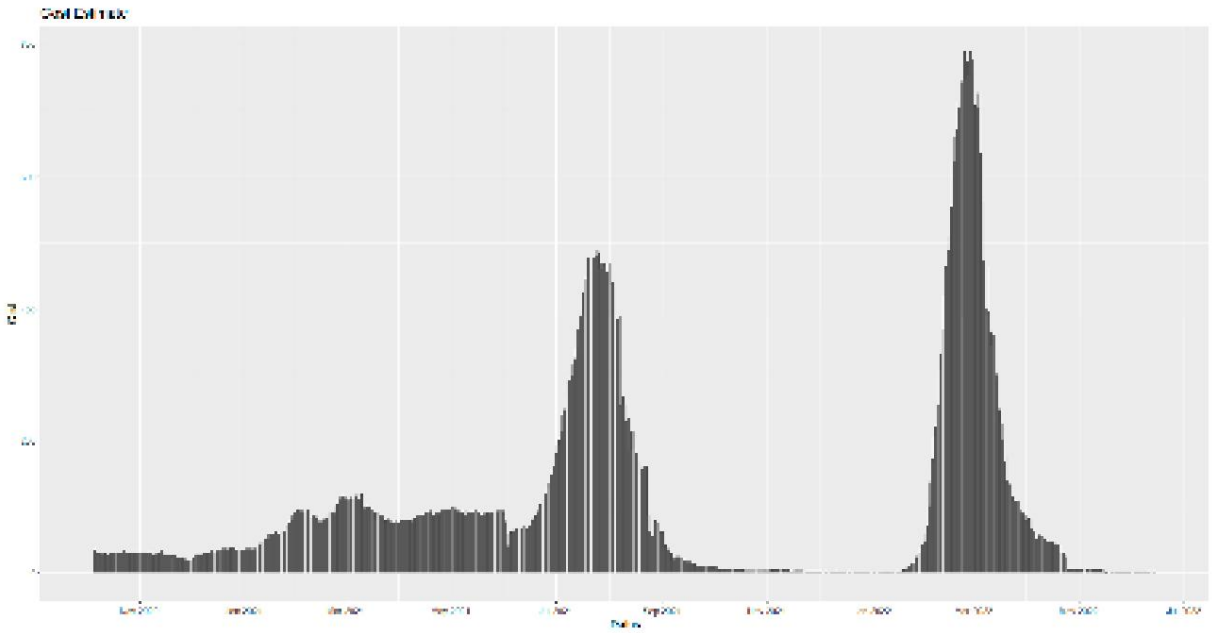


Abbildung 11. Ergebnisse der Kostenschätzung ohne Interventionsszenario.

Machine Translated by Google

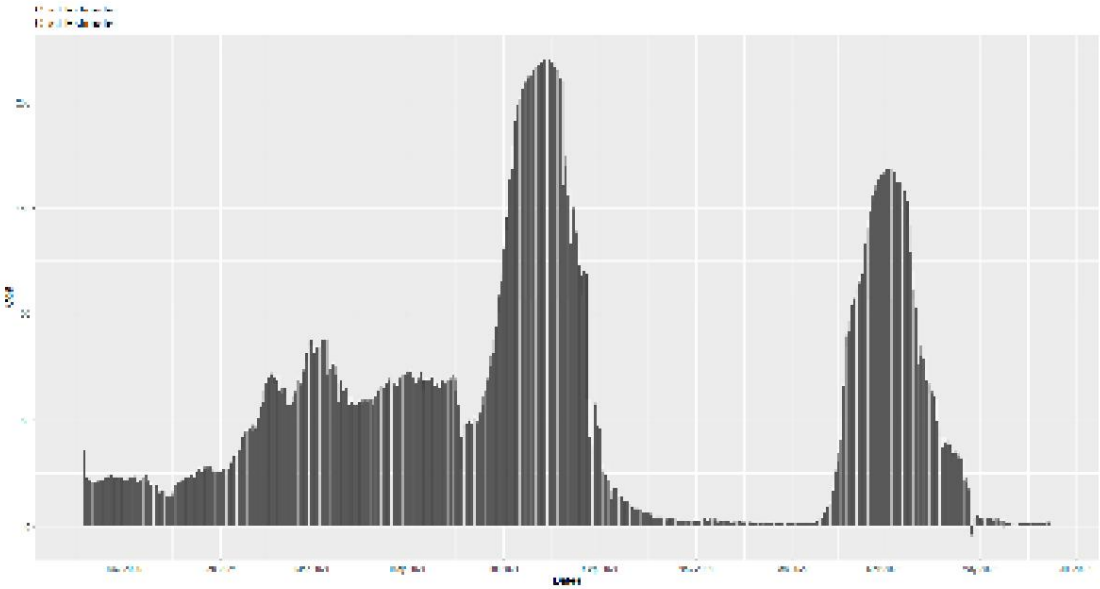


Abbildung 12. Ergebnisse der Kostenschätzung im Szenario „Social Distancing“.

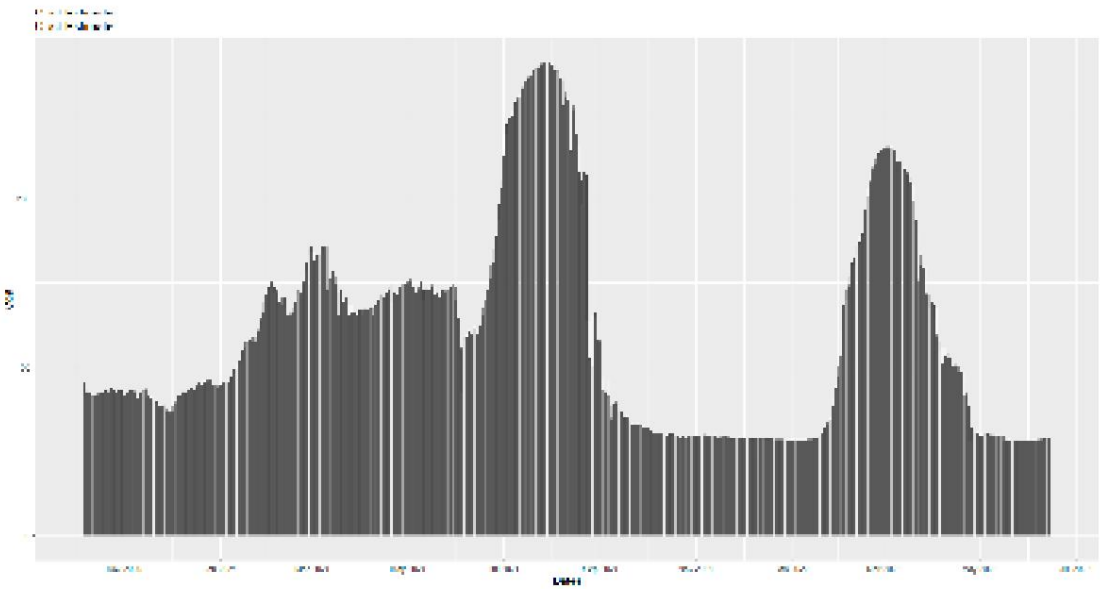


Abbildung 13. Ergebnisse der Kostenschätzung im Lockdown-Szenario.

Abbildung 11 zeigt die geschätzten Kosten für die Bewältigung der COVID-19-Pandemie basierend auf den Modellierungsergebnissen. Die Kostenprognosen berücksichtigen verschiedene Faktoren wie Gesundheitskosten , wirtschaftliche Auswirkungen und staatliche Reaktionsmaßnahmen. Es ist wichtig zu beachten, dass sich diese Schätzungen aufgrund der sich entwickelnden Natur der Pandemie und der Wirksamkeit der Eindämmungsbemühungen ändern können. Abbildung 11 zeigt, dass es in den Zeiträumen August 2021 und Februar 2022 einen Anstieg der Behandlungskosten gibt. Abbildung 11 zeigt, dass es im selben Zeitraum auch einen Anstieg der COVID-19-Fälle und der Patientenabweisung gab. Diese Spitzen bei den Behandlungskosten fallen mit Spitzen bei den COVID-19-Fällen und den Patientenabweisungsraten zusammen, was auf eine direkte Korrelation zwischen beiden hindeutet. Diese Informationen können politischen Entscheidungsträgern helfen ,

und Gesundheitsdienstleister können künftige Ausbrüche der Pandemie besser vorhersehen und Ressourcen besser zuweisen. Dies zeigt, dass die Ablehnung von COVID-19-Patienten die Kosten erhöhen kann, die der Regierung entstehen müssen. Dies liegt daran, dass die Regierung alle COVID-19-Patienten aufnehmen muss und bei Ablehnungsfällen die Bettenkapazität erhöht werden muss, was zu einem Anstieg der Kosten für die Bewältigung der COV

Machine Translated by Google

Abbildung 12 zeigt die geschätzten Kosten für die Bewältigung der COVID-19-Pandemie basierend auf den Modellierungsergebnissen. Basierend auf Abbildung 12 sind die Kosten, die für die Bewältigung einer Pandemie mit einem Szenario der sozialen Distanzierung aufgewendet werden müssen, geringer als ohne jegliche Intervention. Dies deutet darauf hin, dass die Umsetzung von Maßnahmen zur sozialen Distanzierung dazu beitragen kann, die mit der Bewältigung einer Pandemie verbundene finanzielle Belastung zu verringern . Es ist für politische Entscheidungsträger von entscheidender Bedeutung, diese Kostenschätzungen bei Entscheidungen über Maßnahmen im Bereich der öffentlichen Gesundheit zu berücksichtigen. Darüber hinaus zeigt Abbildung 12 , dass es in den Zeiträumen August 2021 und Februar 2022 zu einem Anstieg der Behandlungskosten kommt, wobei der Betrag im Vergleich zum Szenario ohne jegliche Intervention geringer ist. Abbildung 9 zeigt, dass es im selben Zeitraum auch zu einem Anstieg der COVID-19-Fälle und der Patientenabweisungen kam. Dies zeigt, dass die Ablehnung von COVID-19-Patienten die Kosten erhöhen kann, die der Regierung aufgewendet werden müssen. Dies liegt daran, dass die Regierung alle COVID-19-Patienten aufnehmen muss und bei Ablehnungsfällen die Bettenkapazität erhöht werden muss, was zu einem Anstieg der Kosten für die Bewältigung der COVID-19-Pandemie führt. Daher kann eine Verringerung der Patientenablehnung dazu beitragen, die finanzielle Belastung des Staates und des Gesundheitssystems zu verringern. Die Umsetzung von Strategien zur Bekämpfung der Patientenablehnung, wie etwa eine verbesserte Kommunikation und Koordination zwischen Gesundheitseinrichtunge

Abbildung 13 zeigt die geschätzten Kosten für die Bewältigung der COVID-19-Pandemie basierend auf den Modellierungsergebnissen mit dem Lockdown-Szenario. Die geschätzten Kosten umfassen Gesundheitsausgaben , wirtschaftliche Verluste und staatliche Konjunkturpakete. Es ist für politische Entscheidungsträger von entscheidender Bedeutung, diese Prognosen bei Entscheidungen über Maßnahmen im Bereich der öffentlichen Gesundheit und Pläne zur wirtschaftlichen Erholung zu berücksichtigen. Basierend auf Abbildung 13 sind die Kosten, die für die Bewältigung einer Pandemie mit einem Lockdown-Szenario aufgewendet werden müssen, geringer als ohne jegliche Intervention. Darüber hinaus zeigt Abbildung 13 , dass es in den Zeiträumen August 2021 und Februar 2022 zu einem Anstieg der Bewältigungskosten kommt , wobei der Betrag im Vergleich zum Szenario ohne Intervention geringer ist. Dies deutet darauf hin, dass die Umsetzung eines Lockdowns dazu beitragen kann, die mit einer Pandemie verbundenen Gesamtkosten zu mindern. Es ist jedoch wichtig, die wirtschaftlichen Auswirkungen solcher Maßnahmen sorgfältig gegen ihren potenziellen Nutzen im Hinblick auf die öffentliche Gesundheit und die langfristige Genesung abzuwägen. In Abbildung 10 ist dargestellt, dass es im gleichen Zeitraum auch zu einem Anstieg der COVID-19-Fälle und der Patientenabweisung kam. Dies zeigt, dass die Ablehnung von COVID-19- Patienten die von der Regierung verursachten Kosten erhöhen kann. Dies liegt daran, dass die Regierung alle COVID-19-Patienten aufnehmen muss und bei Ablehnungsfällen die Bettenkapazität erhöht werden muss; dies führt zu einem Anstieg der Kosten für die Bekämpfung der COVID-19- Pandemie. Dies führt zu einer Belastung der Ressourcen und der Finanzierung anderer wichtiger Initiativen im Bereich der öffentlichen Gesundheit. Es ist von entscheidender Bedeutung, dass Regierungen Probleme mit der Ablehnung von Patienten umgehend angehen, um eine effiziente Ressourcenzuweisung sicherzustellen und eine unnötige Belastung des Gesundheitssystems zu vermeiden. Durch die Umsetzung von Strategien zur Reduzierung der Ablehnungsraten von Patienten können Regierungen die finanzielle Belastung der COVID-19-Pa

Anhand der Abbildungen 11–13 wurde festgestellt, dass die Kosten für die Behandlung von COVID-19 stiegen, wenn auch die Zahl der bestehenden COVID-19-Patienten zunahm. Darüber hinaus wurde auch festgestellt, dass die Kosten für die Behandlung von COVID-19-Fällen nach dem Anstieg sanken und tendenziell niedrig blieben, bis der nächste Anstieg auftrat. Daher ist es für die Regierung von entscheidender Bedeutung, die Zahl der bestehenden COVID-19-Patienten genau zu überwachen, um potenzielle Anstiege der Gesundheitskosten vorherzusehen und sich darauf vorzubereiten. Durch Verwendung der Gleichungen (40) und (41) und Analyse der Grafik in den Abbildungen 8–10 können politische Entscheidungsträger fundierte Entscheidungen treffen, um Ressourcen für die Behandlung von COVID-19-Fällen effektiv zu verwalten und zuzuweisen. Dies deutet darauf hin, dass nach einem Anstieg der Fälle das öffentliche Bewusstsein zunimmt, was zu einer Verringerung der COVID-19-Fälle führt, sodass sich die Menschen wieder sicher fühlen und die Gesundheitsprotokolle lockern, was dazu führt, dass die Zahl der COVID-19-Fälle wieder steigt. Für politische Entscheidungsträger ist es von entscheidender Bedeutung, Trends und Muster bei COVID-19-Fällen genau zu verfolgen, um rechtzeitig Maßnahmen ergreifen und eine Überlastung der Gesundheitssysteme verhindern zu können. Durch kontinuierliche Überwachung und Anpassung von Strategien auf der Grundlage von Datenanalysen können die Auswirkungen poten

Machine Translated by Google

Szenario 3 mit Lockdown-Intervention, das 73 Milliarden IDR kostet; die höchsten Kosten entstehen bei Szenario 1 ohne Intervention, das 67,42 Milliarden IDR kostet; und die geringsten Kosten entstehen bei Szenario 2, das 32,872 Milliarden IDR kostet. Diese Ergebnisse deuten darauf hin, dass die Umsetzung einer Lockdown-Intervention zu höheren Gesamtkosten führen kann als Szenarien ohne Intervention. Es ist entscheidend, dass politische Entscheidungsträger die **wirtschaftlichen Auswirkungen verschiedener Strategien zur Bewältigung von COVID-19-Ausbrüch**

5. Diskussion

Ziel dieser Studie ist es, ein Kostenmodell für COVID-19-Patienten zu erstellen, das (a) die Patienten, die bis zu ihrer Genesung behandelt werden, und (b) zusätzliche Krankenhausbettenkapazitäten bei Bedarf berücksichtigt. Die Erstellung des Modells zur Ermittlung der Kosten für die Behandlung von COVID-19, das in dieser Studie die Möglichkeit eines Übergangs in der Schwere der Symptome einbezieht, wurde erfolgreich durchgeführt, die Ergebnisse sind in den Gleichungen (33)–(37) dargestellt. Das Modell berücksichtigt verschiedene Faktoren wie Dauer des Krankenhausaufenthaltes, Schwere der Symptome und erforderliche medizinische Eingriffe, um eine umfassende Kostenschätzung zu erstellen. Durch die Einbeziehung dieser Variablen können Gesundheitsdienstleister die finanziellen Auswirkungen der Behandlung von COVID-19-Patienten besser verstehen und Ressourcen effektiver zuweisen. Das durch die Gleichung gegebene Modell kann verwendet werden, um die Höhe der Kosten zu bestimmen, die die Regierung für die Behandlung infizierter Patienten und die Erhöhung der Kapazitäten aufbringen muss. Darüber hinaus berücksichtigt das Modell die möglichen Schwankungen des Patientenzustands und gewährleistet so eine genauere Kostenschätzung. Durch die Verwendung dieses umfassenden Kostenmodells können politische Entscheidungsträger Ressourcen besser zuweisen und potenzielle Anstiege der COVID-19-Fälle planen. Dies wird letztendlich dazu beitragen, die Ressourcen des Gesundheitswesens zu optimieren und eine rechtzeitige und wirksame Reaktion auf die Pandemie sicherzustellen. Darüber hinaus kann das Modell für zukünftige Ausbrüche oder andere Notfälle im Bereich der öffentlichen Gesundheit angepasst werden, um d

Basierend auf den durchgeführten Simulationen haben wir festgestellt, dass die anfällige Bevölkerung im Laufe der Zeit weiter abnehmen wird. Die Situation entsteht durch das anhaltende Auftreten von COVID-19-Infektionen, gefolgt von anschließenden Genesungen innerhalb der Bevölkerung über einen bestimmten Zeitraum. Dies ist der Grund, warum die gefährdete Bevölkerung im Laufe der Zeit weiter wächst.
Das Gegenteil gilt für die genesene Bevölkerung – im Laufe der Zeit wird diese Bevölkerung weiter wachsen. Bei der infizierten Bevölkerung ist etwas Interessantes passiert. In dieser Bevölkerung wurde eine Fluktuation festgestellt, unter anderem im Juni 2021 und Januar 2022. In diesen Monaten gab es einen deutlichen Anstieg der COVID-19-Fälle, was zu einem sprunghaften Anstieg der infizierten Bevölkerung führte. Mit geeigneten Maßnahmen und Interventionen nahm die infizierte Bevölkerung jedoch allmählich wieder ab. In diesem Zeitraum gab es einen deutlichen Anstieg, bevor er weiter sank, bis er wieder auf einem stabilen Tiefstand lag. Dieser Anstieg wirkt sich sowohl auf die entstandenen Kosten als auch auf die Anzahl der Patienten aus, die vom Krankenhaus nicht aufgenommen werden. Es ist wichtig, dass Gesundheitseinrichtungen diese Schwankungen genau überwachen, um Ressourcen effektiv zuzuweisen und den Bedürftigen rechtzeitig Hilfe zukommen zu lassen. Durch das Verständnis der Trends bei der infizierten Bevölkerung können sich Krankenhäuser besser auf mögliche Anstiege der Fälle vorbereiten und ihre Kapazitäten entsprechend anpassen. Darüber hinaus kann die Verfolgung dieser Trends Krankenhäusern auch dabei helfen, mögliche Ausbrüche in der Gemeinde zu erkennen und vorbeugende Maßnahmen zur Eindämmung der Ausbreitung des Virus zu ergreifen . Dieser proaktive Ansatz kann letztendlich dazu beitragen, Leben zu retten und **eine Überlastung der Gesundheitssysteme zu verhindern .** Um der Pandemie immer einen Schritt voraus zu sein , **müssen Gesundheitseinrichtungen mit öffentlichen Gesundheitsbehörden zusammenarbeiten und Datenanalysen nutzen. Durch den Einsatz von Technologie und prädiktiver Modellierun**

Basierend auf den Simulationen stellten wir fest, dass die Zahl der infizierten Fälle zwar gelegentlich anstieg, diese infizierten Fälle jedoch immer in Gesundheitseinrichtungen behandelt wurden, wie in Abbildung 10 dargestellt . **Wenn es jedoch zu einem erheblichen Anstieg der Fälle kommt (z. B. im Juni 2021 und Januar 2022), können die bestehenden Gesundheitseinrichtungen den Anstieg der Fälle nicht bewältigen, was dazu führt, dass COVID-19-Patienten nicht aufgenommen werden. Um dieses Problem anzugehen, ist eine strategische Planung erforderlich. Krankenhäuser können Notfallpläne umsetzen, um in Zeiten hoher Nachfrage ihre Kapazitäten und Ressourcen zu erweitern. D**

Machine Translated by Google

In diesen Fällen können Krankenhäuser sicherstellen, dass alle Patienten während der Pandemie die Versorgung erhalten, die sie benötigen. Darüber hinaus können Krankenhäuser mit anderen Gesundheitseinrichtungen zusammenarbeiten, um Patientenverlegungen zu koordinieren und die Bettenverfügbarkeit zu optimieren. Diese koordinierte Anstrengung kann dazu beitragen, die Belastung einzelner Krankenhäuser zu verringern und sicherzustellen, dass Patienten rechtzeitig und angemessen versorgt werden können . Dies erhöhte die Zahl der Gesundheitsausgaben, wie in den Abbildungen 11–13 dargestellt, und die Zahl der Todesfälle. Basierend auf diesen Erkenntnissen gibt es zwei Dinge, auf die sich die Regierung bei der Bewältigung von COVID-19 konzentrieren muss. Erstens muss die Regierung eine Politik verfolgen, die die Zahl der Neuinfektionen jede Woche stabilisieren kann. Natürlich ist es angesichts des aktuellen Status von COVID-19, das endemisch geworden ist, unmöglich, die Zahl der täglichen Neuinfektionen auf 0 zu senken. Der zweite Schwerpunkt sollte auf der Stärkung und Erweiterung der bestehenden Gesundheitseinrichtungen liegen, um der steigenden Zahl der Fälle gerecht zu werden. Dies unterstreicht , dass angemessene Investitionen in zusätzliche Betten in Gesundheitseinrichtungen dazu beitragen werden, die Belastung der Krankenhäuser zu verringern und die Ablehnung von COVID-19-Patienten zu verhindern, was letztendlich zu niedrige

Darüber hinaus können Investitionen in Aufklärungskampagnen zum Thema öffentliche Gesundheit dazu beitragen, vorbeugende Maßnahmen und verantwortungsbewusstes Verhalten in der Bevölkerung zu fördern. Indem wir die Bedeutung von Impfungen, Maskentragen und sozialer Distanzierung betonen, können wir gemeinsam darauf hinarbeiten, die Ausbreitung des Virus wirksam einzudämmen. Es ist jedoch möglich, die Zahl der Neuinfektionen auf einem stabil niedrigen Niveau zu halten. Wenn dies gelingt, wird es keine Fälle geben, in denen Patienten vom Krankenhaus die Aufnahme verweigert wird. Der zweite Schwerpunkt liegt auf der Schaffung zusätzlicher Gesundheitseinrichtungen; je größer die Kapazität der Regierung ist, pro Zeitraum zusätzliche Betten bereitzustellen, desto unwahrscheinlicher ist es, dass Gesundheitsdienstleister keine Patienten aufnehmen können. In dieser Studie haben wir den Parameter n = 0,05 verwendet, was bedeutet, dass die Zahl der Patienten, denen eine Aufnahme verweigert wird, sinkt, wenn die Kapazität der Regierung, zusätzliche Betten bereitzustellen, größer ist, wenn ein Spitzenwert auftritt, oder vielleicht sogar 0 sein kann. Wenn die Kapazität der Regierung jedoch geringer ist, wird die Zahl der Fälle, in denen eine Aufnahme verweigert wird, noch höher sein. Patienten, denen eine medizinische Versorgung verweigert wird, sind oft s Diese Personen benötigen dringende Aufmerksamkeit, um ihren Zustand effektiv zu behandeln. Wenn eine große Zahl dieser Patienten abgewiesen wird, kann dies zu einer kritischen Situation führen, in der sich ihr Gesundheitszustand rasch verschlechtert. Ohne rechtzeitige medizinische Intervention verringern sich ihre Heilungschancen erheblich. Dieser Anstieg unbehandelter schwerer Fälle kann die Sterblichkeitsrate erheblich erhöhe Daher muss das Gesundheitssystem sicherstellen, dass Patienten mit schweren Symptomen die notwendige Versorgung erhalten. Geschieht dies nicht, wirkt sich dies nicht nur auf die Gesundheit des Einzelnen aus, sondern trägt auch zu einer höheren Gesamtsterblichkeitsrate in der Bevölkerung bei.

Dies unterstreicht die Bedeutung strategischer Planung und Investitionen in die Gesundheitsinfrastruktur, um in Zeiten erhöhter Nachfrage ausreichende Kapazitäten sicherzustellen. Es verdeutlicht auch die möglichen Folgen unzureichender staatlicher Eingriffe in die Steuerung des Gesundheitssystems.

6. Schlussfolgerungen

In dieser Studie wurde ein diskretes Modell für Anfälligkeit, Infektion und Anfälligkeit (SIS) entwickelt, um die Zahl der Patienten zu prognostizieren, die ins Krankenhaus eingeliefert werden müssen. Das Modell berücksichtigt die Möglichkeit, dass sich die Schwere der Symptome des Patienten ändert, entweder von leicht zu schwer oder umgekehrt . Die Ergebnisse zeigten, dass ein frühzeitiges Eingreifen und wirksame Eindämmungsmaßnahmen die Belastung der Gesundheitssysteme erheblich verringern könnten. Dieser dynamische Ansatz zur Modellierung von Patientenergebnissen kann bei Krankheitsausbrüchen zur Ressourcenzuweisung und zu Strategien für die öffentliche Gesundheit beitragen . Durch die genaue Vorhersage des Krankenhausbedarfs können sich Gesundheitseinrichtungen besser auf Patientenanstiege vorbereiten und Ressourcen effektiv zuweisen. Dieser proaktive Ansatz kann letztendlich Leben retten, indem sichergestellt wird, dass Patienten rechtzeitig die angemessene Versorgung erhalten. Darüber hinaus unterstreicht er die Bedeutung der Umsetzung vorbeugender Maßnahmen zur Eindämmung der Ausbreitung von Infektionskrankheiten. Dieser proaktive Ansatz kann letztendlich Leben retten und eine Überlastung des Gesundheitssystems verhindern. Die Ergebnisse der prognostizierten Patientenzahl werden dann verwendet, um die Kosten für Behandlung und zusätzliche Betten gemäß den von der indonesischen Regierung festgelegten Besti

Machine Translated by Google

für eine effiziente Planung und Budgetierung, um sicherzustellen, dass die Krankenhäuser über die notwendigen Ressourcen verfügen, um den prognostizierten Patientenzustrom zu bewältigen.

Durch die Nutzung dieses Modells können Gesundheitseinrichtungen ihre Reaktion auf potenzielle Patientenzuwächse optimieren und den Bedürftigen eine bessere Versorgung bieten. Das erstellte Modell wird anhand von COVID-19-Daten aus der Provinz West-Java simuliert. Dieser datengesteuerte Ansatz hilft Krankenhäusern, einen Anstieg der Patientenzahlen vorherzusehen und sich darauf vorzubereiten, was letztlich die allgemeine Qualität der bereitgestellten Versorgung verbessert. Darüber hinaus können Gesundheitseinrichtungen durch die Analyse von Trends und Mustern in den Daten fundierte Entscheidungen treffen, um ihre Kapazitäten und Reaktionsstrategien zu verbessern. Diese Studie ergab, dass das Szenario der sozialen Distanzierung das beste Ergebnis bei der COVID-19-Intervention lieferte. Soziale Distanzierung reduziert die Zahl der Krankenhauseinweisungen, während die Kosten dennoch angemessen bleiben. Die daraus resultierenden geschätzten Kosten für die Behandlung von COVID-19-Patienten können als Input für Richtlinien und als Warnung an die Regierung über Kosten verwendet werden, die in verschiedenen Szenarien anfallen können. Diese Informationen können Gesundheitseinrichtungen und politischen Entscheidungsträgern helfen, fundierte Entscheidungen über die Ressourcenzuweisung und Planung für zukünftige Ausbrüche zu treffen. Durch die Analyse der Daten aus dieser Studie können die Behörden wirksame Maßnahmen ergreifen, um die Ausbreitung des Virus zu kontrollieren und die wirtschaftlichen Auswirkungen auf das Gesundheitssystem zu minimieren. Darüber hinaus kann das Verständnis der Kostenauswirkungen von Krankenhausaufenthalten bei der Entwicklung von Strategien zur Sicherstellung einer angemessenen Finanzierung und Unterstützung der Gesundheitssysteme in K

Diese Forschung unterstreicht, wie wichtig es ist, die Infektionsraten effektiv zu kontrollieren und sich im Falle einer Pandemie angemessen auf die Patientenversorgung vorzubereiten. Die COVID-19-Pandemie hat sowohl die Bevölkerung als auch die Wirtschaft tiefgreifend getroffen und die Notwendigkeit robuster Notfallpläne verdeutlicht, um eine bessere Vorbereitung auf künftige Pandemien zu gewährleisten. Die anfänglichen Reaktionen der Regierungen spielten eine entscheidende Rolle bei der Eindämmung der Ausbreitung des Virus. Um zu verhindern, dass das Gesundheitssystem durch Neuinfektionen überlastet wird, wurden rasche Interventionen wie Ausgangssperren, Reisebeschränkungen und Vorschriften zur sozialen Dista Gleichzeitig unternahm die Regierung erhebliche Anstrengungen, um die Bettenkapazität in Gesundheitseinrichtungen zu erhöhen, darunter den schnellen Bau provisorischer Krankenhäuser, die Umwandlung bestehender Einrichtungen in COVID-19-Behandlungszentren und die Beschaffung zusätzlicher medizinischer Geräte und Vorräte. Diese Maßnahmen sollten potenziellen Worst-Case-Szenarien mit plötzlichen und erheblichen Anstiegen der Infektionsraten begegnen. Proaktive Strategien sind unerlässlich, um die Sterblichkeitsraten zu minimieren und Menschenleben zu retten. Durch den Ausbau der Gesundheitskapazitäten können Regierungen sicherstellen, dass allen Patienten eine angemessene medizinische Versorgung zur Verfügung steht. Auf diese Weise werden die vorhandenen Ressourcen entlastet und die Funktionsfähigkeit des Gesundheitssystems für wichtige Dienste über die COVID-19-Behandlung hinaus aufrechterhalten. Diese Studie zeigt, dass ein umfassender Ansatz, der sowohl die Infektionskontrolle als auch den Ausbau der Gesundheitskapazitäten umfasst, von größter Bedeutung ist, um die schädlichen Auswirkungen von Pandemien einzudämmen. Das wirksame Management der Infektionsraten durch gezielte Interventionen in Kombination mit strategischen Verbesserungen der Gesundheitsinfrastruktur kann die Auswirkungen auf die öffentliche Gesundheit und die Wirtschaft erheblich verringern . Diese Forschung plädiert für die kontinuierliche Weiterentwicklung und Verfeinerung von Plänen zur Vorbereitung auf eine Pandemie, um vor zukünftigen Ausbrü

In dieser Studie verwendeten wir den Parameter n = 0,05, was bedeutet, dass die Zahl der abgelehnten Aufnahmen sinkt, wenn die Kapazität der Regierung, Betten hinzuzufügen, größer ist als dieser Wert. Wenn die Kapazität der Regierung, Betten hinzuzufügen, größer ist als dieser Wert, sinkt die Zahl der abgelehnten Patienten, wenn es zu einem Anstieg kommt, oder sie könnte möglicherweise 0 betragen. Wenn die Kapazität der Regierung jedoch geringer ist, wird die Zahl der abgelehnten Fälle noch höher sein. Dies unterstreicht die Bedeutung strategischer Planung und Investitionen in die Gesundheitsinfrastruktur, um in Zeiten erhöhter Nachfrage ausreichende Kapazitäten sicherzustellen. Es unterstreicht auch die möglichen Folgen unzureichender staatlicher Eingriffe in das Management des Gesundheitssystems. Die Beschränkung dieser Studie besteht darin, dass sie nur die Dynamik zwischen den Finanzierungskomponenten der Pandemieintervention untersucht, ohne deren Auswirkungen auf die Makroökonomie als Ganzes zu berücksichtigen. Der Zusammenhang zwischen Pandemie

Machine Translated by Google

Auch die Finanzierung und die Makroökonomie sind wichtig, wenn man bedenkt, dass die Nachhaltigkeit der Gesellschaft in einer Pandemiesituation von beiden abhängt.

Eine genaue Schätzung dieses Parameters wird in zukünftigen Forschungsarbeiten präzisere Ergebnisse hinsichtlich der Kosten liefern, die mit der Bewältigung der COVID-19-Pandemie verbunden sind. Mit einem gut geschätzten Wert des Parameters n können Krankenhäuser die Zahl der Patienten reduzieren, die sie abweisen müssen, und die Kosten für den Ausbau der Krankenhauskapazität senken. Denn ein genau geschätzter n **ermöglicht die Bestimmung der optimalen Anzahl zusätzlicher Betten, die die Regierung benötigt. Dadurch wird die Diskrepanz zwischen der aktuellen Anzahl verfügbarer Betten und der Anzahl der Neuinfektionen minimiert, was eine effizientere Ressourcenverteilung und eine bessere Vorbereitung auf zukünftige Wellen der Pandemie gewährleistet.**

Beiträge der Autoren: Konzeptualisierung, DSP und S.; Methodik, NA; Software, DSP; Validierung, DSP, S. und NMY; formale Analyse, S.; Untersuchung, NA und NMY; Ressourcen, NA; Datenkuratierung, DSP; Schreiben – Vorbereitung des Originalentwurfs, DSP; Schreiben – Überprüfung und Bearbeitung, S. und NMY; Visualisierung, DSP; Überwachung, NA; Projektverwaltung, S.; Mittelbeschaffung, S. Alle Autoren haben die veröffentlichte Version des Manuskripts gelesen und stimmen ihr zu.

Finanzierung: Diese Forschung wurde durch das Padjadjaran Postgraduate Excellence Scholarship (BUPP) mit der Fördernummer 2203/UN6.3.1/PT.00/2022 finanziert.

Erklärung zur Datenverfügbarkeit: Die in der Studie vorgestellten Originaldaten sind öffentlich auf Github unter https://github.com/DhikaSuryaP/SIS-DATASET verfügbar.

Danksagungen: Die Autoren möchten dem Dekan der Fakultät für Mathematik und Naturwissenschaften der Universitas Padjadjaran und dem Direktorat für Forschung und kommunale Dienste (DRPM) danken, die ein Stipendium gewährt haben: Pendidikan Magister Menuju Doktor Bagi Sarjana Unggul (PMDSU/BUPP).

Interessenkonflikte: Die Autoren erklären, dass keine Interessenkonflikte bestehen.

Verweise

1. **Walløe, L. 3 Mittelalterliche und moderne Beulenpest: Einige klinische Kontinuitäten.** Med. Hist. **2008,** 52, **59–73.** [CrossRef]
2. **Tumpey, TM; Basler, CF; Aguilar, PV; Zeng, H.; Solórzano, A.; Swayne, DE; Cox, NJ; Katz, JM; Taubenberger, JK; Palese, P.; et al. Charakterisierung des rekonstruierten spanischen Influenza-Pandemievirus von 1918.** Science **2005,** 310, **77–80.** [Cross [PubMed]
3. **Sabin, CA; Lundgren, JD Die natürliche Geschichte der HIV-Infektion.** Curr. Opin. HIV AIDS **2013, 8, 311.** [CrossRef]
4. **Lam, WK; Zhong, NS; Tan, WC Überblick über SARS in Asien und der Welt.** Respirology **2003, 8, S2–S5.** [CrossRef] [PubMed] 5.
   Ciotti, M.; Ciccozzi, M.; Terrinoni, A.; Jiang, WC; Wang, CB; Bernardini, S. Die COVID-19-Pandemie. Krit. Rev. Clin. Labor. Wissenschaft. **2020,** 57, **365–388.** [CrossRef] [PubMed]
6. **Hale, T.; Angrist, N.; Goldszmidt, R.; Kira, B.; Petherick, A.; Phillips, T.; Webster, S.; Cameron-Blake, E.; Hallas, L.; Majumdar, S.; et al.**
   Eine globale Paneldatenbank zu Pandemie-Maßnahmen (Oxford COVID-19 Government Response Tracker). Nat. Hum. Behav. **2021, 5, 529–538.** [Querverweis] [PubMed]
7. **Izumi, T.; Sukhwani, V.; Surjan, A.; Shaw, R. Umgang mit und Reaktion auf Pandemien in höheren Bildungseinrichtungen: Erste**
   Lernen aus COVID-19. Int. J. Disaster Resil. Built Environ. **2021,** 12, **51–66.** [CrossRef]
8. **Bai, HM; Zaid, A.; Catrin, S.; Ahmed, K.; Ahmed, A. Die sozioökonomischen Auswirkungen der Coronavirus-Pandemie (COVID-19): Eine Übersicht.** Int. J. Surg. **2020, 8, 8–17.**
9. **Rahim, F.; Allen, R.; Barroy, H.; Gores, L.; Kutzin, J.** COVID-19-Gelder als Reaktion auf die Pandemie; **Internationaler Währungsfonds: Washington, DC, USA, 2020.**
10. **Sen-Crowe, B.; McKenney, M.; Elkbuli, A. Finanzierung der öffentlichen Gesundheitsvorsorge und Notfallvorsorge in den Vereinigten Staaten:**
    Sind wir bereit für die nächste Pandemie? Ann. Med. Surg. **2020,** 59, **242.** [CrossRef]
11. **Rudolph, CW; Allan, B.; Clark, M.; Hertel, G.; Hirschi, A.; Kunze, F.; Shockley, K.; Shoss, M.; Sonnentag, S.; Zacher, H.**
    Pandemien: Implikationen für Forschung und Praxis in der Arbeits- und Organisationspsychologie. Ind. Organ. Psychol. **2021,** 14, **1–3**
12. **Bakker, A.; Cai, J.; Zenger, L. Zukünftige Themen der mathematikdidaktischen Forschung: Eine internationale Umfrage vor und während der**
    Pandemie. Educ. Stud. Math. **2021,** 107, **1–24.** [CrossRef] [PubMed]
13. **Adiga, A.; Dubhashi, D.; Lewis, B.; Marathe, M.; Venkatramanan, S.; Vullikanti, A. Mathematische Modelle für die Covid-19-Pandemie: Eine vergleichende**
    Analyse. J. Indian Inst. Sci. **2020,** 100, **793–807.** [CrossRef] [PubMed]
14. **Jewell, NP; Lewnard, JA; Jewell, BL Prädiktive mathematische Modelle der COVID-19-Pandemie: Grundlegende Prinzipien und**
    Wert von Projektionen. JAMA **2020,** 323, **1893–1894.** [CrossRef] [PubMed]
15. **Dudine, P.; Hellwig, KP; Jahan, S.** Ein Rahmen zur Schätzung der Gesundheitsausgaben als Reaktion auf COVID-19; **Internationaler Währungsfonds : Washington, DC, USA, 2020.**

Machine Translated by Google

16. **Torres-Rueda, S.; Sweeney, S.; Bozzani, F.; Naylor, NR; Baker, T.; Pearson, C.; Eggo, R.; Procter, SR; Davies, N.; Quaife, M.; et al.** **Starke Entscheidungen: Untersuchung der Kosten der politischen Reaktionen auf COVID-19 im Gesundheitssektor in Ländern mit niedrigem und mittlerem Einkommer** BMJ Glob. Health **2021, 6, e005759. [CrossRef] [PubMed]**
17. **Cook, MJ; Dri, GG; Logan, P.; Tan, JB; Flahault, A. COVID-19 Down Under: Australiens erste Erfahrungen mit der Pandemie.** Int. J. Environ. Res. Public Health **2020,** 17, **8939. [CrossRef]**
18. **McQuade, ST; Weightman, R.; Merrill, NJ; Yadav, A.; Trélat, E.; Allred, SR; Piccoli, B. Kontrolle des COVID-19-Ausbruchs durch eine erweitertes SEIR-Modell.** Math. Models Methods Appl. Sci. **2021,** 31, **2399–2424. [CrossRef]**
19. **Samuel, J.; Sinha, S. Optimale Kontrolle bei Pandemien.** Phys. Rev. E **2021,** 103, **L010301. [CrossRef] [PubMed]**
20. **De Lara-Tuprio, EP; Estuar, MR; Sescon, JT; Lubangco, CK; Castillo, RC; Teng, TR; Tamayo, LP; Macalalag, JM; Vedeja, GM Wirtschaftliche Verluste durch COVID-19-Fälle auf den Philippinen: Ein dynamisches Modell für Kompromisse zwischen Gesundheits- und Wirtschaftspolitik.** Humanit. Soc. Sci. Commun. **2022, 9, 111. [CrossRef]**
21. **Huppert, A.; Katriel, G. Mathematische Modellierung und Vorhersage in der Epidemiologie von Infektionskrankheiten.** Clin. Microbiol. Infect. **2013,** 19, **999–1005. [CrossRef]**
22. **Alamo, T.; Reina, DG; Millán, P. Datengesteuerte Methoden zur Überwachung, Modellierung, Prognose und Kontrolle der Covid-19-Pandemie: Nutzung Datenwissenschaft, Epidemiologie und Kontrolltheorie.** arXiv **2020, arXiv:2006.01731.**
23. **Myall, A.; Price, J.; Peach, R.; Abbas, M.; Mookerjee, S.; Ahmad, I.; Ming, D.; Zhu, NJ; Ramzan, F.; Weisse, A.; et al. Vorhersage von COVID-19 im Krankenhaus anhand von Netzwerken von Patientenkontakten: Eine Beobachtungsstudie.** Int. J. Infect. Dis. **2022,** 116, **S109–S [Querverweis]**
24. **Jordan, E.; Shin, DE; Leekha, S.; Azarm, S. Optimierung im Kontext der Vorhersage und Kontrolle von COVID-19: Eine Literaturübersicht.** IEEE Access **2021, 9, 130072–130093. [CrossRef] [PubMed]**
25. **Wearing, HJ; Rohani, P.; Keeling, MJ Geeignete Modelle für die Behandlung von Infektionskrankheiten.** PLoS Med. **2005, 2, e174. [Querverweis] [PubMed]**
26. **Brauer, F.; Fenga, Z.; Castillo-Chaveza, C. Diskrete Epidemiemodelle.** Math. Biosci. Eng. **2010, 7, 1–15. [PubMed]**
27. **Allen, LJ; Burgin, AM Vergleich von deterministischem und stochastischem SIS und SIR.** Math. Biosci. **2000,** 163, **1–33. [CrossRef] [PubMed]**
28. **Allen, LJS Einige diskrete SI-, SIR- und SIS-Epidemiemodelle.** Math. Biosci. **1994,** 124, **83–105. [CrossRef] [PubMed]**
29. **Zhou, Y.; Ma, Z. Ein diskretes Epidemiemodell für die Übertragung und Bekämpfung von SARS in China.** Math. Comput. Model. **2004,** 40, **1491–1506. [Querverweis] [PubMed]**
30. **Škulj, D. Diskrete Markov-Ketten mit Intervallwahrscheinlichkeiten.** Int. J. Approx. Reason. **2009,** 50, **1314–1329. [CrossRef]**
31. **Goodwin, P.; Lawton, R. Über die Asymmetrie des symmetrischen MAPE.** Int. J. Forecast. **1999,** 15, **405–408. [CrossRef]**
32. **Jawa Barat, PP Dashboard Statistik Kasus COVID-19 Provinsi Jawa Barat. Pemerintah Daerah Provinsi Jawa Barat; 2024. Online verfügbar: https://dashboard.jabarprov.go.id/id/dashboard-pikobar/trace/statistik (abgerufen am 21. Juni 2024).**
33. **Jawa Barat, PP Keterisian Tempat Tidur (BOR). Pemerintah Daerah Provinsi Jawa Barat; 2024. Online verfügbar: https://dashboard.jabarprov.go.id/id/dashboard-pikobar/treatment/fasyankes (abgerufen am 21. Juni 2024).**

Haftungsausschluss/Anmerkung des Herausgebers: Die in allen Veröffentlichungen enthaltenen Aussagen, Meinungen und Daten sind ausschließlich die der einzelnen Autoren und Mitwirkenden und nicht die von MDPI und/oder den Herausgebern. MDPI und/oder die Herausgeber lehnen jegliche Verantwortung für Personen- oder Sachschäden ab, die aus den im Inhalt erwähnten Ideen, Methoden, Anweisungen oder Produkten resultiere

Machine Translated by Google

Berechnung

MDPI

Artikel

Entwurf und Bewertung eines Hyperschall-Waverider-Fahrzeugs

Verwenden von DSMC

Angelos Klothakis und Ioannis K. Nikolos *

Labor für Turbomaschinen und Strömungsdynamik, Fakultät für Produktionstechnik und -management, Technische Universität Kreta, 73100 Chania, Griechenland; aklothakis@gmail.com
*** Korrespondenz: inikolos@tuc.gr**

Zusammenfassung: Diese Arbeit untersucht die aerodynamische Leistung eines Hyperschall-Waveriders, der für einen Betrieb mit Mach 7 ausgelegt ist, wobei der Schwerpunkt auf der Optimierung seines Designs durch fortschrittliche Rechenmethod Mithilfe der DSMC-Methode (Direct Simulation Monte Carlo) wurde das dreidimensionale Strömungsfeld um den speziell entwickelten Waverider simuliert, um die Wechselwirkungen der Stoßwellen und die thermische Dynamik in einer Höhe von 90 km zu verstehen. Der rechnerische Ansatz umfasste eine detaillierte Vernetzung der kritischen Vorderkanten des Fahrzeugs und die Verwendung dreidimensionaler Isoflächen des Q-Kriteriums, um die Stoß- und Wirbelstrukturen genau abzubilden. Zusätzliche Simulationsergebnisse zeigen, dass der Waverider ein Auftriebs-Widerstand-Verhältnis von 2,18 erreichte, was eine effiziente aerodynamische Leistung bei einem Anstellwinkel von null Grad bestätigt . Die Ergebnisse der Studie tragen zu einem umfassenderen Verständnis der Flugdynamik von Hyperschallflugzeugen bei und unterstreichen die Bedeutung präziser rechnerischer Modellierung bei der Entwic

Schlüsselwörter: Hyperschallfahrzeuge; direkte Monte-Carlo-Simulation; aerodynamische Leistung; numerische Strömungsmechanik; Hyperschall-Waverider

1. Einleitung

Der Waverider ist eine besondere Konfiguration eines Hyperschallfahrzeugs, die so konstruiert ist, dass sie die vom Fahrzeug erzeugte Stoßwelle an seiner Vorderkante aufrechterhält, was zahlreiche Vorteile bietet **[1]: (a) Diese Stoßwelle trennt wirksam die Strömungsfelder auf der Ober- und Unterseite des Fahrzeugs und verhindert so, dass Hochdruckströmungen an der Vorderkante von der Unter- auf die Oberseite übergreifen. (b) Sie gewährleistet eine gleichmäßige Strömung auf der Unterseite , was optimal für die Ansaugung von Scramjet-Triebwerken ist. (c) Das Design des Waveriders ist durch Reverse Engineering von einem bekannten Strömungsfeld um eine konische Form abgeleitet. Auf diesen Designansatz wird i**

Das Konzept des Waveriders wurde erstmals 1963 von Nonweiler vorgestellt [2]. Zu dieser Zeit war die verfügbare Technologie noch nicht weit genug fortgeschritten, um ein luftatmendes Hyperschallfahrzeug zu produzieren. Sandlin und Pessin lieferten eine detaillierte Erklärung der Designmethodik für Waverider [1]. Eine umfassende Analyse der wesentlichen Designherausforderungen im Zusammenhang mit Hyperschallflugfahrzeugen wird in der Arbeit von Sziroczak und Smith [3] erörtert, in der zwei Fahrzeugtypen untersucht werden Obwohl sie sich von Waveridern unterscheiden, weisen sie viele Design- und Konstruktionsherausforderungen gemeinsam auf. Zhang et al. verwendeten die dreidimensionale Class–Shape Function Transformation (CST)-Methode, um die geometrischen Formen von Hypersonic Glidin

Zur Bewertung der Aerodynamik dieser Fahrzeuge wurden Methoden der inviskosen Modellierung verwendet, die auf der modifizierten Newton-Theorie und der Prandtl-Meyer-Gleichung basieren . Die Verwendung des **Mehrzieloptimierungsalgorithmus NSGA-II half dabei, Designs mit hohen Auftriebs-Widerstand-Verhältnissen und beträchtlicher volumetrischer Effizienz zu erreichen. In seiner Doktorarbeit befasste sich K. Kontogiannis mit der Parametrisierung und Manipulation der Vorderkörpergeometrien von Waveridern und schlug eine neue dreidimensionale Vorderkanten-Designmethode**

check for updates

Zitat: Klothakis, A.; Nikolos, IK Entwurf und Bewertung eines Hyperschall-Waverider-Fahrzeugs mit DSMC. Computation **2024,** 12, **140. https://doi.org/10.3390/calculation12070140**

Wissenschaftlicher Herausgeber: Jeffrey S. Marshall

Empfangen: 17. Mai 2024
Überarbeitet: 24. Juni 2024
Akzeptiert: 3. Juli 2024
Veröffentlicht: 9. Juli 2024

Copyright: © 2024 bei den Autoren. Lizenznehmer MDPI, Basel, Schweiz.
Dieser Artikel ist ein Open Access-Artikel vertrieben unter den Bedingungen und Bedingungen der Creative Commons Namensnennungslizenz (CC BY) (https:// creativecommons.org/licenses/by/ 4.0/).

Machine Translated by Google

Entwurfsmethoden [5]. Zusätzlich beschrieben Son et al. ein Optimierungsframework für den inversen Entwurf von Hyperschall-Waveridern [6].

Seit seiner Einführung ist der Waverider ein Schwerpunkt der Forschung. Nach der Konzeption des Entwurfs folgt in der nächsten Phase seine analytische Bewertung. Verschiedene Methoden wie technische Korrelationen, Flugtests, Windkanaltests und numerische Simulationen werden nicht nur zur Analyse, sondern auch zur Validierung von Konzepten und zum Sammeln von Wissen eingesetzt . Diese Methoden sind zwar im Unterschallbereich wirksam, weisen jedoch bei Hyperschallgeschwindigkeiten Einschränkungen hinsichtlich Zuverlässigkeit und Umsetzung auf. Laufende Forschung zielt darauf ab, diese Methoden zu verfeinern, um den Hyperschallbereich zu beherrsch

Während der frühen Bemühungen um Hyperschallflüge entwarf, konstruierte und testete die NASA ein Hyperschallfahrzeug [7]. Das Fahrzeug zeigte, dass es Geschwindigkeiten von bis zu Mach 8 erreichen konnte. Ein genauerer Blick auf die Daten im Windkanal offenbarte jedoch ein interessant Es wurde beobachtet, dass der aerodynamische Leistungsparameter des Fahrzeugs, das Verhältnis von Auftrieb zu Luftwiderstand (L/D), mit zunehmender Machzahl abnahm. Kuchemann dokumentierte durch umfangreiche empirische Forschung einen abnehmenden Trend des maximalen L/D mit zunehmender Machzahl [8], was eine erhebliche Herausforderung im traditionellen aerodynamischen Design und der Methodik im Hyperschallbereich hervorhob. Darüber hinaus führte Bowcutt einen multidisziplinären Ansatz zur Optimierung der Waverider-Konfigurationen ein, mit dem relativ höhere L/D-Verhältnisse bei höheren Machzahlen erreicht wurden [9], eine Feststellung, die später von anderen Forschern bestätigt wurde [10,11]. Nonweiler entwickelte die Waverider-Designtechnik ursprünglich in den 1950er Jahren, um einen Hyperschallflügel für Wiedereintrittszwecke zu entwickeln **[12]. Trotz anfänglicher Herausforderungen aufgrund der inhärenten Schärfe der Vorderkante des Waveriders, die zu erheblichen aerothermodynamischen Belastungen führte, und der begrenzten volumetrischen Effizienz der anfänglich dünnen Konfigurationen [7] , die viskose Effekte nicht berücksichtigten , ermöglichten Fortschritte bei numerischen Methoden und Rechenressourcen in den 1980er Jahren Bowcutt, Waverider zu optimieren, indem er die viskosen Effekte auf ihre Leistung** vorhersagte **[9]. Dies hat das anhaltende Interesse und die Forschung an Waverider-Designs angeregt , obwohl die praktische Anwendung bei der Herstellung betriebsbereiter Hypers**

Seit Nonweiler [2] das Waverider-Designkonzept vorstellte und dabei die Keilströmungsdynamik nutzte, um den ersten Waverider in der Luft- und Raumfahrtwissenschaft zu entwickeln, zielten zahlreiche Designstudien darauf ab, sein ursprüngliches Konzept zu verfeinern und zu optimieren. Die Mehrheit dieser Studien modelliert die Strömung als zweidimensional und reibungsfrei, entweder planar oder rotationssymmetrisch [13–22]. Eine kleinere Untergruppe hat dreidimensionale reibungsfreie Strömungen sowohl ohne als auch mit chemischen Reaktionen betrachtet, wie in den Referenzen [23–28] bzw. [29,30] zu sehen ist. Nur eine begrenzte Anzahl von Untersuchungen hat sich mit dreidimensionalen viskosen Strömunge Diese Studie konzentriert sich auf die Analyse des gesamten dreidimensionalen viskosen Strömungsfelds um den entworfenen Waverider.

2. Waverider-Designmethodik

Waverider werden mithilfe einer inversen Designmethode hergestellt, einem Prozess, der die Eigenschaften einer Hyperschallströmungsumgebung ausnutzt. Dieser Ansatz verwendet die Stromlinien des reibungsfreien Strömungsfelds nach dem Stoß als Grundlage für die Gestaltung der Kompressionsstromoberfläche, normalerweise der unteren Oberfläche der Waverider-Geometrie. Das Endergebnis ist eine stromlinienförmige Geometrie, die für Hyperschallströmungen optimiert ist. Die Geometrie der unteren Oberfläche, die durch eine Reihe benachbarter Stromlinien definiert wird, stellt sicher, dass die Vorderkante an der Stoßwelle haften bleibt. Unten finden Sie eine Übersicht über den Algorithmus zur Erzeugung der Waverider-Geometrien: • Bestimmen und Gestalten des anfänglichen Strömungsfelds in Strömungsrichtung. • Lösen des Strömungsfelds mithilfe von Methoden der numerischen Strömungsmechanik, wie etwa der Taylor-Maccoll-Gleichung [32] oder den Euler- oder Navi • Kartieren der Stromlinien. • Anwenden der Schmiegekegeltheorie entlang der Spannweitenrichtung. • Verfeinern und Finalisieren des Modelldesigns.

Um die Anfangsströmungsbedingungen festzulegen, aus denen der Waverider abgeleitet wird, wird zunächst ein Kegel mit einem vorgegebenen Winkel $\ddot{y}$ entworfen. Anschließend werden die Einlassrandbedingungen w

Machine Translated by Google

ff

Anzahl, Druck und Temperatur werden festgelegt und das resultierende Strömungsfeld berechnet. Nach der Berechnung des Strömungsfelds können die Stromlinien durch numerisches Lösen der folgenden gewöhnlichen Differentialgleichungen (ODEs) berechnet werden:

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

tt

Mit dem Runge-Kutta-Verfahren kann der obige Gleichungssatz zeitlich integriert werden um die Koordinate jeder Stromlinie zu erhalten.

Abbildung 1 **zeigt eine schematische Übersicht der Stromlinien, die von einem konischen Stoß aus verfolgt werden. Um die Geometrie eines Wellenreiters mit der Kegelmethode zu erstellen, muss man zunächst eine Basiskurve definieren. Diese Kurve wird dann auf den Stoß projiziert und parallel zur freien Strömung ausgerichtet ,** um die Vorderkante zu bilden. Anschließend werden die Stromlinien **von den Vorderkantenpositionen des Stoßes zur Basisebene zurückverfolgt ,** wodurch die **Kompressionsoberfläche (untere Oberfläche) des Wellenreiters entsteht. Über die analytische Gleichung (1) hinaus kann eine alternative, einfachere Methode verwendet werden, um die Stromlinien zu verfolgen, indem tangentialen Pfaden zur Basiskegeloberfläche gefolgt wird , wodurch die Erstellung der Kompressionsoberflächengeometrie erleichtert wird. Die Gleichung der Basiskurve, die für die Konstruktion des Wellenreiters wesentlich ist, ist in Abbildung 2 um die Symmetrieebene herum dargestellt. Die Gesamtbreite des Wellenreiters wird mit l bezeichnet, wobei** lu **den flachen Abschnitt der Kurve darstellt . Der gekrümmte Abschnitt der Kurve wird durch die in Abbildung 2 dargestellte Gleichung bestimmt. Der Wert von** b **lässt sich aus l,** lu **und h berechnen. Diese Werte werden nach der Auflösung des anfänglichen konischen Strömungsfelds definiert.**

ÿ

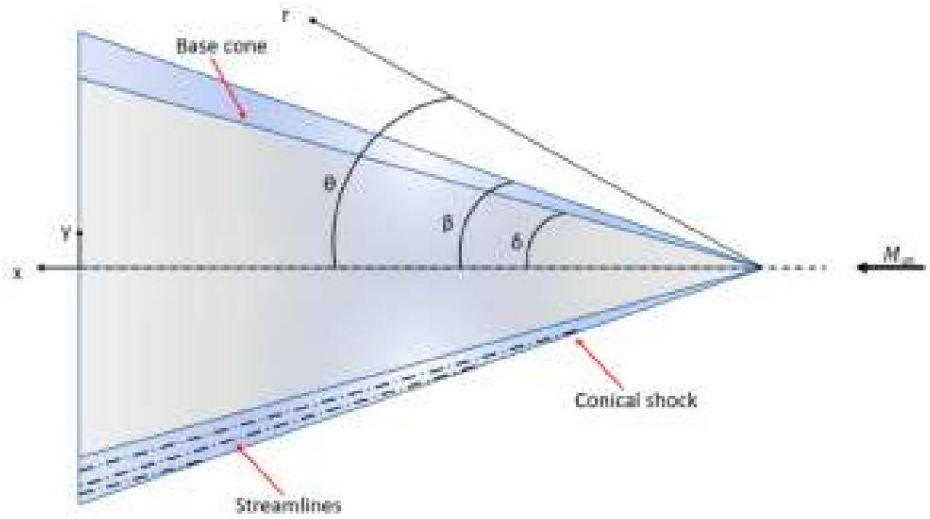


Abbildung 1. Schematische Darstellung der Waverider-Entwurfsmethodik.

Für ein praktisches Waverider-Design ist die Schärfe der Vorderkante von entscheidender Bedeutung. Daher umfasst eine pragmatische Designstrategie Abstumpfungstechniken, um diese Eigenschaft zu handhaben. Das Abstumpfen der Vorderkante und der Verbindungsstellen, an denen zwei Strömungsflächen zusammenlaufen, mildert die Erwärmungseffekte und führt zu einer für die Herstellung praktikableren Geometrie . Das Abstumpfen weicht jedoch vom idealen Waverider-Design ab, da es zu einem gewissen Druckverlust von der unteren zur oberen Oberfläche führt, was wiederum den Luftwiderstand erhöht und die aerodynamische Effizienz des Waveriders verringert. Studien [33,34] haben gezeigt , dass das Abstumpfen zwar den Wärmefluss des Fahrzeugs verringert, sich jedoch negativ auf das Auftriebs-Luftwiderstands-Verhältnis (L/D) auswirkt. Trotzdem kann ein abgestumpftes Waverider-Design im Vergleich zu anderen Designalternativen immer noch eine überlegene aerodynamische Leistung bieten. Das Ausmaß und die Art des Abstumpfens sind entscheidend und erfordern ein Gleichgewicht zwischen der Reduzierung thermischer Spannungen und der Optimierung der aerodynamischen Effizienz. Bei den verschiedenen möglichen Konfigurationen für einen Waverider gibt es zahlreiche Ansätze zum Design einer stumpfe

ffi

Machine Translated by Google

tt

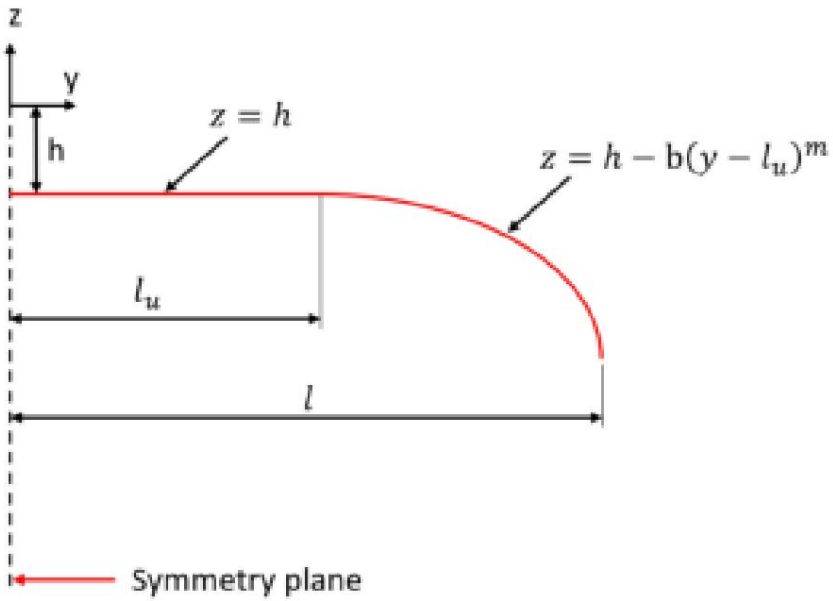


Abbildung 2. Schematische Darstellung der Waverider-Entwurfsmethodik.

Es gibt zwei Hauptmethoden, um die Vorderkante eines Waveriders abzustumpfen: Bei der einen wird Material von der Kante entfernt, bei der anderen wird Material hinzugefügt [35]. Tincher und Burnett haben vorgeschlagen, dass das Hinzufügen von Material zur Vorderkante einen geringeren aerodynamischen Nachteil mit sich bringt als das Entfernen von Material [35]. Dieser Ansatz wird bevorzugt, da er es ermöglicht, mehr vom ursprünglichen aerodynamischen Profil beizubehalten und so potenziell die negativen Auswirkungen auf die Leistung zu minimieren, die mit Modifikationen an der Vorderkante verbunden sind.

3. Direkte Monte-Carlo-Simulationsmethode (DSMC) tz ffi

Die Direct Simulation Monte Carlo (DSMC)-Methode, die ursprünglich Ende der 1960er Jahre von Graeme Bird entwickelt wurde **[36], verwendet einen partikelbasierten statistischen Ansatz zur Untersuchung von verdünnten Gasströmungen. Im Gegensatz zu herkömmlichen Methoden, die Gleichungen lösen, um das Strömungsverhalten vorherzusagen, simuliert DSMC die Bewegung und Wechselwirkungen einer großen Anzahl simulierter Partikel, von denen jedes einen Bruchteil der tatsächlichen Moleküle im Strömungsfeld darstellt. Diese Methode entkoppelt die Bewegung der Partikel und berechnet intermolekulare Kollisionen über kurze Zeitintervalle. Es wurde mathematisch nachgewiesen, dass DSMC bei einer ausreichenden Anzahl von Partikeln pro Zelle zur Boltzmann-Gleichung**

konvergiert [37]. Die DSMC-Technik umfasst vier Hauptschritte: 1. Vorrücken der Position der Partikel.
2. Sortieren der Partikel in die entsprechenden Zellen.
3. Berechnung der intermolekularen Kollisionen.
4. Erfassung und Analyse der Partikeleigenschaften.

In der Praxis wird der Rechenbereich in zahlreiche Zellen segmentiert, die möglicherweise noch weiter in Unterzellen auf der Grundlage eines vordefinierten Rasters unterteilt werden. Zunächst werden die Partikel innerhalb jeder Zelle zufällig mit bestimmten Anfangspositionen, Geschwindigkeiten und Energiezustä Diese Schritte werden für jeden Zeitschritt zyklisch wiederholt, um die zeitliche Entwicklung des Flusses zu modellieren. Makroskopische Flusseigenschaften wie Geschwindigkeit, Druck, Dichte und Temperatur werden aus den gewichteten Mittelwerten dieser mikroskopischen Partikeleigenschaften abgeleitet. Für alle in dieser Studie diskutierten Flusssimulationen wurde die DSMC-Methode verwendet, wie sie von Graeme Bird [36] beschrieben **und im Stochastic Parallel Rarefied-gas Time-accurate Analyzer (SPARTA) der Sandia National Laboratories [38]** implementiert **wurde,**

Machine Translated by Google

4. Anwendung auf ein bestimmtes Waverider-Design

Bei der Entwicklung eines Waveriders für Mach 7 bestand der erste Schritt darin, einen 2 m langen, 7-Grad-Kegel mit einer 1 cm breiten stumpfen Vorderkante zu fertigen, wie in Abbildung 3 dargestellt. Das dreidimensionale Strömungsfeld um diesen Kegel wurde dann mithilfe der DSMC-Methode (Direct Simulation Monte Carlo) aufgelöst. Die Simulationsbedingungen wurden aus dem US-Standardatmosphärenmodell abgeleitet, das die Strömungseigenschaften in einer Höhe von 90 km darstellt. Die spezifischen Strömungsbedingungen und die in der DSMC-Simulation verwendeten Parameter sind in den Tabellen 1 und 2 aufgeführt. In den vorliegenden Simulationen besteht das Gas aus 79 % N2 und 21 % O2; Rotations- und Schwingungsrelaxationszahlen werden als Konstanten behandelt. Die Rotationsrelaxationszahl wurde für **N2 und** O2 auf **Zrot = 5** festgelegt , **während eine Schwingungsrelaxationszahl von Zvib = 52.600 für N2 und Zvib = 17.900 für O2 verwendet wurde. Elastische Kollisionen werden mit dem Variable Soft Sphere (VSS)-Modell [39]** durchgeführt , **während inelastische Kollisionen mit dem Borgnakke–Larsen-Modell [40] durchgeführt werden. Zur Auswahl der Kollisionspartner verwendeten wir den Near-Collision-Partner-Algorithmus. Dieser Algorithmus wählt Kollisionspartner innerhalb einer Kugel aus, deren Radius der Entfernung entspricht, die ein Partikel in einem Zeitschritt zurücklegt. Dieser Ansatz ermöglicht die Verwendung einer Gitterzellengröße, die größer als eine mittlere freie Weglänge ist, während die Kollisionsgenauigkeit beibehalten wird [41] , obwohl unsere Zellengröße nahe bei 1/3 der mittleren freien Weglänge liegt. Aufgrund der niedrigen Temperaturen, die bei diesen Flugbedingungen auftreten, sind chemische Reaktionen nicht möglich; daher wird angenommen, dass sich**

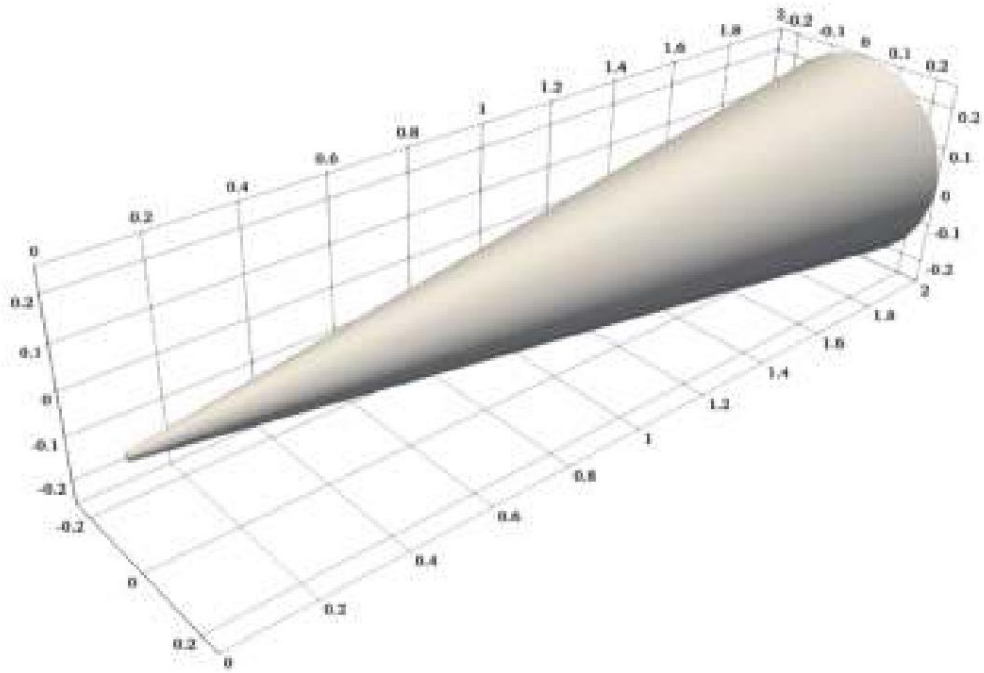


Abbildung 3. Die Geometrie des 7-Grad-Halbkegels, die zur Berechnung des anfänglichen Strömungsfelds verwendet wurde.

Wie bereits erwähnt, wurden alle Simulationen mit dem Open- Source-DSMC-Parallelcode SPARTA (Stochastic Parallel Rarefied-gas Time-accurate Analyzer) durchgeführt, der in den Sandia National Laboratories entwickelt wurde [38]. Nach der Berechnung des dreidimensionalen Strömungsfelds um den 7-Grad-Kegel wurden die Strömungslinien in bestimmten parallelen Ebenen extrahiert, um die Stoßwellengrenzen abzugrenzen. Abbildung 4 bietet eine Visualisierung dieser berechneten Strömungslinien des Strömungsfelds. Die Stoßwellengrenzen sind an der Biegung der Strömungslinien sowohl in der seitlichen als auch in der oberen Ebene sowie an einer Änderung der Farbe des Strömungsfelds in Strömungsrichtu

Machine Translated by Google

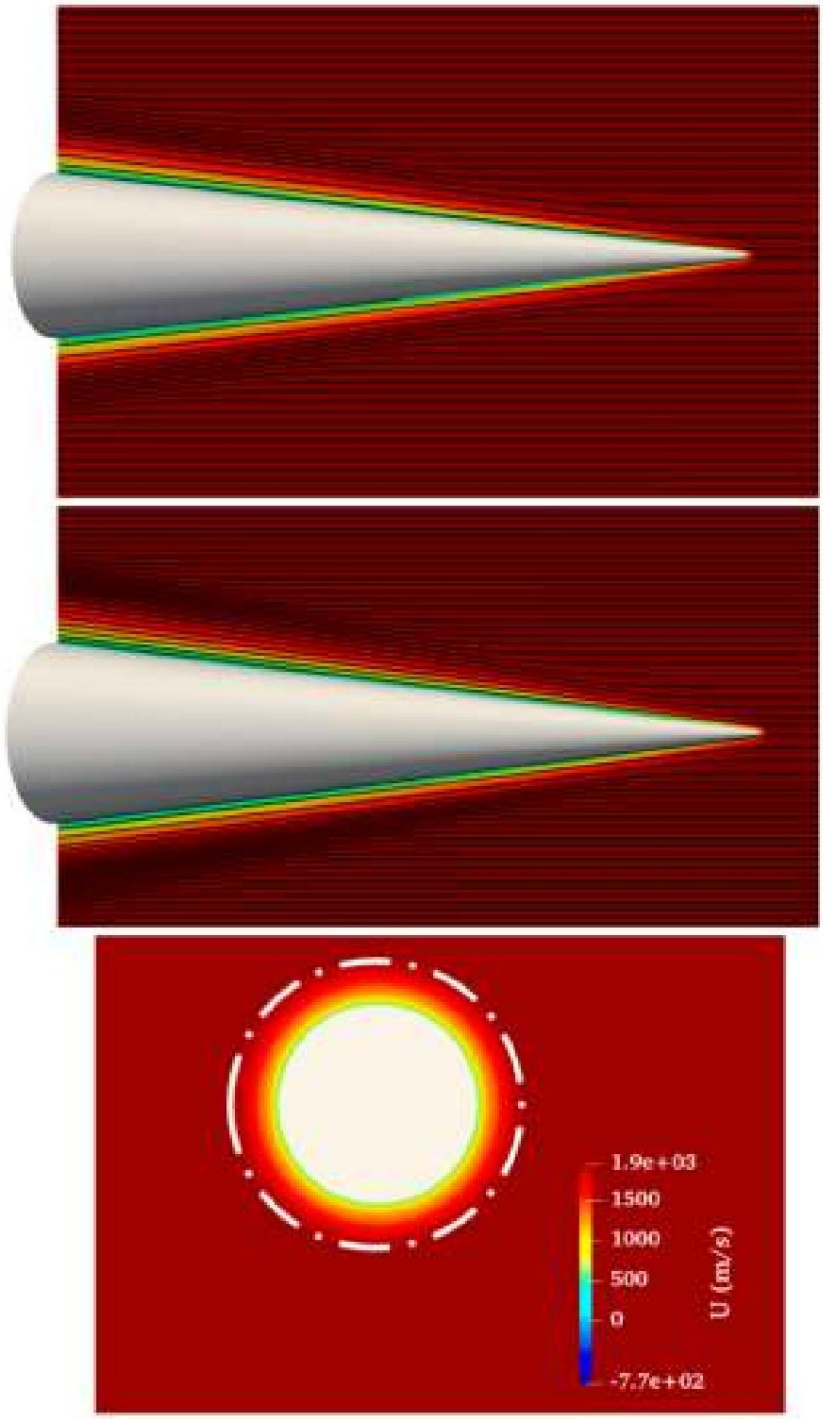


Abbildung 4. Stromlinien des dreidimensionalen Strömungsfelds um den 7-Grad-Kegel. Seitenansicht (oben), Draufsicht (Mitte), Rückansicht (unten).

tt

Nachdem die Strömungsebenen aus der DSMC-Simulation ermittelt wurden, werden diese in eine CAD-Software (Computer-Aided Design) (SolidWorks 2021) importiert, um die Geometrie des Waveriders präzise zu definieren. Der Entwurfsprozess beginnt am Heck des Fahrzeugs und erstellt Kurven, die die beobachtete kreisförmige Stoßform tangieren. Der erste charakteristische Querschnitt ist in Abbildung 5 (unten) und Abbildung 6 dargestellt. Wie in Tabelle 1 zu sehen ist, fällt die Strömung aufgrund der niedrigen Reynoldszahl in den laminare

Machine Translated by Google

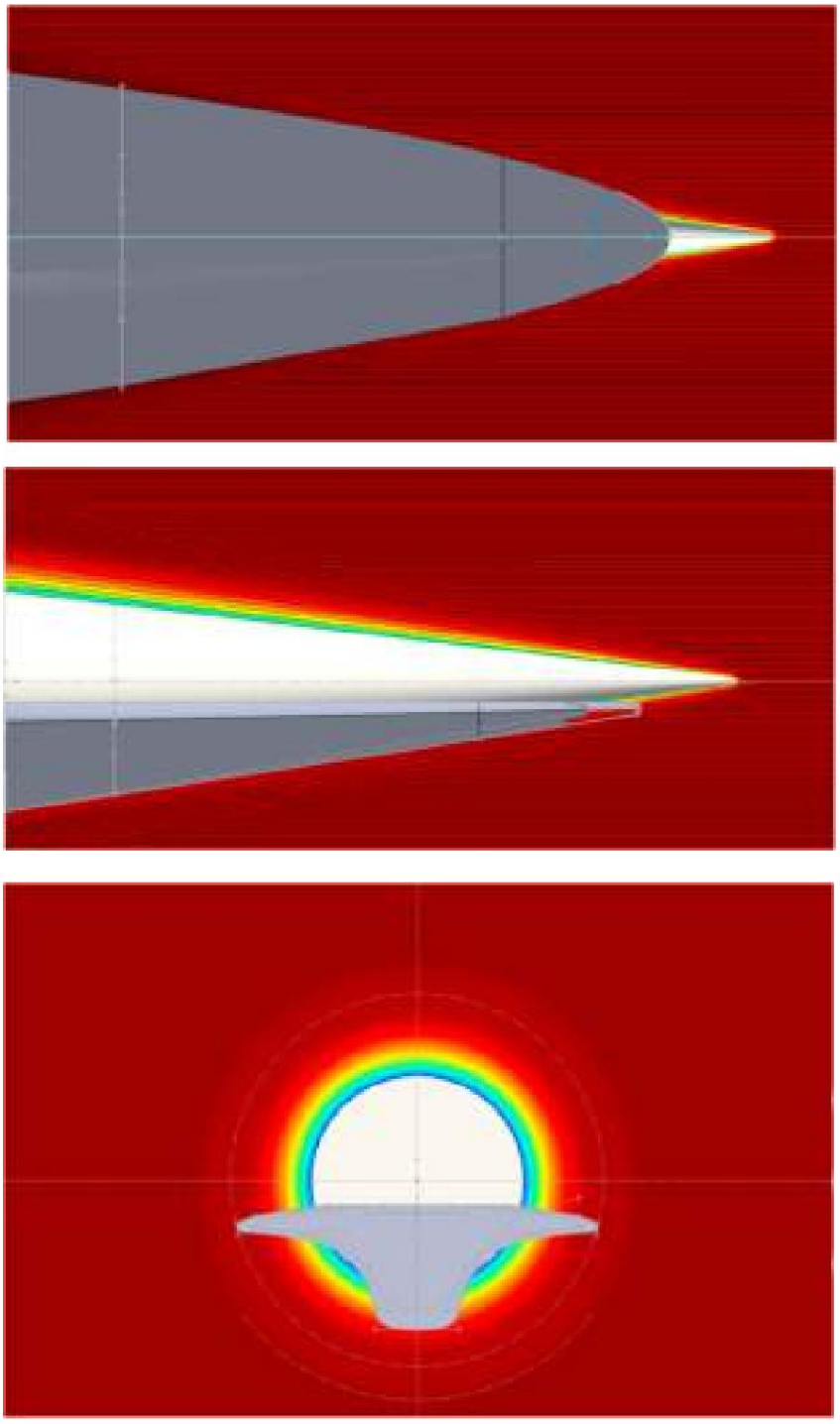


Abbildung 5. Waverider-Oberfläche entlang der Strömungslinien im Vergleich zum ursprünglichen Kegel. Draufsicht (oben), Seitenansicht (Mitte) und Rückansicht (unten).

Um sicherzustellen, dass das Design für reale Anwendungen praktikabel bleibt, sind die Vorderkanten des Waveriders stumpf und nicht scharf gestaltet. Um die Stumpfheit der Vorderkanten genau zu steuern, wird eine vierstufige Bézierkurve verwendet, um das Profil der Vorderkante zu formen. Diese Methode bietet die Flexibilität, die Krümmung fein anzupassen und so die aerodynamischen und thermischen Eigenschaften der Kante anzupassen. In ähnlicher Weise werden zusätzliche Abschnitte entlang der Längsachse des Waveriders in Abständen von jeweils 30 cm entworfen. Sowohl die Ober- als auch die Unterseite des Waveriders werden durch die Stoßwellengrenzen definiert, die aus der ursprünglich vor

Machine Translated by Google

dass das endgültige Waverider-Design innerhalb der durch den anfänglichen Durchfluss vorgegebenen Grenzen optimiert wird Bedingungen und die aerodynamischen Anforderungen des Hyperschallreisens.

Tabelle 1. Parameter für eine Strömung mit Mach 7 in 90 km Höhe.

Mach-Zahl, Maÿ	**7**
Reynolds, Reÿ	**2873**
Freiströmungsgeschwindigkeit, Uÿ (m/s)	**1965**
Knudsen-Zahl, Kn	**0,6**
Anstellwinkel, ÿ (Grad)	**0**
Dichte der freien Strömung, ÿÿ (kg/m3)	**9,62** × 10ÿ6
Freiströmungsdruck, pÿ (Pa)	**0,55**
Temperatur in der freien Strömung, Tÿ (K)	**196**
Wandtemperatur, Tw (K)	**300**
Gas	**Luft**

Tabelle 2. DSMC-Berechnungsparameter für Mach 7-Strömung in 90 km Höhe.

Anzahldichte, Ndÿ (#/m3)	**2,00** × **1020**
Zeitschritt (e)	**3,0** × 10ÿ7
Übergangszeit	**40.000**
Beispielzeitraum	**100.000**
Anzahl der Partikel	**10,5** × **109**
Anzahl der Zellen	**183.664.000**
Echtzeitzeit (CPU-Stunden)	**195.840**

tt

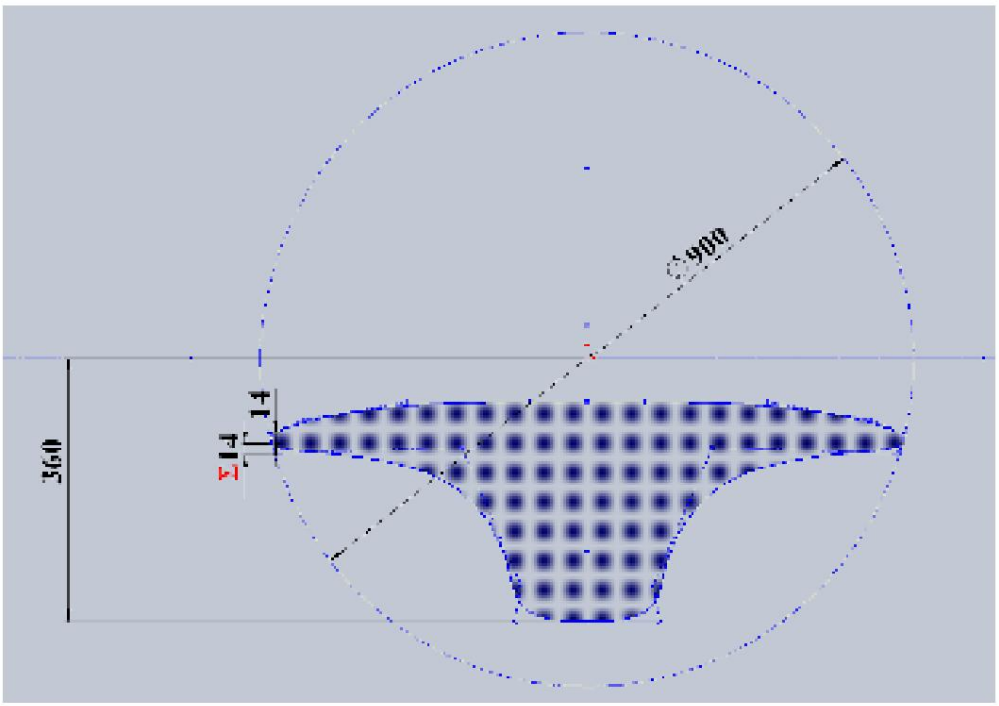


Abbildung 6. Hinterer Abschnitt des Waveriders (Einheiten in mm).

Abbildung 7 bietet eine visuelle Darstellung der verschiedenen Abschnitte des Waveriders

Geometrie, obwohl aus Gründen der Übersichtlichkeit nicht alle Abschnitte angezeigt werden. Nach Abschluss
Bei der Konstruktion aller Abschnitte wird eine Loft-Operation mit Tangentialbeschränkungen eingesetzt, um
erzeugen die Oberflächen des Waveriders. Um den Designprozess zu vereinfachen und die
Symmetrie des Strömungsfeldes wird zunächst nur die Hälfte der endgültigen Geometrie entworfen. Diese Hälfte ist
Anschließend wird es an der Symmetrieebene gespiegelt, um die komplette Fahrzeugstruktur zu erzeugen.

Machine Translated by Google

Die Methode der oskulierenden Kegel dient, wie zuvor beschrieben, als robuster Rechenrahmen für die Entwicklung von Hyperschall-Waveridern. Hyperschall-Aerodynamik erfordert den Umgang mit extremen Temperaturen, hohem Druck und komplizierten Stoßwellen-Wechselwirkungen, was den Designprozess von Natur aus komplex macht. Durch die Aufteilung der Methode in einzelne Schritte ermöglicht dieser Ansatz eine detaillierte Konzentration auf die theoretischen und praktischen Aspekte, die die Entwicklung dieser fortschrittlichen Hyperschallfahrzeuge leiten. Dieser strukturierte Designprozess stellt sicher, dass jeder Aspekt der Leistung und strukturellen Integrität des Fahrzeugs berücksichtigt wird, was zur Entwicklung effektiver und effizienter Hyperschall-Waverider führt.

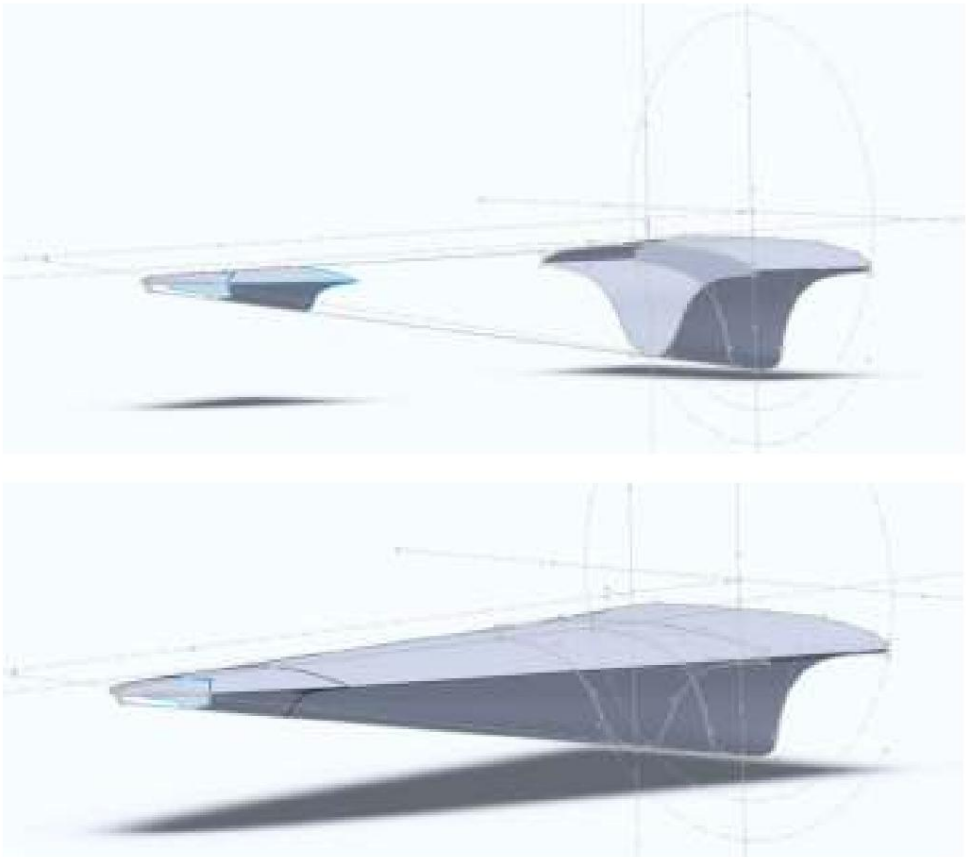


Abbildung 7. Oberflächenlofts entlang der Fahrzeugprofile (oben). Fahrzeugübersicht ohne Bugteil (unten). tt

Der Entwurfsprozess für einen Hyperschall-Waverider erfordert einen sorgfältigen und strukturierten Ansatz, der für die Erreichung aerodynamischer Effizienz und struktureller Integrität unter extremen Bedingungen entscheidend ist. Hier ist eine detaillierte Aufschlüsselung der einzelnen Schritte des Entwurfsverfahrens: Schritt 1: Beginn am hinteren Ende des Kegels

Der Designprozess beginnt am hinteren Ende eines Kegels, der für die Festlegung der Anfangsbedingungen des Strömungsfelds von entscheidender Bedeutung ist. Hier werden die Stoßwellengrenzen sorgfältig definiert, die in Abbildung 4 (unten) **als gestrichelte weiße Linien dargestellt sind . Dieser grundlegende Schritt ist entscheidend, da er das erste Profil des Waveriders festlegt. Das Design stellt sicher, dass sowohl die Vorderkante als auch die Unterseite dieses Profils tangential mit den Stoßwellengrenzen ausgerichtet sind , wodurch der Luftwiderstand minimiert und die aerodynamische**

Schritt 2: Sequentielle Querschnittsprofilierung

Anschließend werden die Querschnittsebenen in Abständen von etwa 30 bis 40 cm entlang der Länge des Kegels genommen. Jede Ebene dient als Vorlage für die Formgebung eines Segments der Fahrzeugkarosserie, zugeschnitten auf die spezifischen aerodynamischen Bedingungen dieses Segments. Die

Machine Translated by Google

ist vergleichbar mit der Gestaltung einzelner Fahrzeugscheiben, die jeweils für ihre spezielle Strömungsdynamik optimiert sind.

Schritt 3: Lofting-Vorgang

Die in Schritt 2 erstellten Einzelprofile werden dann durch einen Lofting-Vorgang miteinander verbunden. Bei dieser Technik werden die Profile zusammengefügt, um die durchgehende Außenhaut des Waveriders zu bilden, wie in Abbildung 7 zu sehen. Bei diesem Vorgang werden Interpolationsmethoden verwendet, um einen sanften Konturübergang zwischen den Abschnitten zu gewährleisten. Allerdings verengen sich die Profile zur Spitze des Kegels hin, was die Aufrechterhaltung der strukturellen und aerodynamischen Kontinuität erschwert .

Schritt 4: Die Nasenregion behandeln

Im Nasenbereich, wo die Profile extrem schlank werden, sind herkömmliche Lofting-Techniken weniger effektiv. Um dieses Problem zu lösen, werden Begrenzungsflächen eingeführt, die der Krümmung des ursprünglichen Kegels entsprechen. Wie in Abbildung 8 dargestellt, bilden diese Flächen die Außenhaut des Nasenabschnitts und fügen sich nahtlos in die Lofting-Abschnitte ein, um die aerodynamische Integrität aufrechtzuerhalten.

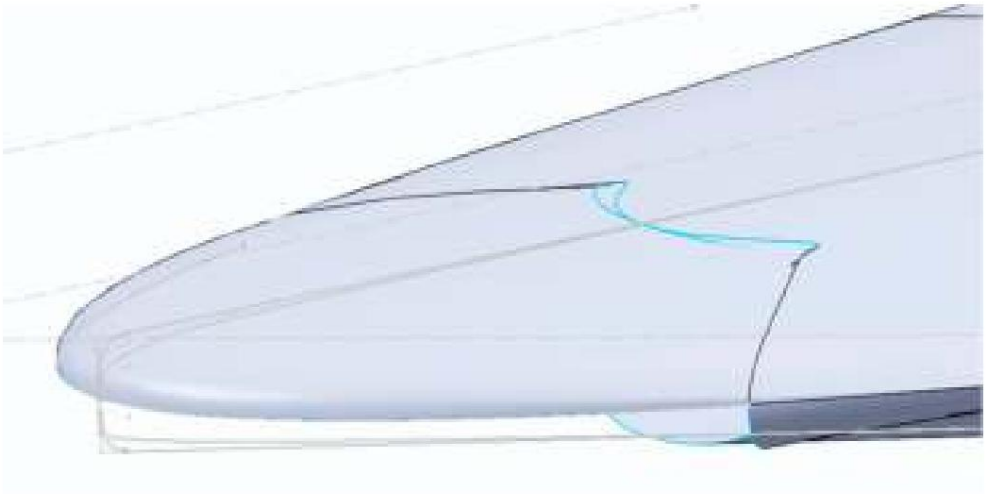


Abbildung 8. Nasenabschnitt mit oberer Begrenzungsfläche.

Schritt 5: Oberflächen für die Flüssigkeitssimulation verknüpfen

Nach dem Entwurf der Nasen- und Hauptkörperteile werden alle Oberflächensegmente in einem Strickverfahren zu einer einheitlichen, wasserdichten Struktur zusammengefügt. Diese Integration ist für die Genauigkeit nachfolgender Strömungsdynamiksimulationen von entscheidender Bedeutung und stellt sicher, dass keine Lücken oder Inkonsistenzen vorhanden sind, die die Stabilität oder Präzision des Modells
Nach Abschluss dieses Schritts entsteht eine vollständige Fahrzeuggeometrie, die in Abbildung 9 dargestellt ist.

Schritt 6: Spiegelungsvorgang

Um die Designeffizienz zu verbessern und den Rechenaufwand zu reduzieren, wird zunächst nur die Hälfte des Fahrzeugs modelliert. Die andere Hälfte wird durch eine Spiegelung entlang einer Symmetrieebene erstellt. Diese Strategie vereinfacht nicht nur den Konstruktionsprozess, sondern ermöglicht auch schnellere Iterationen und Verfeinerungen während der Designphase, wodurch der erforderliche Rechenaufwand effektiv halbiert wird.

Machine Translated by Google

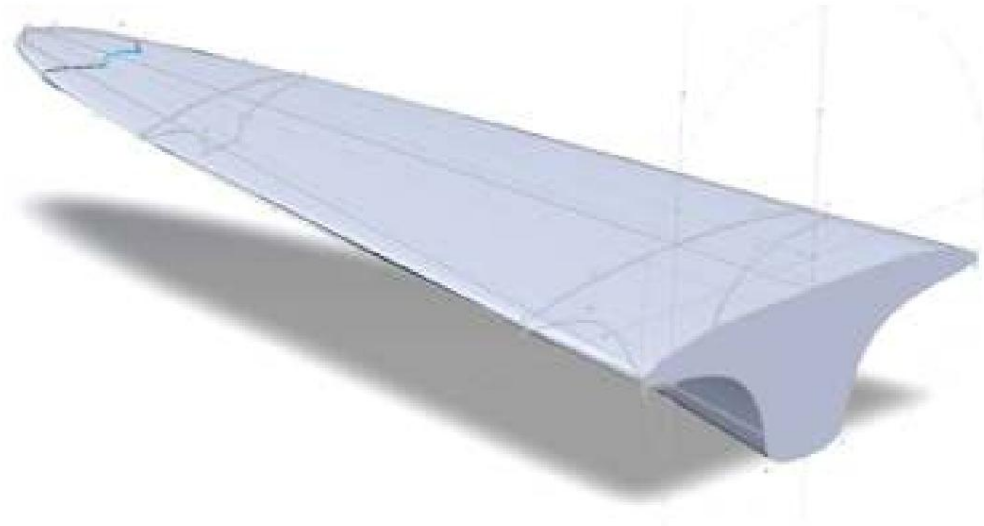




Abbildung 9. (Oben): Waverider-Abschnitte und die vollständige Geometrie. (Unten tt): Flussdiagramm des Entwurfs

Methodik.

Machine Translated by Google

Schritt 7: Verfeinertes Spitzendesign

Dieser Schritt in der Waverider-Designmethodik unterstreicht die Bedeutung der Optimierung der Vorderkanten, die eine entscheidende Rolle für die Gesamtleistung und Überlebensfähigkeit des Fahrzeugs unter Hyperschallbedingungen spielen. Im Gegensatz zu den typischen Hyperschalldesigns, die scharfe Vorderkanten aufweisen, um den Luftwiderstand zu minimieren und die Geschwindigkeit zu maximieren, berücksichtigt dieser Ansatz die Nachteile, die solche scharfen Kanten mit sich bringen, darunter hohe Spannungskonzentrationen und eine geringere thermische Belastbarkeit. Diese Faktoren können zu strukturellen Ausfällen führen, wenn sie der intensiven **Hitze und dem Druck des Hyperschallflugs ausgesetzt sind .**

Um diese Herausforderungen zu bewältigen, enthält das Design Dreipunkt-Bézierkurven, um die Vorderkanten abzustumpfen. Diese Technik ermöglicht eine präzise Kontrolle über die Krümmung und Tangentialität der Kanten, wodurch sie speziell auf die Anforderungen der Hochgeschwindigkeitsaerodynamik und des thermischen Stressmanagements zugeschnitten werden können. Die Bézierkurven tragen nicht nur dazu bei, den Übergang der Strömung über das Fahrzeug zu glätten, sondern verbessern auch die thermische Robustheit, indem sie die Spannungen und die Wärme gleichmäßiger über die Oberfläche verteilen. Die Verwendung von Bézierkurven in diesem Zusammenhang sorgt für ein Gleichgewicht zwischen aerodynamischer Effizienz und struktureller Integrität und stellt sicher, dass die Vorderkanten nicht nur den Luftwiderstand minimieren, sondern auch den harten Bedingungen des Hyperschallflugs standhalten können . Dieser differenzierte Ansatz führt zu einem Vorderkantendesign, das sowohl geometrisch optimiert als auch thermodynamisch langlebig ist und einen neuen Standard für das Design von Hyperschallfahrzeugen setzt . Durch diese Schritte wird das Waverider-Design präzise entwickelt und berücksichtigt sowohl die hohen Anforderungen des Hyperschallflugs als auch die praktischen Aspekte der Fahrzeugherstellung und -simulation.

Die Methode der oskulierenden Kegel ist ein ausgeklügeltes Gerüst, das auf den Gebieten der Aerodynamik, der numerischen Strömungsmechanik (CFD) und der angewandten Mathematik aufbaut. Dieser Ansatz bildet einen ganzheitlichen und detaillierten Weg für die Entwicklung von Hyperschall-Waveridern und bewältigt effektiv die komplexen Herausforderungen, die mit Hyperschallströmungen und Strukturdynamik verbunden sind. Die Integration dieser multidisziplinären Bereiche stellt sicher, dass das resultierende Waverider-Design nicht nur aerodynamische Effizienz erreicht, sondern auch eine verbesserte thermische und strukturelle Robustheit aufweist.

In der ersten Phase dieser rechnerischen Untersuchung ist die Erstellung eines genauen Computernetzes von entscheidender Bedeutung. Dieses Netz ist von entscheidender Bedeutung für die genaue Erfassung der komplizierten geometrischen Details des Waveriders, insbesondere in den hochempfindlichen Bereichen wie den Vorderkanten. Die Präzision bei der Modellierung dieser Kanten ist von größter Bedeutung, da selbst geringfügige Ungenauigkeiten zu erheblichen aerodynamischen Auswirkungen führen können. Diese Akribie beim Netzdesign ist unerlässlich, um die beabsichtigten geometrischen Merkmale zu reproduzieren und sicherzustellen, dass die Simulationen das wahre aerodynamische Verhalten des Waveriders widerspiegeln. Das bei der DSMC-Methode (Direct Simulation Monte Carlo) verwendete Computeroberflächennetz ist speziell auf die einzigartigen Merkmale des Waverider-Designs zugeschnitten, wie in Abbildung 10 dargestellt . **Dieses Netz ermöglicht die detaillierte und genaue Simulation der Strömungsdynamik um den Waverider herum und erfasst die wesentlichen Wechselwirkungen zwischen der Oberfläche des Fahrzeugs und der Hyperschallströmung. Die DSMC-Methode, die für ihre Fähigkeit bekannt ist, die Dynamik von verdünnten Gasen effektiv zu modellieren, eignet sich besonders gut für die Analyse der aerodynamischen Eigenschaften von Fahrzeugen, die an den oberen Rändern der Atmosphäre betrieben werden, wo herkömmliche CFD-Methoden möglicherweise an ihre Grenzen stoßen. Für die Simulation**
Diese Konsistenz blieb erhalten, da sich die Flugbedingungen nicht änderten. Wie in Abbildung 11 (unten) zu sehen, liegt die Knudsen-Zahl am oberen Ende des Gleitregimes bzw. im Übergangsregime.

Machine Translated by Google

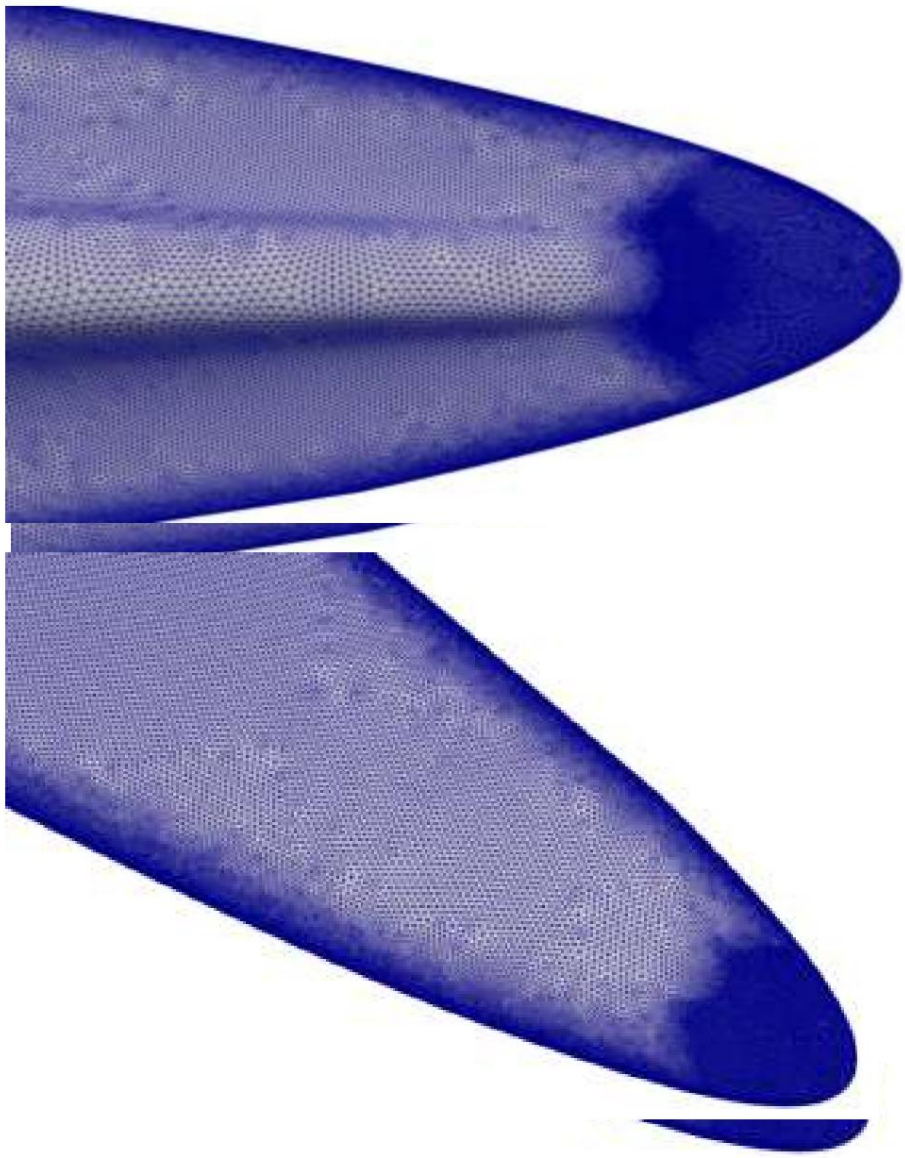


Abbildung 10. Das verwendete Oberflächennetz. Untere Oberfläche (oben) und isometrische Ansicht (unten).

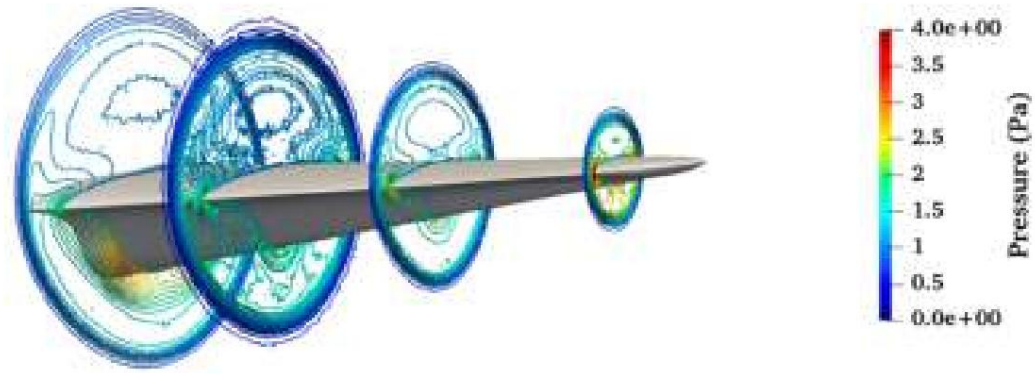


Abbildung 11. Fortsetzung

Machine Translated by Google

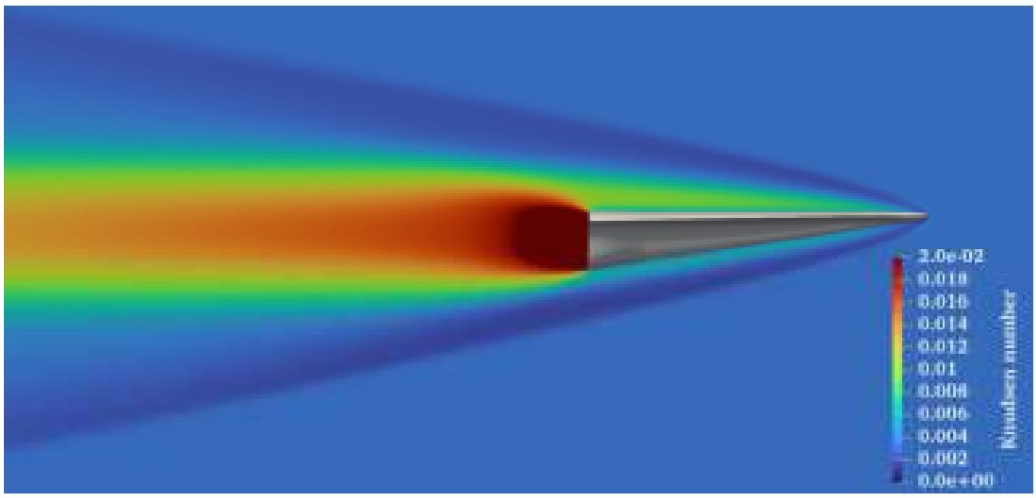


Abbildung 11. Druckkonturen um das Fahrzeug (oben), Knudsen-Zahl des Strömungsfeldes basierend auf der Wellenreiterlänge (unten).

5. Simulationsergebnisse

Aufgrund des hohen Rechenaufwands, der mit der Simulation von Hyperschallströmungen verbunden ist , werden verschiedene Strategien umgesetzt, um die Nutzung der Rechenressourcen zu optim Eine effektive Technik besteht darin, nur die Hälfte der Geometrie des Waveriders zu simulieren, wobei das resultierende Strömungsfeld dann symmetrisch über eine vordefinierte Ebene gespiegelt wird. Dieser Ansatz reduziert den Rechenaufwand erheblich, ohne die Genauigkeit der Ergebnisse zu beeinträchtigen. Ein Hauptziel dieser Simulationen besteht darin, die korrekte Positionierung der Stoßwelle relativ zu den Vorderkanten des Fahrzeugs zu bestätigen. Diese Überprüfung wird durch die Analyse der Druckkonturen und Q-Kriterium-Diagramme durchgeführt, die in Abbildung 11 bzw. Abbildung 12 dargestellt sind .

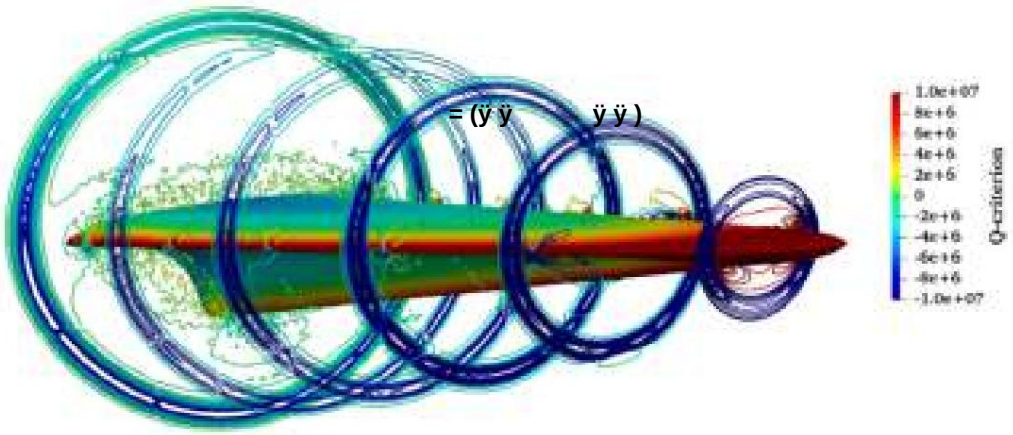


Abbildung 12. Q-Kriterium-Konturen um das Fahrzeug.

Das mit Gleichung (2) berechnete Q-Kriterium umfasst , die antisymmetrische Komponente des Geschwindigkeitsgradienten, die die Vortizität darstellt, und S, die symmetrische Komponente , die die Dehnungsrate darstellt.

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

Gemäß den etablierten Kriterien kennzeichnen positive Q-Kriterium-Werte Bereiche innerhalb des Strömungsfeldes, in denen die Wirbelstärke vorherrscht, was auf Bereiche mit Rotationsströmung hindeutet. Umgekehrt deuten negative Werte auf eine Dominanz der Dehnungsrate oder viskoser Spannungen Dieses Kriterium ist ein wichtiges Diagnoseinstrument zur Analyse der Strömungseigenschaften um

Machine Translated by Google

der Waverider. In Abbildung 13 beispielsweise signalisieren die unterhalb der Vorderkante beobachteten negativen Q-Kriterium-Werte das Vorhandensein eines Stoßes in diesem Bereich. Die zugehörigen Druckkonturdiagramme, die in Abbildung 11 dargestellt sind, zeigen einen deutlichen Druckanstieg um die Vorderkanten des Waveriders und bestätigen die effektive Anhaftung der Stoßwelle an die Geometrie des Fahrzeugs.

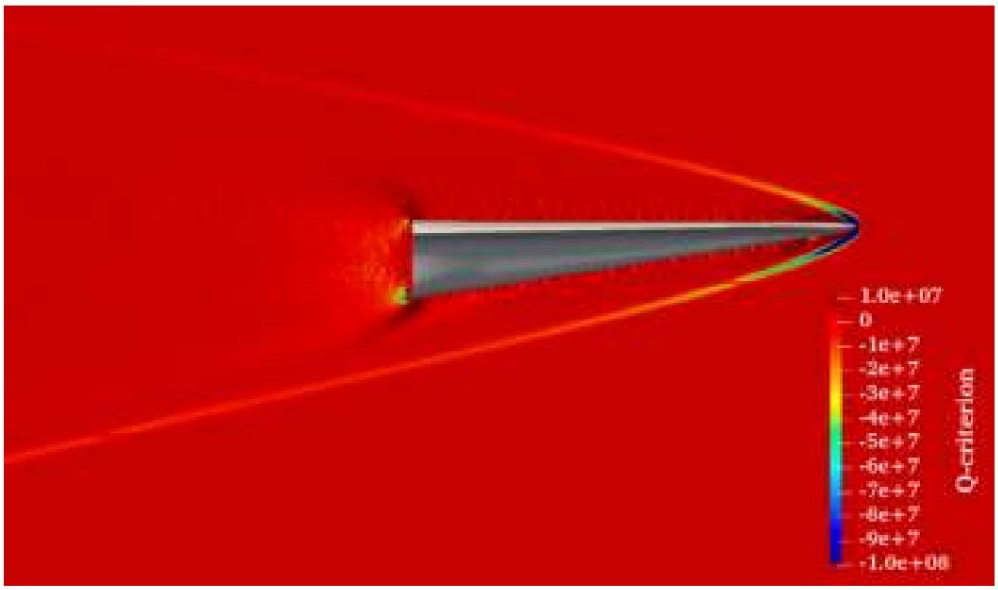


Abbildung 13. Q-Kriterium-Konturen auf der Symmetrieebene.

Abbildung 11 zeigt außerdem grafisch die Druckverteilung auf der Oberfläche des Waveriders. Wie erwartet sind erhöhte Druckniveaus um die Vorderkanten und den Bugbereich herum deutlich zu erkennen, was das Vorhandensein einer anhaftenden Stoßwelle bestätigt. Diese Integration verschiedener rechnergestützter Diagnoseverfahren – von der Netzoptimierung bis hin zu detaillierten Druck- und Q-Kriterium-Analysen – bietet eine gründliche Bewertung der aerodynamischen Leistung des Waveriders . Diese Ergebnisse unterstreichen die rechnerische Genauigkeit und physikalische Gültigkeit des Waverider-Designs, insbesondere im Hinblick auf die Anhaftung von Stoßwellen an den Vorderkanten . Abbildung 13 zeigt die Q-Kriterium-Konturen auf der Symmetrieebene, während Abbildung 14 die entsprechenden Konturen auf einer vertikalen Ebene am Heck des Fahrzeugs zeigt, wo die konzentrierten blauen Bereiche an den Flügelspitzen und unter dem Rumpf anhaftende Stöße anzeigen, was die aerodynamische Wirksamkeit des Designs weiter

Die Abbildungen 15 und 16 zeigen die Geschwindigkeitskonturen in Strömungsrichtung und das Temperaturfeld um das Fahrzeug. Diese Abbildungen sind entscheidend, um zu verstehen, wie das Fahrzeug bei hohen Geschwindigkeiten mit der Strömung interagiert. Insbesondere enthüllen die Simulationen wichtige thermische Dynamiken und Strömungseigenschaften. Für die in dieser Studie angewandten spezifischen Strömungsbedingungen zeigt das Temperaturfeld um das Fahrzeug erhebl Direkt vor dem Bug des Waveriders wird eine Spitzentemperatur von 1400 Kelvin beobachtet, was auf Bereiche hinweist, in denen die aerodynamische Erwärmung aufgrund der schnellen Strömungsverzögerung am stärksten ist . Diese Information ist entscheidend für die Beurteilung der thermischen Beständigkeit und der strukturellen Integrität des Waveriders unter Betriebsbedingungen.

Machine Translated by Google

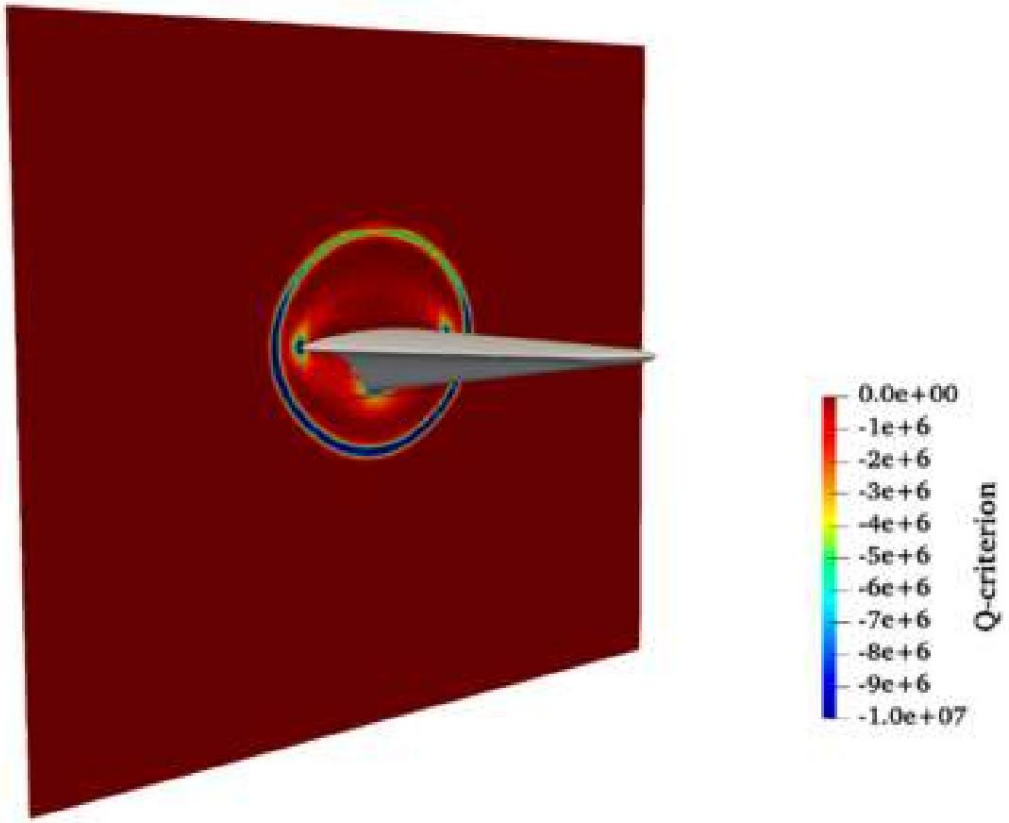


Abbildung 14. Q-Kriterium-Konturen auf einer vertikalen Ebene.

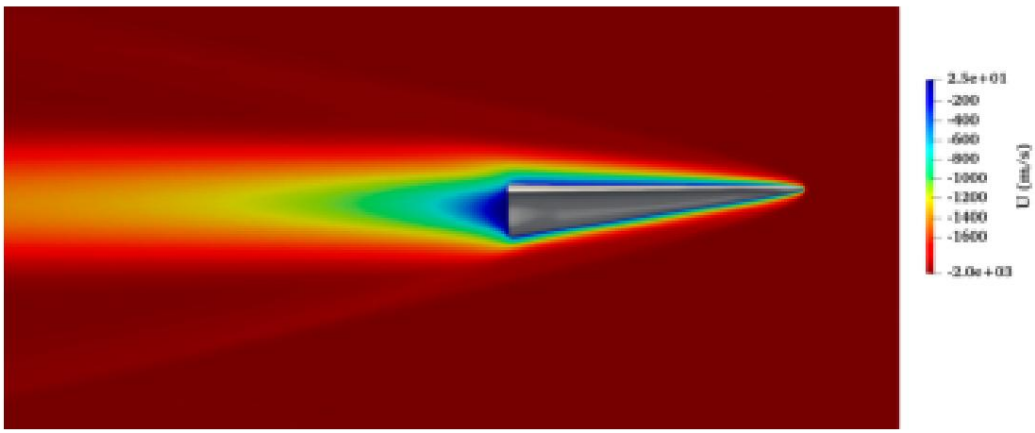


Abbildung 15. Geschwindigkeitskonturen in Strömungsrichtung auf der Symmetrieebene des Wellenreiters.

In den Abbildungen 17 bis 20 werden verschiedene Strömungseigenschaften auf einer Ebene parallel zum Wellenreiter dargestellt , wobei die Oberfläche des Fahrzeugs durch die Variationen des Oberflächendrucks deutlich hervorgehoben wird . Abbildung 17 zeigt insbesondere die Druckkonturen auf dieser Ebene und visualisiert so klar, wie der Druck als Reaktion auf die Form und Aerodynamik des Fahrzeugs variiert . Insbesondere wenn man berücksichtigt, dass der Freiströmungsdruck auf 0,55 Pa festgelegt ist, ist um die Nase des Wellenreiters ein signifikanter Druckanstieg zu beobachten, der um eine Größenordnung höher ist als die Umgebungsbedingungen. Darüber hinaus ist der Druck um die Vorderkanten des Wellenreiters herum etwa viermal höher als der Freiströmungsdruck. Diese detaillierte Abbildung der Druckverteilung ist von entscheidender Bedeutung für die Bewertung der aerodynamischen Leistung und der strukturellen Belastungen, denen der Wellenreiter während des Be

Machine Translated by Google

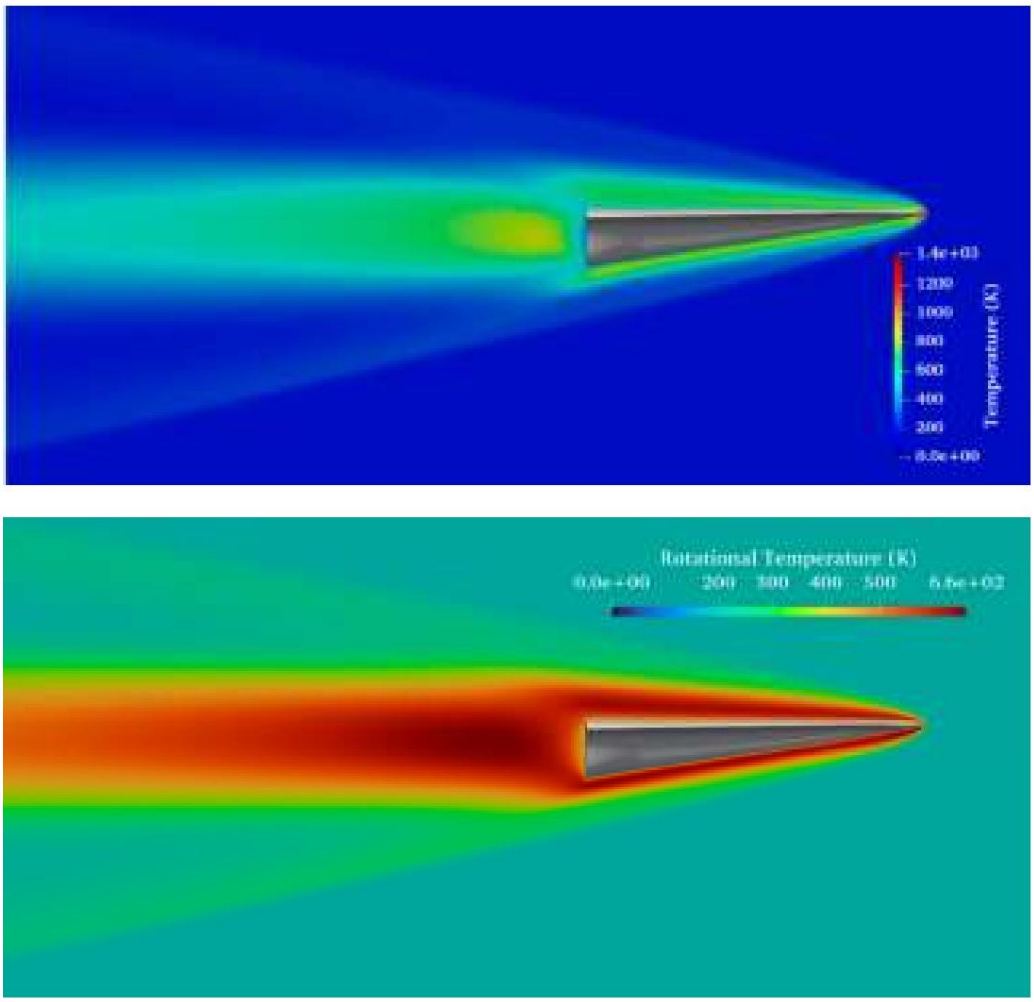


Abbildung 16. (Oben): Gesamttemperaturfeld um das Fahrzeug. (Unten): Rotationstemperaturfeld (auf der Symmetrieebene des Waveriders).

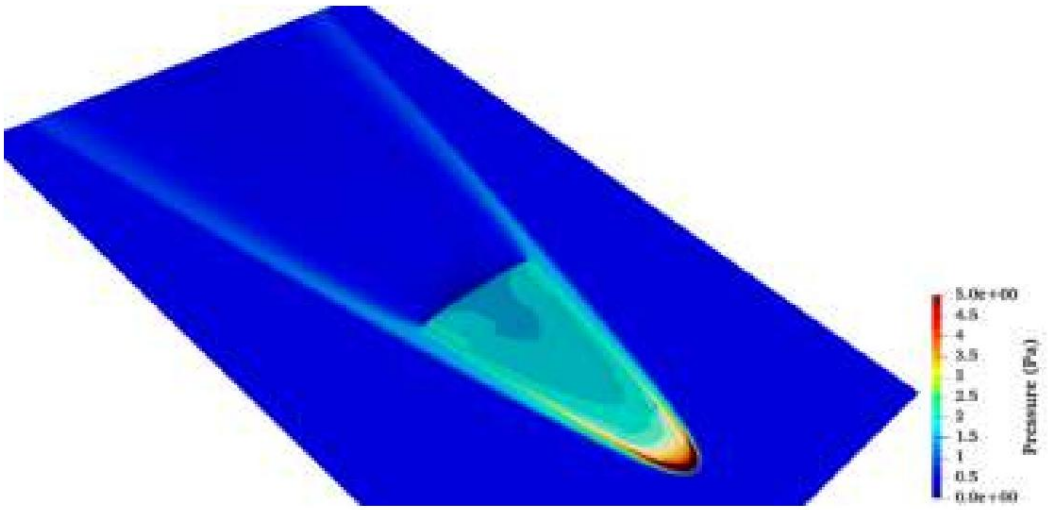


Abbildung 17. Druckkonturen auf einer horizontalen Ebene parallel zum Fahrzeug.

Machine Translated by Google

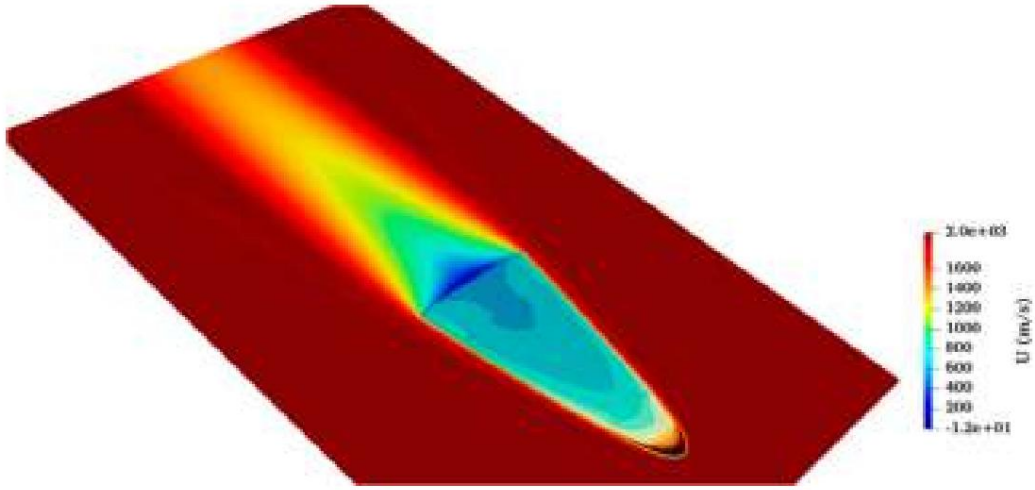


Abbildung 18. Strömungsgeschwindigkeitskonturen auf einer horizontalen Ebene parallel zum Fahrzeug.

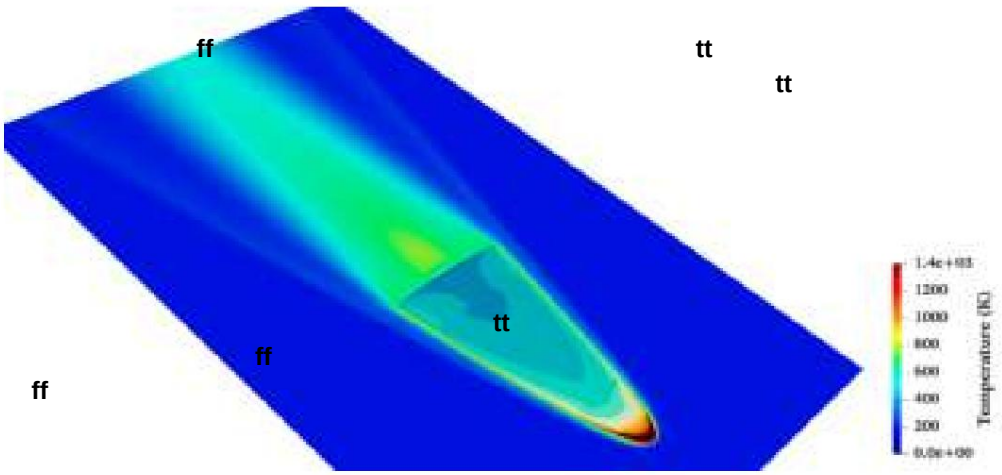


Abbildung 19. Temperaturkonturen auf einer horizontalen Ebene parallel zum Fahrzeug.

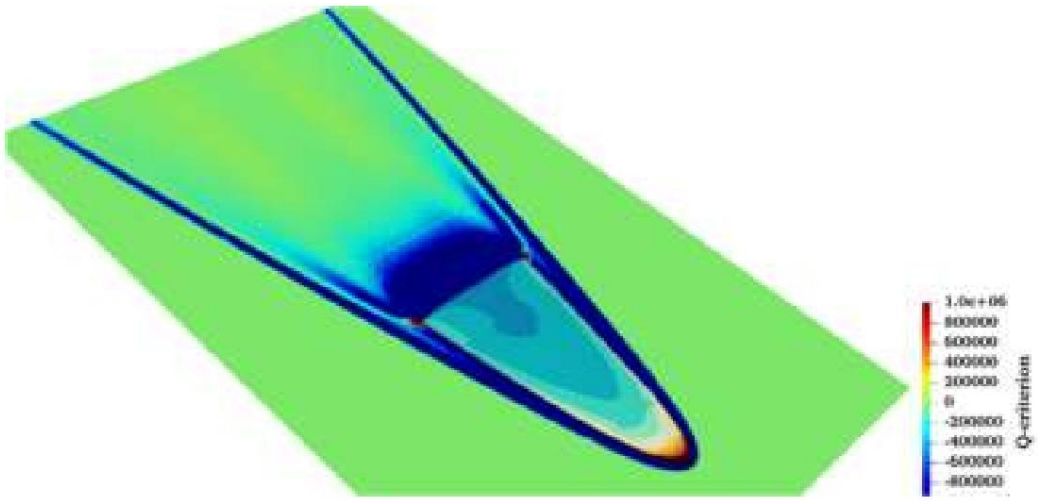


Abbildung 20. Q-Kriterium-Konturen auf einer horizontalen Ebene parallel zum Fahrzeug.

Machine Translated by Google

Abbildung 18 enthält die Geschwindigkeitskonturen auf derselben Ebene. In dieser Abbildung ist die Anbringung des Stoßes an der Vorderkante und der Nase des Fahrzeugs deutlich zu erkennen.
Wie in Abbildung 19 **zu sehen ist , beträgt die Temperatur an den Vorderkanten 800 K und ist damit etwa viermal höher als die Freiströmungstemperatur von 196 K (mit einem Spitzenwert von etwa 1400 K an der Fahrzeugnase).**

In Abbildung 20 ist das Q-Kriterium auf derselben Ebene parallel zum Wellenreiter sorgfältig dargestellt, wodurch das gesamte Feld der anhaftenden Stoßwelle effektiv erfasst wird. Diese Visualisierung unterstreicht die genauen Bereiche, in denen der Stoß an der Oberfläche des Wellenreiters haften bleibt, ein kritischer Aspekt seines aerodynamischen Designs. Darüber hinaus weisen die positiven Werte des Q-Kriteriums in dieser Abbildung auf die Bildung von zwei unterschiedlichen Wirbeln hin, die symmetrisch angeordnet sind, einer auf jeder Seite, an der Spitze des hinteren Teils des Fahrzeugs. Diese Wirbel sind entscheidend für das Verständnis der Strömungsdynamik am Heck des Wellenreiters, insbesondere wie sie die Gesamtstabilität und Kontrolle des Fahrzeugs bei hohen Geschwindigkeiten beeinflussen. Für eine detailliertere Betrachtung dieser Wirbel bietet Abbildung 21 eine verbesserte Ansicht, in der die Wirbelstärke am Heck des Wellenreiters dargestellt ist. In dieser Abbildung sind die beiden Wi Diese Farbdifferenzierung hebt nicht nur die Lage und Intensität der Wirbel hervor, sondern hilft auch bei der Analyse ihrer Struktur und Wechselwirkung mit der umgebenden Strömung. Die Darstellung dieser Wirbel in solch lebendigen Details ist für Ingenieure und Designer von entscheidender Bedeutung, um die aerodynamischen Wechselwirkungen zu bewerten und das Design des Waveriders für eine optimale Leistung zu verfeinern.

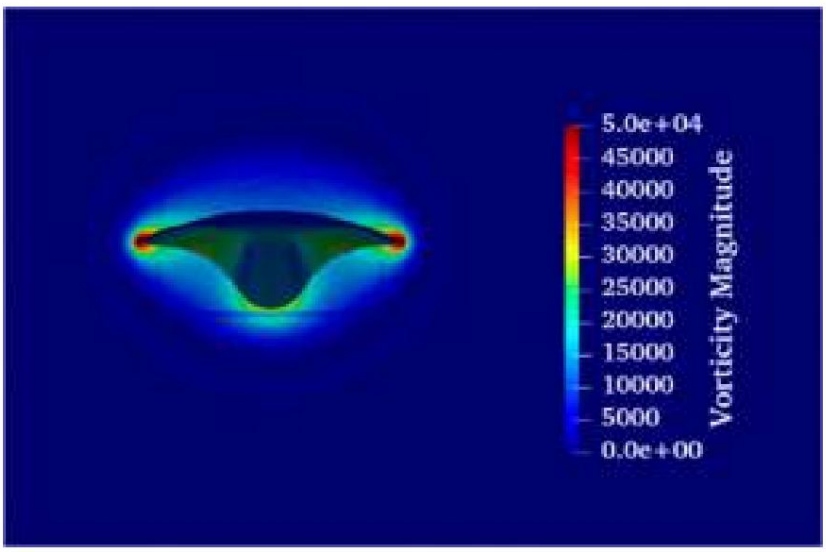


Abbildung 21. Wirbelstärke an der Rückseite des Fahrzeugs.

Angesichts des komplexen Designs des Waveriders wurde es für notwendig erachtet, die dreidimensionalen Isoflächen des Q-Kriteriums zu verwenden, um die komplexen räumlichen Eigenschaften der Stöße und der strukturierten Wirbel, die das Fahrzeug umgeben, vollständig zu erfassen. Abbildung 22 zeigt diese dreidimensionalen Konturen des Q-Kriteriums, die das Fahrzeug umhüllen, wobei die Konturen nach der Größe der Wirbelstärke eingefärbt sind, um die Variationen im Rotationsströmungsverhalten hervorzuheben . Die transparenten, grauen Isoflächen umreißen die äußere Form der Stoßwellen deutlich und bieten einen umfassenden Überblick über ihre dreidimensionale Form. Insbesondere sind in derselben Abbildung auch Teile der Stoßwelle nahe der Kompressionsfläche sichtbar, die einen detaillierten Einblick in die Wechse

Machine Translated by Google

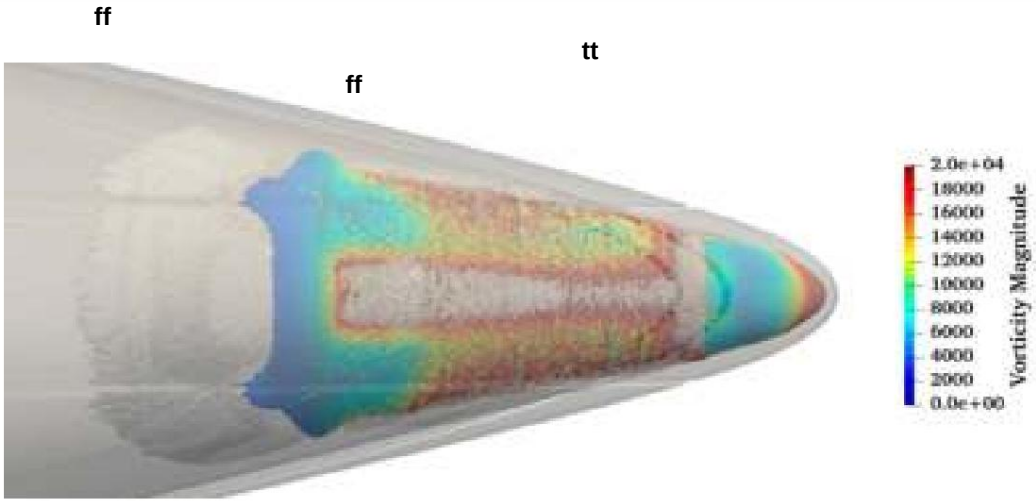


Abbildung 22. Dreidimensionale Q-Kriterium-Konturen, eingefärbt nach Wirbelstärke.

In Abbildung 23 sind diese Konturen ähnlich dargestellt, jedoch stattdessen nach Geschwindigkeitsbetrag eingefärbt, um die Unterschiede in der Strömungsgeschwindigkeit hervorzuheben. Wie in dieser Abbildung dargestellt, lösen sich die Wirbel etwa 30 cm stromabwärts von der Fahrzeugnase – wo die Kompressionsfläche steiler wird – von der Hauptströmung und bewegen sich weiter stromabwärts in Richtung der Bereiche mit höherem Druck am Heck des Fahrzeugs. Diese Trennung ist von entscheidender Bedeutung für das Verständnis des aerodynamischen Verhaltens des Waveriders. Darüber hinaus tritt mit zunehmendem Winkel der Kompressionsfläche zum Fahrzeugheck hin ein spürbarer Druckanstieg auf und die Strömungsgeschwindigkeit verringert sich erheblich; sie verlangsamt sich innerhalb weniger Zentimeter um etwa 1000 m/s. Diese detaillierten Visualisierungen und Analysen der Strömungsdynamik sind von entscheidender Bedeutung für die Beurteilung der Leistungsauswirkungen d

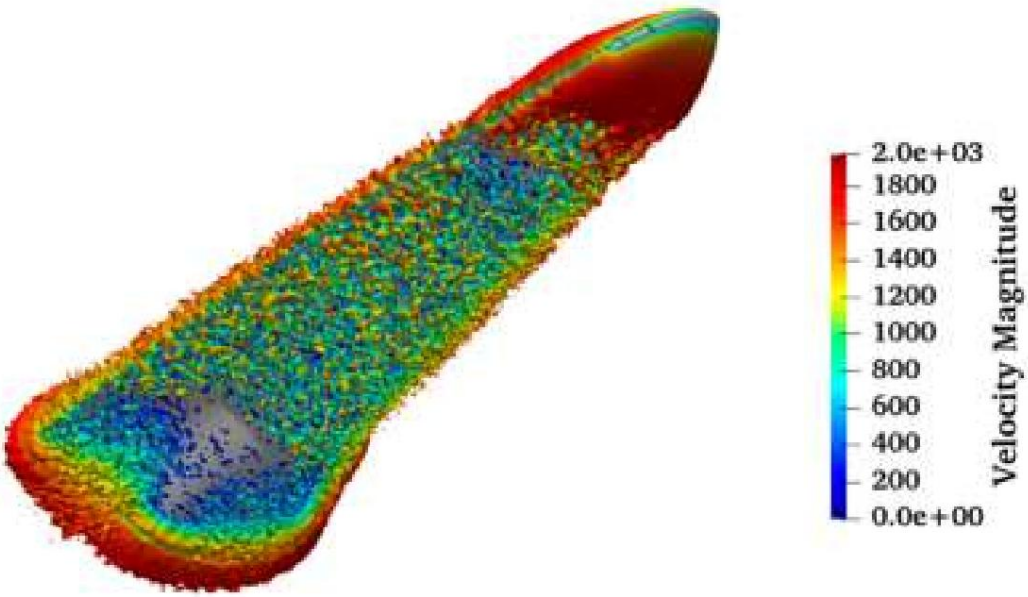


Abbildung 23. Übersicht über die dreidimensionalen Q-Kriterium-Konturen um das Fahrzeug, eingefärbt nach Geschwindigkeitsbetrag.

Um die auf den Waverider wirkenden aerodynamischen Kräfte zu bestimmen, wurden die Scherspannungen und Druckkomponenten über seine dreidimensionale Oberfläche hinweg sorgfältig ber Diese Berechnungen ermöglichen die genaue Messung von Auftriebs- und Widerstandskräften pro Flächeneinheit . Die Ergebnisse sind in Abbildung 24 dargestellt. **Die Analyse dieser Abbildung zeigt, dass der maximale Widerstand hauptsächlich an der Nasenspitze auftritt, während ein erheblicher Auftrieb im Bereich direkt unter der Nase erzeugt wird. Durch Integration der übe**

Machine Translated by Google

Anhand der Oberflächenzellen wurden der Gesamtauftrieb und -widerstand für den Waverider berechnet, was ein Auftriebs-Widerstand- Verhältnis (L/D) von 2,18 ergab. Nach vorliegenden Untersuchungen ist dieses L/D-Verhältnis typisch für einen Waverider, der mit einem Anstellwinkel von 0 Grad betrieben wird [44], was bedeutet, dass ein Wert über 2,0 ein Indiz für **eine effektive aerodynamische Leistung unter den gewählten Konstruktionsbedingungen**

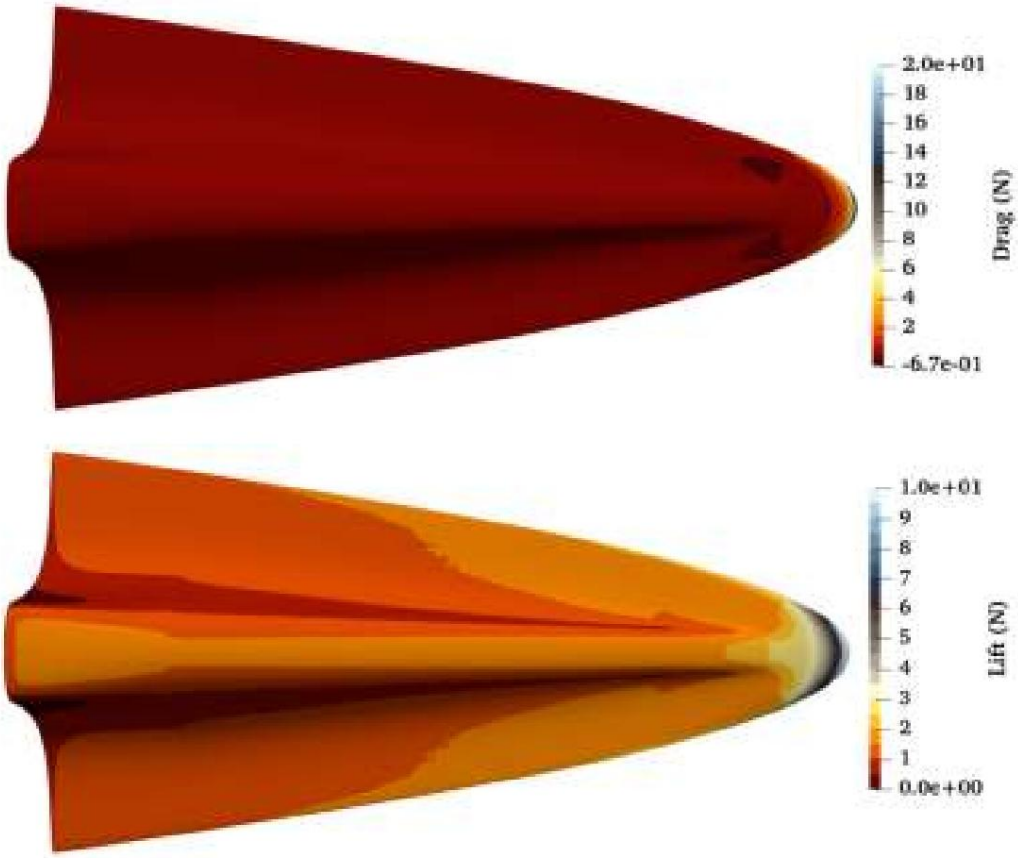


Abbildung 24. Übersicht über den Auftrieb (unten) und Widerstand (oben) pro Flächeneinheit, der auf die Unterseite des Wellenreiters ausgeübt wird.

Die auf der Länge des Waveriders basierenden Knudsen-Zahlenkonturen sind in Abbildung 11 (unten) dargestellt, während die Mach-Zahlenkonturen in der Symmetrieebene in Abbildung 25 dargestellt sind. **Wie gezeigt liegt die Knudsen-Zahl um das Fahrzeug herum im Übergangsbereich, was die Verwendung der DSMC-Methode rechtfertigt.**

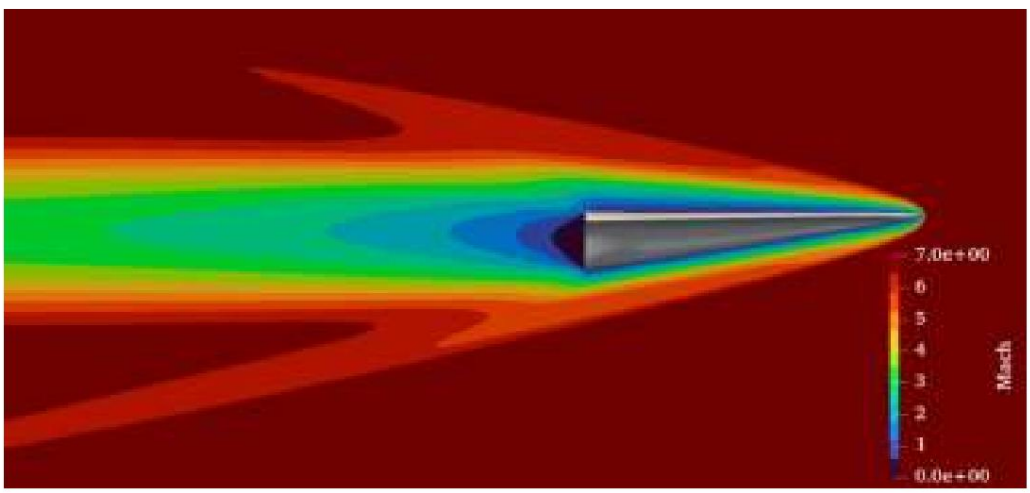


Abbildung 25. Mach-Zahl-Konturen um das Fahrzeug in der Symmetrieebene.

Machine Translated by Google

Für diese Studie wurde nur ein einziger Anstellwinkel untersucht; die Autoren in [44] weisen jedoch darauf hin, dass eine leichte Erhöhung des Anstellwinkels das L/D-Verhältnis potenziell um das Zwei- bis Dreifache erhöhen und damit die Leistung deutlich steigern könnte. Es ist auch bemerkenswert, dass Waverider in der Literatur üblicherweise in Höhen zwischen 25 km und 40 km analysiert werden , im Gegensatz zu der in dieser Studie betrachteten Höhe von 90 km. Die erhöhte Höhe wirkt sich aufgrund unterschiedlicher Strömungsdynamik auf die Auftriebserzeugung aus, was eine größere Kompressionsfläche erforderlich macht als dies bei Waveridern in niedrigeren Höhen normalerwe

Bei dieser Anpassung handelt es sich um eine wichtige Designänderung, die die Leistung des Fahrzeugs unter den dünnen atmosphärischen Bedingungen in großen Höhen verbessert.

6. Schlussfolgerungen

Bei der umfassenden Konstruktion und Analyse eines Mach 7 Waveriders wurden komplexe Computermethoden eingesetzt, um die aerodynamischen Eigenschaften des Fahrzeugs genau zu simulieren . Nach Anwendung der Schmiegekegelmethode wurde zur Definition der Geometrie des Waveriders ein präzises Computernetz erstellt, um die komplexe Oberflächengeometrie, insbesondere um die kritischen Vorderkanten des Waveriders herum, zu erfassen. Eine fortschrittliche Simulationstechnik, die Direct Simulation Monte Carlo (DSMC)-Methode, wurde verwendet, um das dreidimensionale Strömungsfeld um das Fahrzeug herum aufzulösen. Diese Simulation zeigte nicht nur die Druck- und Temperaturbedingungen rund um den Waverider im Detail, sondern hob auch die strukturellen Wechselwirkungen der Stoßwellen hervor, die durch die Visualisierung der strömungsmäßigen Geschwindigkeits- und Temperaturfelder bestätigt wurden.

Zur weiteren Verfeinerung des Simulationsmodells wurden die dreidimensionalen Isoflächen des Q-Kriteriums erstellt, um die Stoß- und Wirbelstrukturen rund um den Waverider detailliert abzubilden. Dies ermöglichte eine eingehende Untersuchung der Strömungsdynamik, insbesondere der Anlagerung von Stoßwellen und der Wirbelbildung an den kritischen Stellen des Fahrzeugs. Derartige detaillierte Analysen waren für die Bestätigung der aerodynamischen Effizienz des Designs unerlässlich. Darüber hinaus ermöglichte der Einsatz von geschichteten Vernetzungstechniken die genaue Erfassung von Grenzschichtphänomenen, die für die Beurteilung der Leistung des Fahrzeugs unter den extremen Bedingungen des Hyperschallflugs von entscheidender Bedeutung sind.

Der Höhepunkt dieser umfangreichen Simulationen war die Berechnung von Auftriebs- und Widerstandskräften , wobei das Auftriebs-Widerstand-Verhältnis mit 2,18 ermittelt wurde, was auf eine effiziente aerodynamische Leistung eines Waveriders bei einem Anstellwinkel von null Grad hinweist. Diese Ergebnisse sind bedeutsam, da sie nicht nur die Leistungsfähigkeit des Waveriders unter den festgelegten Konstruktionsbedingungen demonstrieren, sondern auch potenzielle Verbesserungen für zukünftige Konstruktionen vorschlagen. So könnten beispielsweise Anpassungen des Anstellwinkels die Leistung des Fahrzeugs weiter optimieren. Die Erkenntnisse dieser Studie zur Aerodynamik in großen Höhen, wo unterschiedliche Strömungsdynamiken Modifikationen wie größere Kompressionsflächen erfordern, ebnen den Weg für die verbesserten Konstruktionen zukünftiger Hyp

Beiträge der Autoren: Konzeptualisierung, AK und IKN; Methodik, AK und IKN; Software, AK; Validierung, AK und IKN; Ressourcen, AK; Schreiben – Vorbereitung des Originalentwurfs, AK; Schreiben – Überprüfung und Bearbeitung, IKN; Visualisierung, AK; Überwachung, IKN; Projektverwaltung, IKN; Mittelbeschaffung, IKN. Alle Autoren haben die veröffentlichte Version des Manuskripts gelesen und stimmen ihr zu .

Finanzierung: Diese Studie wurde vom Integrated Air and Missile Defense Centre of Excellence (IAMD COE) finanziert und jegliches geistige Eigentum, das aus der hiervon abgedeckten Arbeit resultiert, ist Eigentum des IAMD COE. Dieses Dokument spiegelt nur die Richtlinien des IAMD COE und die Positionen seiner Autoren wider und soll weder rechtliche Verpflichtungen begründen noch die Richtlinien oder Positionen der NATO widerspiegeln oder die NATO in irgendeiner Weise einbeziehen.

Erklärung zur Datenverfügbarkeit: Die in dieser Studie präsentierten Daten sind auf Anfrage beim entsprechenden Autor erhältlich, da dieses Projekt vom NATO IAMD-COE finanziert wurde und für die Weitergabe der Daten dessen ausdrückliche Genehmigung erforderlich ist.

Danksagungen: Die Autoren möchten dem UKTC und EPSRC für die Rechenzeit auf der britischen Supercomputeranlage ARCHER2 über die Projekte EP/R029326/1 und EP/X035484/1 danken

Machine Translated by Google

Interessenkonflikte: Die Autoren erklären, dass keine Interessenkonflikte bestehen.

Verweise

1. **Sandlin, DR; Pessin, DN** Aerodynamische Analyse von Hyperschall-Waverider-Flugzeugen; **NASA-CR-192981; NASA: Washington, DC, USA, 1993.**
2. **Nonweiler, TRF Deltaflügel mit einer Form, die sich für die exakte Stoßwellentheorie eignet.** JR Aerosp. Soc. **1963,** 67, **39.** [CrossRef] **3. Sziroczak, D.; Smith, H. Eine Überprüfung der spezifischen Konstruktionsprobleme von Hyperschallflugkörpern.** Prog. Aerosp. Sci. **2016,** 84, **1–28.** [Querverweis]
4. **Zhang, TT; Wang, ZG; Huang, W.; Yan, L. Parametrisierung und Optimierung von Hyperschall-Gleitflugfahrzeugkonfigurationen während der Konzeption.** Aerosp. Sci. Technol. **2016,** 58, **225–234.** [CrossRef]
5. **Kontogiannis, K. Zur Entwicklung effizienter parametrischer Geometriemodelle für Waverider-basierte Hyperschallflugzeuge. Dissertation, University of Southampton, Southampton, Großbritannien, 2017.**
6. **Son, J.; Son, C.; Yee, K. Ein neuartiges direktes Optimierungsframework für inverse Designmethoden für Hyperschall-Waverider.** Luft- und Raumfahrt **2022, 9, 348.** [CrossRef]
7. **Flower, JW Konfigurationen für hohe Überschallgeschwindigkeiten, abgeleitet aus einfachen Stoßwellen und Expansionen.** R. Aeronaut. Soc. J. **1963,** 67, **287–290.** [CrossRef]
8. **Kuchemann, D.** Die aerodynamische Auslegung von Flugzeugen: Eine ausführliche Einführung in den aktuellen aerodynamischen Kenntnisstand und Praxisleitfaden zur Lösung von Flugzeugkonstruktionsproblemen; **Pergamon Press: Oxford, Großbritannien, 1978.**
9. **Bowcutt, KG Multidisziplinäre Optimierung von luftatmenden Hyperschallfahrzeugen.** J. Propuls. Power **2001,** 17, **1184–1190.** [CrossRef]
10. **Cockrell, CE, Jr. Interpretation von Waverider-Leistungsdaten mittels numerischer Strömungsmechanik.** J. Aircr. **1994,** 31, **1095–1100.** [Querverweis]
11. **Corda, S.; Anderson, J., Jr. Viskose optimierte Hyperschall-Wellenreiter, entworfen aus achsensymmetrischen Strömungsfeldern. In Proceedings of das 26. Treffen der Luft- und Raumfahrtwissenschaften, Reno, NV, USA, 14. Januar 1988.**
12. **Nonweiler, TRF Aerodynamische Probleme bemannter Raumfahrzeuge.** R. Aeronaut. Soc. J. **1959,** 63, **521–528.** [CrossRef]
13. **Zubin, MA; Ostapenko, NA Experimentelle Untersuchung einiger Singularitäten der Überschallströmung um V-förmige Flügel.** Fluid Dyn. **1975,** 10, **647–652.** [CrossRef]
14. **Ostapenko, NA Aerodynamische Eigenschaften von V-förmigen Flügeln mit Stoßwellen, die sich bei Überschall von den Vorderkanten lösen Geschwindigkeiten.** Fluid Dyn. **1993,** 28, **545–552.** [CrossRef]
15. **Maksimov, FA; Ostapenko, NA V-förmige Flügel mit einem Öffnungswinkel größer als ÿ bei Über- und Hyperschallströmungsgeschwindigkeiten.** Dokl. Phys. **2016,** 61, **412–417.** [CrossRef]
16. **Mazhul, II; Rakhimov, RD Numerische Untersuchung von Off-Design-Regimen der Strömung an Potenzgesetz-Wellenreitern vorbei basierend auf der Strömungen hinter ebenen Stoßdämpfern.** Fluid Dyn. **2003,** 38, **806–814.** [CrossRef]
17. **Mazhul, II; Rakhimov, RD Hyperschall-Wellenreiter mit Potenzgesetzform.** J. Aircr. **2004,** 41, **839–845.** [CrossRef]
18. **Mazhul, II Off-design regimes of flow past waveriders based on isentropic compression flow.** Fluid Dyn. **2003,** 45, **271–280.** [Querverweis]
19. **Jones, JG; Moore, KC; Pike, J.; Roe, PL Eine Methode zur Konstruktion von Hubkonfigurationen für hohe Überschallgeschwindigkeiten unter Verwendung rotationssymmetrische Strömungsfelder.** Ing.-Arch. **1968,** 37, **56–72.** [CrossRef]
20. **Mangin, B.; Benay, R.; Chanetz, B.; Chpoun, A. Optimierung von viskosen Wellenreitern, abgeleitet aus rotationssymmetrischen Potenzgesetz-Strömungen stumpfer Körper.** J. Spacecr. Rocket. **2006,** 43, **990–998.** [CrossRef]
21. **Corda, S. Viskose optimierte Hyperschall-Wellenreiter, entworfen auf der Grundlage von Strömungen über Kegel und Körper mit minimalem Widerstand. Dissertation, University of Maryland, College Park, MD, USA, 1988.**
22. **Ding, F.; Liu, J.; Shen, C.-B.; Huang, W. Neuartiger Ansatz für das Design eines Waverider-Fahrzeugs, das aus rotationssymmetrischen Überschall- fließt an einer spitzen von Karman-Ogive vorbei.** Aerosp. Sci. Technol. **2015,** 42, **297–308.** [CrossRef]
23. **Rasmussen, ML Auftriebskörperkonfigurationen, abgeleitet aus Überschallströmungen an geneigten Kreis- und Ellipsenkegeln. In Proceedings der 5. Konferenz für atmosphärische Flugmechanik für zukünftige Weltraumsysteme, AIAA-Beitrag, Boulder, CO, USA, 6.–8. August 1979; S. 1665.**
24. **Rasmussen, ML Waverider-Konfigurationen, abgeleitet aus geneigten kreisförmigen und elliptischen Kegeln.** J. Spacecr. Rocket. **1980,** 17, **537–545.** [Querverweis]
25. **Rasmussen, ML; Jischke, MC; Daniel, DC Experimentelle Kräfte und Momente auf kegelförmigen Waveridern für m = 3 bis 5.** J. Raumfahrer. Rakete. **1982,** 19, **592–598.** [CrossRef]
26. **Rasmussen, ML; Jischke, MC; Daniel, DC Experimentelle Oberflächendrücke auf kegelförmigen Wellenreitern für M = 3–5.** J. Spacecr. Rakete. **1983,** 20, **539–545.**
27. **Lin, SC; Rasmussen, ML Kegelförmige Wellenreiter mit kombinierter Quer- und Längskrümmung. In Proceedings of das 26. Treffen der Luft- und Raumfahrtwissenschaften, AIAA-Papier 88–03714, Reno, NV, USA, 11.–14. Januar 1988.**
28. **Liu, CZ; Bai, P.; Chen, BY; Ji, CQ Schnelles Design und Optimierung von Waverider aus 3D-Strömung. In Proceedings der 16. AIAA Aviation Technology, Integration, and Operations Conference, AIAA Paper 2016–3288, Washington, DC, USA, 13.–17. Juni 2016.**
29. **Mclaughlin, TA Viskose optimierte Hyperschall-Wellenreiter für chemische Gleichgewichtsströmungen. Masterarbeit, Universität Maryland, College Park, MD, USA, 1990.**

Machine Translated by Google

30. Anderson, JD; Chang, J.; Mclaughlin, TA Hyperschall-Wellenreiter: Auswirkungen chemisch reagierender Strömung und viskoser Wechselwirkung. In Proceedings des 30. Aerospace Sciences Meeting and Exhibit, AIAA-Papier 92–0302, Reno, NV, USA, 6.–9. Januar 1992.

31. Li, MY; Zhou, H. Forschung zur Entwurfsmethode für die aerodynamische Konfiguration von Waveridern auf der Grundlage kommerzieller CFD-Software. Chin. Q. Mech. **2014,** 35, **293–299.**

32. Taylor, GI; Macoll, JW Der Luftdruck auf einen Kegel, der sich mit hoher Geschwindigkeit bewegt I. Proc. R. Soc. A **1933,** 139, **278–297.**

33. Santos, WF Einfluss der Stumpfheit auf das Verhältnis von Auftrieb zu Widerstand bei hypersonischer Keilströmung. J. Spacecr. Rocket. **2009,** 46, **329–339.** [CrossRef]

34. Chen, XQ; Hou, ZX; Liu, JX; Gao, XZ Einfluss der Stumpfheit auf die Leistung des Waveriders. Comput. Fluids **2011,** 48, **30–43.** [Querverweis]

35. Tincher, DJ; Burnett, DW Hyperschall-Waverider-Testfahrzeug – ein logischer nächster Schritt. J. Spacecr. Rocket. **1994,** 31, **392–399.** [CrossRef]

36. Bird, GA Molekulare Gasdynamik und die direkte Simulation von Gasströmen; **Clarendon Press: Oxford, UK, 1994.**

37. Wagner, W. Ein Konvergenzbeweis für Birds Monte-Carlo-Methode zur direkten Simulation der Boltzmann-Gleichung. J. Stat. Phys. **1992,** 66, **1011–1044.** [CrossRef]

38. Gallis, MA; Torczynski, JR; Plimpton, SJ; Rader, DJ; Koehler, T. Direkte Simulation Monte Carlo: Das Streben nach Geschwindigkeit. In Tagungsband des 29. Symposiums zur Dynamik seltener Gase (RGD), Xi'an, China, 13.–18. Juli 2014.

39. Koura, K.; Matsumoto, H. Variables weiches Kugel-Molekülmodell für Luftspezies. Phys. Fluids A Fluid. Dyn. **1992, 4, 1083–1085.** [Querverweis]

40. Borgnakke, C.; Larsen, PS Statistisches Kollisionsmodell für die MonteCarlo-Simulation von mehratomigen Gasgemischen. J. Comput. Phys. **1975,** 18, **405–420.** [CrossRef]

41. Gallis, MA; Torczynski, JR Einfluss von Kollisionspartnerauswahlschemata auf die Genauigkeit und Effizienz der Monte-Carlo-Methode zur direkten Simulation. Int. J. Numer. Methods Fluids **2011,** 67, **1057–1072.** [CrossRef]

42. Zhan, JM; Li, YT; Wai, WHO; Hu, WQ Vergleich zwischen dem Q-Kriterium und Rortex bei der Anwendung eines In-Stream Struktur. Phys. Fluids **2019,** 31, **121701.** [CrossRef]

43. Jeong, J.; Hussain, F. Zur Identifizierung eines Wirbels. J. Fluid Mech. **1995,** 285, **69–94.** [CrossRef]

44. Huang, W.; Ma, l.; Wang, Z.; Pourkashanian, DB; Luo, S.; Lei, JA parametrische Studie über die aerodynamischen Eigenschaften eines Hyperschall-Waverider-Fahrzeug. Acta Aeronaut. **2011,** 69, **135–140.** [CrossRef]

Haftungsausschluss/Anmerkung des Herausgebers: Die in allen Veröffentlichungen enthaltenen Aussagen, Meinungen und Daten sind ausschließlich die der einzelnen Autoren und Mitwirkenden und nicht die von MDPI und/oder den Herausgebern. MDPI und/oder die Herausgeber lehnen jegliche Verantwortung für Personen- oder Sachschäden ab, die aus den im Inhalt erwähnten Ideen, Methoden, Anweisungen oder Produkten resultieren.

Machine Translated by Google

Berechnung

MDPI

Artikel

Hybrider Nanofluidfluss über eine schrumpfende rotierende Scheibe: Response Surface-Methode

Rusya Iryanti Yahaya [1], Norihan Md Arifin 1,2,*, Ioan Pop [3], Fadzilah Md Ali 1,2 und Siti Suzilliana Putri Mohamed Isa 1,4

1 Institut für Mathematische Forschung, Universiti Putra Malaysia, Serdang 43400, Malaysia; rusyairyanti@gmail.com (RIY); fadzilahma@upm.edu.my (FMA); ctsuzilliana@upm.edu.my (SSPMI)
2 Fachbereich Mathematik und Statistik, Universiti Putra Malaysia, Serdang 43400, Malaysia
3 Fachbereich Mathematik, Babeÿ-Bolyai-Universität, 400084 Cluj-Napoca, Rumänien; popm.ioan@yahoo.co.uk
4 Centre of Foundation Studies for Agricultural Science, Universiti Putra Malaysia, Ser
* Korrespondenz: norihana@upm.edu.my

Zusammenfassung: Für effiziente Heiz- und Kühlanwendungen sind minimale Wandschubspannungen und maximale Wärmeübertragungsraten erwünscht. Die vorliegende Studie optimierte den lokalen Reibungskoeffizienten und die Nusselt-Zahl im Al2O3 -Cu/Wasser-Hybrid-Nanofluidfluss über eine durchlässige, schrumpfende rotierende Scheibe. Zunächst werden die zugrundeliegenden Gleichungen und Randbedingungen numerisch mit dem bvp4c-Solver in MATLAB gelöst. Von Kármáns Transformationen werden verwendet, um die partiellen **Differentialgleichungen in lösbare nichtlineare gewöhnliche Differentialgleichungen zu reduzieren .** Die Erhöhung des **Massenübertragungsparameters reduziert nachweislich den lokalen Reibungskoeffizienten und die Nusselt-Zahl. Im Injektionsfall werden höhere Gleichzeitig verbesserte und reduzierte die Erhöhung des Schrumpfparameters den lokalen Reibungskoeffizienten und die Nusselt-Zahl. Anschließend wurde die Response Surface Methodology (RSM) angewendet, um die Wechselwirkungen der Kontrollparameter bei der Optimierung der interessierenden physikalischen Größen zu verstehen. Mit einer Erwünschtheit von 66 % werden der lokale Reibungskoeffizient und die Nusselt-Zahl auf 1,528780016 und 0,888353037 optimiert, wenn der Schrumpfparameter** *(ÿ)* **und der Massentransferparameter** (S) **ÿ0,8 bzw.** ÿ0,6 **betragen .**

Schlüsselwörter: Scheibe; hybrides Nanofluid; RSM; Schrumpfen; Saugen/Injektion

check for updates

Zitat: Yahaya, RI; Arifin, NM; Pop, I.; Ali, FM; Isa, SSPM Hybrider Nanofluidfluss über eine schrumpfende rotierende Scheibe: Response Surface Methodology. Computation **2024,** 12, **141. https://doi.org/ 10.3390/ calculation12070141**

Wissenschaftliche Herausgeber: Ali Cemal Benim, Abdulmajeed A. Mohamad, Sang-Ho Suh, Rachid Bennacer, Paweÿ Oclon und Jan Taler

Empfangen: 28. Juni 2024
Überarbeitet: 6. Juli 2024
Akzeptiert: 8. Juli 2024
Veröffentlicht: 10. Juli 2024

Copyright: © 2024 bei den Autoren. Lizenznehmer MDPI, Basel, Schweiz.
Dieser Artikel ist ein Open Access-Artikel vertrieben unter den Bedingungen und Bedingungen der Creative Commons Namensnennungslizenz (CC BY) (https:// creativecommons.org/licenses/by/ 4.0/).

1. Einleitung

Rotierende Maschinen, Gasturbinenrotoren und Systeme zur Erzeugung thermischer Energie gehören zu den zahlreichen praktischen Anwendungen der klassischen rotierenden Scheibenströmung [1]. Die Navier-Stokes-Gleichungen für rotierende Scheibenströmungen wurden erstmals von Von Kármán [2] vorgestellt. In dieser Studie wurden Von Kármáns **Transformationen eingeführt, um die partiellen Differenzialgleichungen in ein System gewöhnlicher Differenzialgleichungen zu reduzieren. Später wurden diese Gleichungen bei verschiedenen rotierenden Scheibenströmungsproblemen verwendet. Ayano et al. [3] haben eine numerische Berechnung der magnetohydrodynamischen (MHD) Nanofluidströmung über eine sich streckende rotierende Scheibe mit Brownscher Bewegung, Thermophorese und gyrotaktischen Mikroorganismen durchgeführt. In dieser Studie wurden Von** Kármáns **Transformationen verwendet und es stellte sich heraus, dass der erhöhte Dehnungsparameter das Temperaturprofil reduzierte. Gleichzeitig verbesserte und reduzierte die Verstärkung der Thermophorese und der Brownschen Bewegung das Konzentrationsprofil.** Anschließend **analysierten Sharma et al.** [4] **den instationären Fluss des Nanofluids über eine rotierende Scheibe mit variabler Viskosität, Brownscher Bewegung** und Thermophorese **Puneeth et al. [5] untersuchten dann die instationäre Strömung über eine durchlässige, sich dehnende rotierende Scheibe. Dabei wurde beobachtet, dass ein hoher Volumenanteil an Nanopartikeln die Temperatur- und Geschwindigkeitsprofile des Nanofluids verbesserte und reduzierte.**

Machine Translated by Google

Forscher haben auch den rotierenden Scheibenfluss von hybriden Nanofluiden untersucht, die die Dispersion von zwei verschiedenen Nanopartikeln enthalten. Rashid et al. [6] analysierten den MHD-Hybrid- Nanofluidfluss über einer rotierenden Scheibe mit Brownscher Bewegung und Thermophorese. Es wurde festgestellt, dass das hybride Nanofluid eine bessere Wärmeleitfähigkeit als da Darüber hinaus verringerte die Verstärkung des Magnetfelds die Axial- und Tangentialgeschwindigkeiten und erhöhte gleichzeitig den Oberflächenwiderstand. Gleichzeitig verbesserten Thermophorese und Volumenanteil der Nanopartikel die Wärmeübertragungsleistung. Alkuhayli [7] erweiterte diese Studie um Wärmestrahlung und Wärmequelle/-senke. Die Verstärkung der Wärmestrahlung und der variablen Wärmeleitfähigkeitsparameter erhöhte nachweislich das Temperaturprofil und die lokale Nusselt-Zahl. Diese Studie wurde von Kumar et al. [8] weiter ausgebaut. Sie betrachteten die elektromagnetohydrodynamische Strömung über einer sich ausdehnenden rotierenden Scheibe mit einer unregelmäßigen Wärmequelle, Arrhenius-Energie und nichtlinearer Strahlung. Es wurde festgestellt, dass die Erhöhung des elektrischen Parameters den Reibungskoeffizienten verringerte und die Wärmeübertragungsrate verbesserte . Unterdessen fand Kulkarni [9] heraus, dass die Wärmeübertragungsrate mit der Sphärizität der Nanopartikel in einer hybriden Nanofluidströmung über einer durchlässigen rotierenden Scheibe mit gemischter Konvektion, Magnetfeld und Schlupf zunahm. Lone et al. [10] analysierten dann den MHD- Fluss von Al2O3-Cu/Wasser-Hybrid-Nanofluid über eine rotierende Scheibe mit Geschwindigkeitsschlupf, Nullmassenstrom und konvektiven Randbedingungen. Als nächstes führten Khashi'ie et al. [11] eine Stabilitätsanalyse an mehreren Lösungen durch, die im MHD-Hybrid-Nanofluid-Fluid über eine durchlässige, sich dehnende/schrumpfende rotierende Scheibe mit Wärmeentwicklung erhalten wurden. Die Ergebnisse zeigten, dass nur die erste und die zweite Lösung stabil und physikalisch signifikant waren, während die dritte Lösung instabil war. Darüber hinaus verbesserte nur der Saugparameter die Wärmeübertragungsleistung des Hybrid-Nanofluids. Vijay und Sharma [12] untersuchten dann die Soret- und Dufour-Effekte auf den MHD-Hybrid-Nanofluid-Fluid über eine durchlässige, sich verlangsamende rotierende Scheibe. Später analysierten Abu Bakar et al. [13] den instationären Fluss von Al2O3-Cu/Wasser-Hybrid-Nanofluid über eine geneigte, schrumpfende, rotierende Scheibe mit Wärmestrahlung und Geschwindigkeitsschlupf . Ebenso erwies sich nur die erste Lösung als stabil, während die zweite Lösung instabil war. Der Volumenanteil der Nanopartikel, die Strahlung und die Schrumpfparameter erhöhten die Wärmeübertragungsrate. Kürzlich analysierten Forscher auch den rotierenden Scheibenfluss von ternären und tetrahybriden **Nanofluiden, die aus drei und vier verschiedenen, in einer Basisflüssigkeit dispergierten Nanopartikeln bestehen** (siehe Ali et al. **[14], Singh et**

Darüber hinaus haben Forscher auch statistische Analysen einbezogen, um theoretische Untersuchungen des Flüssigkeitsflusses über einer rotierenden Scheibe zu verbessern. Ein hoch entwickeltes statistisches Werkzeug namens Response Surface Methodology (RSM) wird häufig eingesetzt, um die Auswirkungen und Bedeutung verschiedener Kontrollparameter auf bestimmte Reaktionen zu analysieren. Die optimalen Bedingungen zum Erreichen der gewünschten Reaktion können ebe Mehmood et al. [19] nutzten das RSM zur Optimierung der lokalen Hautreibungskoeffizienten und der Nusselt-Zahl im MHD-Nanofluidfluss an einer gestreckten rotierenden Scheibe mit Entropieerzeugung und autokatalytischer chemischer Reaktion. Es zeigte sich, dass beide interessierenden physikalischen Größen durch den höheren Wert des magnetischen Parameters optimiert werden konnten. Anschließend betrachteten Shafiq et al. **[20] den Darcy-Forchheimer-Fluidfluss von Nanofluid an einer gestreckten rotierenden Scheibe mit Wärmestrahlung . Basierend auf dem RSM und der Sensitivitätsanalyse war die lokale Nusselt-Zahl am empfindlichsten gegenüber dem Feststoffvolumenanteil, gefolgt vom Strahlungsparameter und der Biot -Zahl. Später untersuchten Mathew et al. [21] die Auswirkungen des Magnetfelds und der Schichtung im biokonvektiven Stagnationspunktfluss über eine gestreckte rotierende Scheibe. Diese Studie setzte das RSM ein, um die Beziehung zwischen dem Magnetfeld, der thermischen Schichtung, dem Nanopartikel-Volumenanteil von Magnetit, dem Geschwindigkeitsverhältnisparameter und der Wärmeübertragungsrate zu untersuchen. Es wurde festgestellt, dass die Parameter der thermischen Schichtung und des Magnetfelds eine negative Korrelation mit der Wärmeübertragungsrate aufweisen. Kürzlich wurde das RSM von Hussain et al. [22]** verwendet , **um den MHD-Nanofluidfluss an einer rotierenden Scheibe mit Wärmestrahlung und Joule-Heizung vorbei z**

Machine Translated by Google

instationärer hybrider Nanofluidfluss über eine rotierende Scheibe mit Wärmeerzeugung. In der Zwischenzeit wurde die Wärmeübertragungsrate durch die magnetischen, Saug- und Wärmeerzeugungsparameter beeinflusst.

Aufgrund der Seltenheit von Strömungsstudien mit rotierenden Scheiben, die numerische und statistische Untersuchungen kombinieren, konzentriert sich die vorliegende Forschung auf diese Ansätze, um die Strömungs- und Wärmeübertragungsleistung in der Al2O3-Cu/Wasser-Hybrid-Nanofluidströmung an einer schrumpfenden rotierenden Scheibe vorbei zu analysieren. Die Oberfläche wird als durchlässig angenommen, um ein Ansaugen/Einspritzen zu ermöglichen. Die partiellen Differentialgleichungen und Randbedingungen, die dieses Strömungsproblem bestimmen, werden numerisch mit dem bvp4c-Solver in MATLAB gelöst. Anschließend wird RSM ausgeführt, um die Wechselwirkung von Massenübertragung mit Schrumpfparametern und ihre Bedeutung bei der Optimierung der interessierenden physikalischen Größen zu analysieren. Die vorliegende Studie zielt darauf ab, die bestehende Literaturlücke zu schließen und ein besseres Verständnis der Auswirkungen von Massenübertragung und Schrumpfparametern auf das betrachtete Ström

2. Mathematische Formulierung

Das Arbeitsfluid enthält in Wasser dispergierte Nanopartikel aus Aluminiumoxid (Al2O3) und Kupfer (Cu) . Diese Kombination wurde gewählt, weil Cu-Nanopartikel eine hohe Wärmeleitfähigkeit bieten , Al2O3 -Nanopartikel eine gute Inertheit aufweisen und Wasser überall verfügbar ist. Eine experimentelle Studie von Siddiqui et al. [24] hat zudem **gezeigt, dass ein Al2O3-Cu/Wasser-Hybrid** -Nanofluid mit einem Mischungsverhältnis von 50:50 insgesamt verbesserte hydrothermale Eigenschaften **mit verbesserter Wärmeleitfähigkeit und besserer Stabilität aufweist .** Die Korrelationen und **Werte der thermophysikalischen Eigenschaften für das Al2O3-Cu/Wasser-Hybrid-Nanofluid basieren auf Takabi et al.** [25] **und Oztop und Abu-Nada** [26]. **Bei einer geringen Volumenkonzentration dieses** Hybrid-Nanofluids stellten sich die von Takabi et al. [25] **vorgeschlagenen Korrelationen als in guter** Übereinstimmung mit den von Suresh et al. [27] **vorgestellten Versuchsergebnissen** heraus. **Anschließend wird in der vorliegenden Studie** eine **geringe Volumenkonzentration von Cu- und Al2O3-** Nanopartikeln verwendet (d. h. **ÿAl2O3** = ÿCu = **0,02).**

= = 0,02

Die Strömungskonfiguration wird dabei durch Zylinderkoordinaten (r, **ÿ, z) bzw.** **, ,** **Geschwindigkeitskomponenten** (ų, **v, w) beschrieben. Die schematische Darstellung ist in Abbildung 1 dargestellt.**

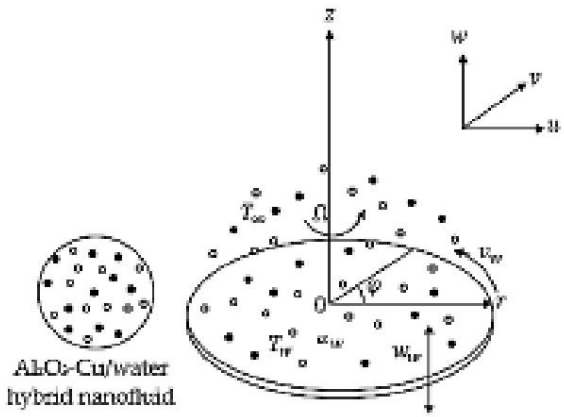


Abbildung 1. Schematische Darstellung des Strömungsproblems.

Es wird angenommen, dass die Flüssigkeit im Bereich z ÿ **0 über eine unendlich rotierende Scheibe mit gleichmäßiger Schrumpfrate** a **in radialer Richtung r fließt; Winkelgeschwindigkeit** ÿ; **Massenflussgeschwindigkeit** ww ≡ *ÿÿb* f S **mit Massentransferparameter** S **und kinematischer Viskosität der Basisflüssigkeit** ÿb f ; **und konstanter Temperatur** Tw. **Unterdessen wird angenommen, dass die umgebende hybride Nanoflüssigkeit eine Temperatur von Tÿ hat, wobei** Tw > **Tÿ für eine heiße Scheibe ist. In der vorliegenden Studie wird die Strömung als gleichmäßig und achsensymmetrisch betrachtet (d. h.** *ÿ/ÿÿ* = **0 für alle Variablen). / = 0**

Machine Translated by Google

Unter den genannten Annahmen lauten die maßgebenden Gleichungen und Randbedingungen für die laminare, inkompressible newtonsche hybride Nanofluidströmung wie folgt [28,29]:

$$\frac{\ddot{y}uu + \ddot{y}r}{} \quad \frac{}{R} \quad \frac{\ddot{y}w}{\ddot{y}z} = \mathbf{0}, + \tag{1}$$

$$\text{Sie} \quad \frac{\ddot{y}\,u\,\ddot{y}\,u + w\,\ddot{y}\,r\,\ddot{y}}{z} \quad \frac{}{R} = \frac{\mu hn\,f}{\ddot{y}hn\,f} \quad \frac{\mathbf{1}}{} \quad \frac{\ddot{y}u}{\ddot{y}rr} \quad \text{Sie} \quad \frac{\ddot{y}\,2u\,\ddot{y}\,2u + + \mathbf{2}\,\mathbf{2}}{\mathbf{2}\,,\,\ddot{y}\,r\,\ddot{y}\,zr} \tag{2}$$

$$\text{Sie} \quad \frac{\ddot{y}\,v\,\ddot{y}\,v + w + \ddot{y}\,r}{\ddot{y}\,z} \quad \frac{}{R} = \frac{\mu hn\,f}{\ddot{y}hn\,f} \quad \frac{\mathbf{1}\,\ddot{y}v}{\ddot{y}rr} \quad \frac{}{R^{\mathbf{2}}} \quad \frac{\ddot{y}\,2v\,\ddot{y}\,2v + + \mathbf{2}\,\mathbf{2}\,,}{\ddot{y}\,r\,\ddot{y}\,z} \tag{3}$$

$$\text{Sie} \quad \frac{\ddot{y}\,v\,\ddot{y}\,v + w + \ddot{y}\,r}{\ddot{y}\,z} \quad \frac{}{R} = \frac{\mu hn\,f}{\ddot{y}hn\,f} \quad \frac{\mathbf{1}\,\ddot{y}v}{R\ \ddot{y}r} \quad \frac{}{R^{\mathbf{2}}} + \frac{\ddot{y}\,2v}{\ddot{y}\,r\ \ \mathbf{2}\,\ddot{y}\,z} + \frac{\ddot{y}\,2v}{\mathbf{2}\,,} \tag{4}$$

$$\text{Sie} \quad \frac{\ddot{y}\,T\,\ddot{y}\,T + w\,\ddot{y}\,z}{\ddot{y}\,r} \quad \frac{}{} = \frac{khn\,f}{\ddot{y}\,Cp \quad hn\,f} \quad \frac{}{R} + \mathbf{2}\,,\,\ddot{y}r \quad \frac{\ddot{y}\,2T\,\ddot{y}\,2T\,\mathbf{1}\,\ddot{y}T +}{\ddot{y}\,r\,\ddot{y}\,z\ \mathbf{2}} \tag{5}$$

$$u = uw = ar,\ v = vw = \ddot{\mathbf{y}}\ \mathbf{r},\ w = ww,\ T = Tw \ \textbf{bei}\ z = \mathbf{0}\ u\ \ddot{\mathbf{y}}\ \mathbf{0},\ v\ \ddot{\mathbf{y}}\ \mathbf{0},\ T\ \ddot{\mathbf{y}}\ \mathbf{T\ddot{y}}\ \textbf{wenn}\ z\ \ddot{\mathbf{y}}\ \ddot{\mathbf{y}} \quad . \tag{6}$$

In diesen Gleichungen bezeichnet der Index hn f das **hybride Nanofluid,** μ **ist die dynamische Viskosität,** $\ddot{y}$ **ist die Dichte,** k **ist die Wärmeleitfähigkeit,** Cp **ist die spezifische Wärmekapazität,** T **ist die Temperatur und** p **ist der Druck. Anschließend werden diese partiellen Differentialgleichungen den folgenden Von** Kármán- **Transformationen** unterworfen **[2]:**

$$u = \ddot{\mathbf{y}}\ r\ f(\ddot{y}\ ),\ v = \ddot{\mathbf{y}}\ rg(\ddot{y}),\ w = \ddot{\mathbf{y}}\ \ddot{y}b\ f\ h(\ddot{y}),\ \ddot{y}(\ddot{y}) = \ddot{\mathbf{y}}\ P(\ddot{y}),\ \ddot{y} = zp\ \ddot{\mathbf{y}}\ \mathbf{p\ddot{y}} = \mathbf{2}\ \frac{\mu b\ f}{\ddot{y}} \quad \frac{\ddot{y}}{\ddot{y}b\ f} \quad \frac{T\ddot{y}T\ddot{y}}{Tw\ddot{y}\ \mathbf{T\ddot{y}}} \quad \ddot{\mathbf{y}} \quad \ddot{\mathbf{y}} \tag{7}$$

um die folgenden nichtlinearen gewöhnlichen Differentialgleichungen und Randbedingungen zu bilden:

$$\mathbf{2}\ f + h \quad \ddot{y} = \mathbf{0}, \tag{8}$$

$$\frac{\mu hn\ f\ /\mu b\ f\ f}{\ddot{\mathbf{y}}\ddot{\mathbf{y}}\ \ddot{\mathbf{y}}\ hf\ \ddot{y}hn} \quad \ddot{y} \quad \ddot{\mathbf{y}}\ f \quad \mathbf{2} + g \quad \mathbf{2} = \mathbf{0}, \tag{9}$$

$$f\ /\ddot{y}b\ f\ \mu hn$$

$$\frac{f\ /\mu b\ f\ g\ \ddot{y}hn}{\ddot{y}b\ f\ khn\ f\ /} \quad f\ / \quad \text{''}\ \ddot{\mathbf{y}}\ h\ \mathbf{g\ddot{y}}\ \ddot{\mathbf{y}}\ \mathbf{2}\ fg = \mathbf{0}, \tag{10}$$

$$\frac{kb\ f\ \ddot{y}\ Cp\ /}{\ddot{y}\ Cp \quad hn\ f} \quad \ddot{y}\ \text{„}\ \ddot{\mathbf{y}}\ Prh\ \ddot{y} \quad \ddot{y} = \mathbf{0}, \tag{11}$$

$$bf$$

$$\mathbf{g(0)} = \mathbf{1},\ \mathbf{f(0)} = \ddot{\mathbf{y}},\ \mathbf{h(0)} = \mathbf{S},\ \ddot{\mathbf{y}}\mathbf{(0)} = \mathbf{1}\ g(\ddot{y})\ \ddot{\mathbf{y}}\ \mathbf{0},\ f(\ddot{y})\ \ddot{\mathbf{y}}\ \mathbf{0},\ \ddot{y}(\ddot{y})\ \ddot{\mathbf{y}}\ \mathbf{0} \quad \text{als}\ \ddot{y}\ \ddot{\mathbf{y}}\ \ddot{\mathbf{y}} \quad , \tag{12}$$

wobei ÿÿ die Differenzierung nach ÿ bezeichnet; bf **sich auf das Basisfluid bezieht;** f , **g und** h **die Radial-, Tangential- und Axialgeschwindigkeit sind;** $\ddot{y}$ = **a/ÿ der Schrumpfungsparameter ist;** S **der Massentransferparameter mit** S < **0 für Injektion und** S > **0 für Saugen ist; und /**kb f **die Prandtl-Zahl ist. Laut Turkyilmazoglu [28] kann der Fluiddruck** Pr = μ Cp **durch Integration von Gleichung (4) bestimmt werden, und die resultierende Druckgleichung ist vom Strömungsfeld entkoppelt. Da das Interesse dieser Studie auf der Analyse der Strömungs- und Wärmefelder d**

Machine Translated by Google

Die physikalischen Größen, die dann von Interesse sind, sind der Reibungskoeffizient (Cf) **und die Nusselt- Zahl** (Nur) **[28]:**

$$Cf = \frac{\mu hn\, f}{f(\ddot{y}\, r)} \sqrt{\left(\frac{\ddot{y}\, u\, \ddot{y}\, w + \ddot{y}\, z}{\ddot{y}\, \ddot{y}\, z=0\, \ddot{y}b}\right)^2 + \left(\frac{\ddot{y}\, v\, 1 + \ddot{y}\, zr}{} - \frac{\ddot{y}\, w}{\ddot{y}\, \ddot{y}\, z=0}\right)^2},$$

$$Nur = \frac{r\, kn\, f}{kb\, f\, (Tw\ \ddot{y}\ T\ddot{y})} \left(\frac{\ddot{y}\, T}{\ddot{y}\, z}\right)_{z=0},$$

was zu folgendem Ergebnis führt:

$$\text{Re1/2}_{r\,Cf} = \frac{\mu hn}{f\,\mu b\, f} \sqrt{[f\,\ddot{y}(0)]2 + [g\,\ddot{y}(0)]2}, \quad \text{Reÿ1/2}_{r\,Nur} = \ddot{y}\,\ddot{y}\, kb\, f \left(\frac{khn\, f}{}\right)^{\ddot{y}}(0), \tag{13}$$

wobei Re1/2 r Cf **ist der lokale Reibungskoeffizient; Reÿ1/2** r Nur **ist die lokale Nusselt-Zahl; ist die lokale Reynolds-** **und** $Rer = \frac{2\,\ddot{y}r}{\ddot{y}b\, f}$ **Zahl. Hier kann eine Erhöhung der Winkelgeschwindigkeit** **Erhöhung der lokalen Reynoldszahl.**

3. Response Surface Methodologie (RSM)

Box und Wilson [30] führten einen auf experimentellem Design basierenden Ansatz ein, der statistische und mathematische Techniken beinhaltet und als Response Surface Methodology (RSM) bezeichn Mit dem RSM kann ein System mit abhängigen (Antwort-) und unabhängigen Parametern modelliert, analysiert und optimiert werden. Die Beziehung zwischen den Antwort- und den unabhängigen Parametern kann wie folgt beschrieben werden [31]:

$$\textbf{Antwort} = F(X1, \textbf{X2, X3, . . . ,} XN) \pm \textbf{E}, \tag{14}$$

wobei F **die unbekannte Funktion der Antwort mit X1, X2, X3, ... ,** XN **als unabhängige Parameter** ist ; **und** E **der zufällige experimentelle Fehler ist, von dem angenommen wird, dass er einen Mittelwert von Null hat. Das allgemeine quadratische Modell ist**

$$\textbf{Antwort} = c0 + \ddot{y}_{ich=1}^{N} cixi + \ddot{y}_{ich\,i=1}^{N} 2\,ciix + \ddot{y}_{ich=1}^{N\,\ddot{y}\,1} \ddot{y}_{j=i+1}^{N} cijxixj, \tag{15}$$

wobei c0, ci , cii **und** cij jeweils **die Achsenabschnitte sowie die linearen, quadratischen und bilinearen Zwei-Faktor-Terme darstellen.**

Die vorliegende Studie verwendet das RSM- und flächenzentrierte Zentralverbunddesign, um die Bedeutung der Massentransfer- und Schrumpfparameter für den lokalen Reibungskoeffizienten und die Nusselt-Zahl sowie die optimalen Einstellungen dieser Parameter zur Minimierung und Maximierung der Reaktionen zu untersuchen. Daher werden die Massentransfer- und Schrumpfparameter als unabhängige Parameter bezeichnet und der lokale Reibungskoeffizient und die Nusselt-Zahl sind die Reaktionen. Die unabhängigen Parameter werden als A und B bezeichnet und mit tatsächlichen und codierten Werten versehen, wie in Tabelle 1 gezeigt. Die Bereiche für die tatsächlichen Werte basieren auf der numerischen Untersuchung, die in der vorliegenden Studie durchgeführt wu

Tabelle 1. Die tatsächlichen und codierten Werte der unabhängigen Parameter.

Unabhängig Parameter	Symbol	Ebene		
		Niedrig (ÿ1)	Mittel (0)	Hoch (1)
ÿ	A	ÿ1,0	ÿ0,9	ÿ0,8
S	B	ÿ0,6	ÿ0,1	0,4

Das Central Composite Design ist das am häufigsten verwendete Response Surface Design zur Bestimmung der Koeffizienten des quadratischen Modells. Nach Bhattacharya [32] ist

Machine Translated by Google

Das zentrale Verbunddesign hat den Vorteil, die nichtlineare Beziehung zwischen die unabhängigen Parameter und die Reaktion sowie die Fähigkeit, maximale Informationen mit minimalen experimentellen Daten, und es sind weniger Experimente erforderlich, um vorherzusagen der quadratische Term in einem quadratischen Modell. Das zentrale zusammengesetzte Design besteht aus von mehreren Typen, einschließlich des flächenzentrierten Typs. Der flächenzentrierte Zentralkomposit Design erfordert drei Stufen jedes Faktors oder unabhängigen Parameters (d. h. ÿ1, 0, 1) mit $2^N + 2N + C$ Experimente. Dabei ist N die Anzahl der unabhängigen Parameter; 2N bezeichnet die Fakultätspunkte; 2N bezeichnet die Achsenpunkte; und C bezeichnet die Mittelpunkte. Sahoo und Barman [33] haben angegeben, dass die Mittelpunkte zwischen drei und sechs variieren können. In diesem In der vorliegenden Studie werden mit N = 2 und C = 5 insgesamt 13 Durchläufe durchgeführt. Die jeweiligen Die mit MATLAB für jeden Durchlauf berechneten Antworten werden dann in Tabelle 2 tabellarisch aufgeführt. Abbildung 2 zeigt das Flussdiagramm der numerischen und statistischen Verfahren zur aktuelle Studie.

Tabelle 2. Versuchsaufbau und Antwortwerte.

Läuft	Codierte Werte		Tatsächliche Werte		Antworten	
	A	B	ÿ	S	Zu 1/2gl. (Antwort 1)	Reÿ1/2 Nur (Antwort 2)
1	ÿ1	ÿ1	ÿ1,0	ÿ0,6	1,803245471	0,232133118
2	1	ÿ1	ÿ0,8	ÿ0,6	1,529299905	0,975650061
3	ÿ1	1	ÿ1,0	0,4	1.475361873	0,000000014
4	1	1	ÿ0,8	0,4	1.229514429	0,000001138
5	ÿ1	0	ÿ1,0	ÿ0,1	1.642240690	0,000228587
6	1	0	ÿ0,8	ÿ0,1	1.380007580	0,004928016
7	0	ÿ1	ÿ0,9	ÿ0,6	1.659170147	0,525530320
8	0	1	ÿ0,9	0,4	1.346068736	0,000000126
9	0	0	ÿ0,9	ÿ0,1	1.504436107	0,001106468
10	0	0	ÿ0,9	ÿ0,1	1.504436107	0,001106468
11	0	0	ÿ0,9	ÿ0,1	1.504436107	0,001106468
12	0	0	ÿ0,9	ÿ0,1	1.504436107	0,001106468
13	0	0	ÿ0,9	ÿ0,1	1.504436107	0,001106468

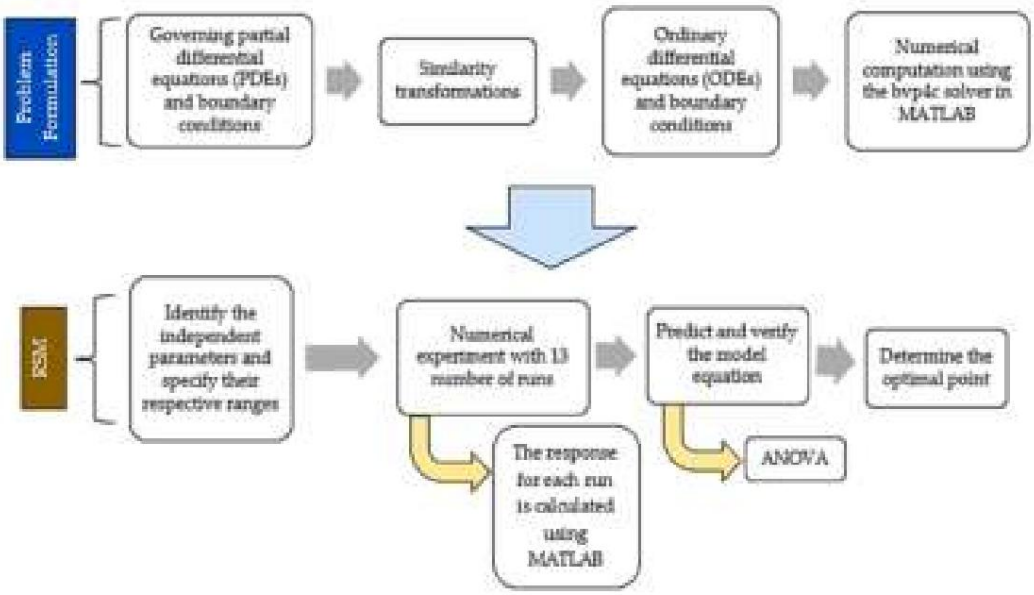


Abbildung 2. Flussdiagramm der numerischen und statistischen Verfahren.

4. Ergebnisse und Diskussion

Das Randwertproblem (8)–(12) wird numerisch gelöst mit dem bvp4c-Solver in MATLAB, und der Algorithmus wird in den Zusatzmaterialien vorgestellt. Ein Vergleich von

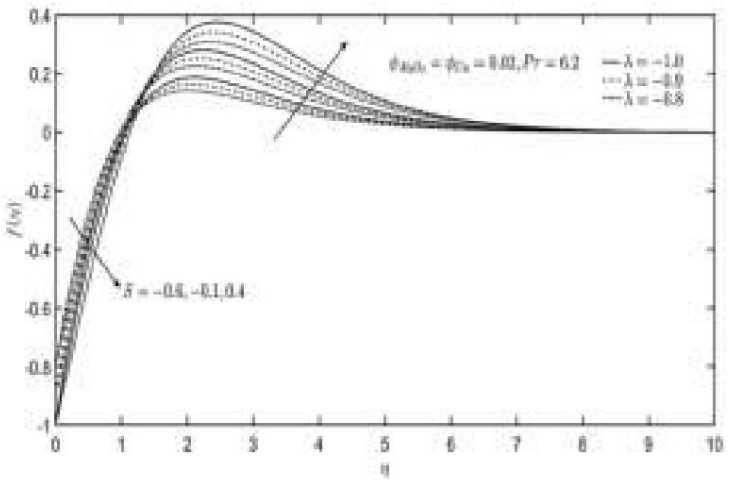
Machine Translated by Google

Ergebnisse werden gemacht, um die Richtigkeit des mathematischen Ansatzes zu validieren, der in dieser aktuelle Studie. Für ÿhn f = **0 reduziert sich das Randwertproblem in ein klassisches viskoses Fluidströmungsproblem, und die numerischen Ergebnisse können mit denen verglichen werden, die durch Rashidi et al. [34] und Turkyilmazoglu [28]. Diese früheren Studien nutzten die Aufnahme und spektrale Tschebyscheff-Kollokationsmethoden. Trotz der unterschiedlichen Berechnungstechniken stimmen die vom bvp4c-Solver erzeugten Ergebnisse eng mit den frühere Studien (siehe Tabelle 3). Darüber hinaus unter der Annahme des endlichen Wertes des freien Stroms Randbedingung (d. h.** *ÿ* **ÿ ÿ) von ÿmax = 10, alle in dieser Untersuchung erfassten Profile nähern sich den Randbedingungen der freien Strömung (12) asymptotisch an. Daher verbessert es Vertrauen in die Zuverlässigkeit der numerischen Ergebnisse.**

Tabelle 3. Vergleich der Ergebnisse für ÿAl2O3 = ÿCu = S = *ÿ* = **0 und** Pr = **6,2.**

	Rashidi et al. [34]	Türkyilmazoglu [28]	Aktuelle Studie
F ÿ (0)	0,510186	0,51023262	0,510232394
ÿg ÿ (0)	0,61589	0,61592201	0,615921866
ÿÿ ÿ (0)	-	0,93387794	0,933877577

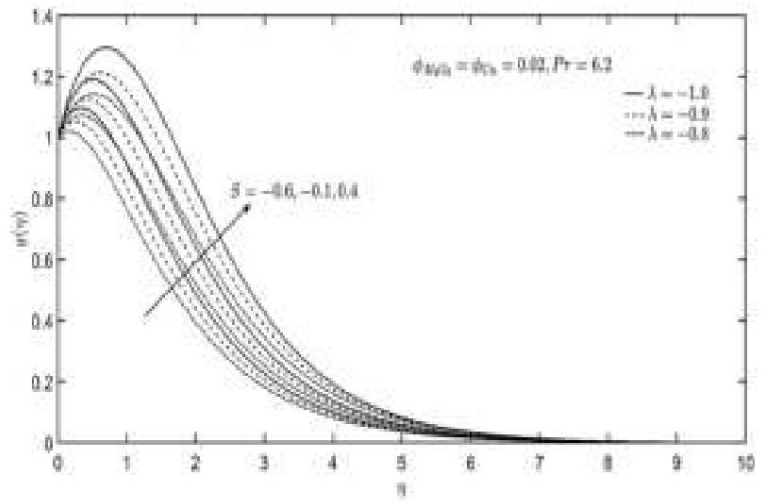
Die Auswirkungen von Schrumpfungs- und Massenübertragungsparametern auf Geschwindigkeit und Temperatur Profile sind in Abbildung 3 dargestellt. Die radialen, tangentialen und axialen Geschwindigkeiten werden durch *f(ÿ), g(ÿ)* **und** *h(ÿ)* **. Wie in Abbildung 3a zu sehen ist, ist das Radialgeschwindigkeitsprofil von die hybride Nanoflüssigkeit nimmt mit der Erhöhung des Stoffübergangsparameters ab und die Größe des Schrumpfungsparameters. Es wird jedoch das entgegengesetzte Verhalten beobachtet in einiger Entfernung von der Scheibe. Da angenommen wird, dass die Scheibe keine Rutschgefahr hat und in radialer Richtung zu schrumpfen, die Radialgeschwindigkeit des hybriden Nanofluids in der Nähe der Scheibe nimmt ab, wenn die Größe des Schrumpfungsparameters zunimmt. Die Schrumpfungseffekte in Richtung der Fluidgeschwindigkeit nehmen in einiger Entfernung von der Scheibe ab (siehe Abbildung 3a). Die Schrumpfung der Scheibe hat keinen Einfluss auf die tangentialen und Axialgeschwindigkeiten des hybriden Nanofluids. Die Tangentialgeschwindigkeit des hybriden Nanofluids steigt in der gesamten Grenzschicht weiter an, wenn der Stoffübergangsparameter und Ausmaß der Schrumpfparametererhöhung (siehe Abbildung 3b). Abbildung 3c zeigt dass das axiale Geschwindigkeitsprofil in der Nähe der Scheibe mit dem Massentransferparameter ansteigt und der Größe des Schrumpfparameters. Da der Massentransfer in der axialen Richtung steigt die Fluidgeschwindigkeit mit dem Massentransferparameter. Währenddessen Die Radialgeschwindigkeit in der Nähe der Scheibe, wie in Abbildung 3a dargestellt, nimmt aufgrund der Flüssigkeitsentfernung aus der Rand durch Sog** (S > **0). Die Zunahme des Stoffübergangsparameters und der Größe des Schrumpfungsparameters verbessert dann das Temperaturprofil, wie in Abbildung 3d dargestellt.**



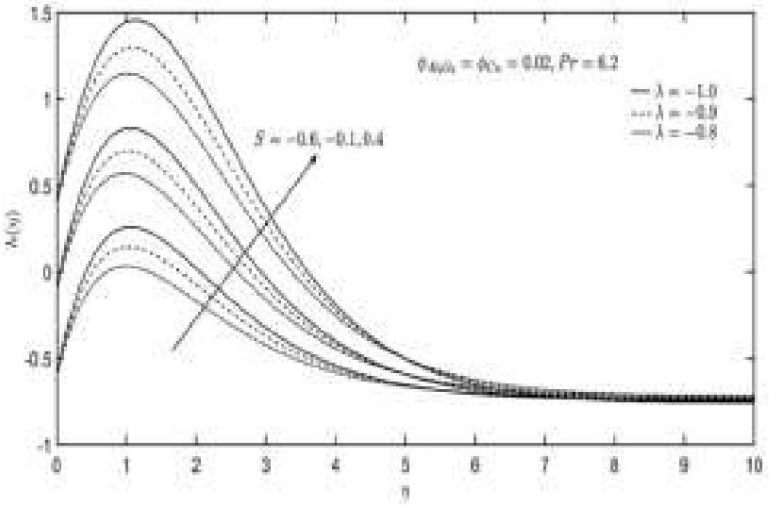
(A)

Abbildung 3. Fortsetzung

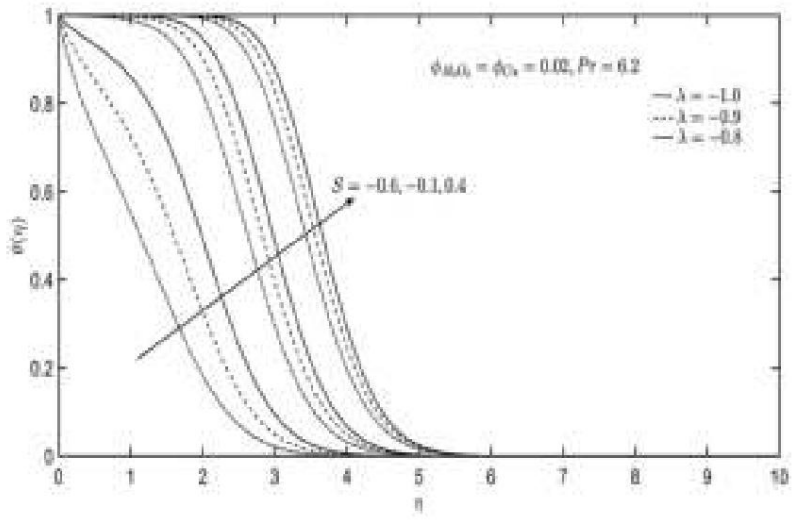
Machine Translated by Google



(B)



(C)



(D)

Abbildung 3. Die Profile von (a) Radialgeschwindigkeit, (b) Tangentialgeschwindigkeit, (c) Axialgeschwindigkeit und (d) Temperatur bei verschiedenen *ÿ*- **und S- Werten .**

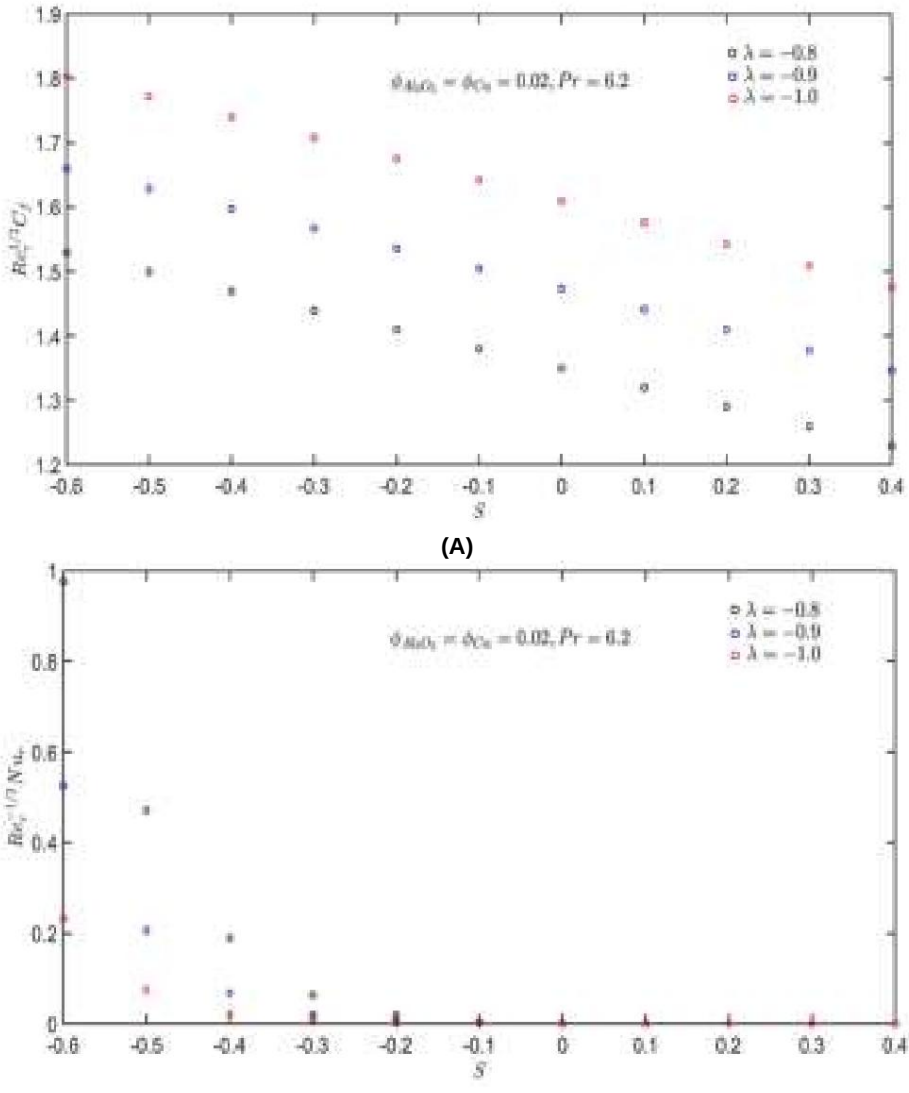
Als nächstes werden die Auswirkungen von Schrumpfungs- und Massentransferparametern auf die lokale Oberflächenreibung untersucht.

Koeffizient und Nusselt-Zahl sind in Abbildung 4 dargestellt. Die Erhöhung der Masse

Übertragungsparameter wird gefunden, um den lokalen Reibungskoeffizienten und die Nusselt-Zahl zu reduzieren

Machine Translated by Google

in Abbildung 4a,b. Gleichzeitig ist die Zunahme der Schrumpfung
Parameter erhöht den lokalen Reibungskoeffizienten, wie in Abbildung 4a dargestellt. Somit ist die Wand
Die Scherspannung steigt mit der Zunahme des Schrumpfparameters. Im Gegensatz dazu
die lokale Nusselt-Zahl nimmt mit zunehmendem |*ÿ*| **ab. Das beobachtete Verhalten kann darauf zurückzuführen sein**
zur Verringerung der für die Wärmeübertragung verfügbaren Oberfläche. Daher verursacht es die Wärme
Transferrate zwischen Scheibe und hybridem Nanofluid abnimmt. Darüber hinaus ist zu beachten,
dass die Werte des lokalen Reibungskoeffizienten und der Nusselt-Zahl für die Injektion
(S **<** 0) **höher sind als im Saugfall** (S > **0).**



(A)

(B)

Abbildung 4. Die Profile von (a) lokalem Hautreibungskoeffizienten und (b) lokaler Nusselt-Zahl mit verschiedenen Werte von *ÿ* und S.

Unterdessen beeinflussen die wechselseitigen Einflüsse der Schrumpfungs- und Massentransferparameter auf Die physikalischen Größen von Interesse werden mit dem RSM in Minitab analysiert. Die Korrelationen zwischen den unabhängigen Parametern und den Antworten sind wie folgt gegeben:

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

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

Die Bedeutung der einzelnen Terme in den Gleichungen (16) und (17) wird durch die Varianzanalyse (ANOVA). Die Ergebnisse sind in den Tabellen 4 und 5 dargestellt.

Machine Translated by Google

Tabelle 4. Varianzanalyse für Antwort 1.

Quelle	Verteidigung	Adj SS	Adj MS	F-Wert	p-Wert
Modell	5	0,249759313	0,049951863	174774.611709837	0,000000000
Linear	2	0,249435660	0,124717830	436370.320105496	0,000000000
A	1	0,101927475	0,101927475	356630.043436460	0,000000000
B	1	0,147508184	0,147508184	516110.596774533	0,000000000
Quadrat	2	0,000126277	0,000063139	220.913397825	0,000000474
AA	1	0,000124396	0,000124396	435.243856915	0,000000146
BB	1	0,000008884	0,000008884	31.084684334	0,000837291
2-Wege Interaktion	1	0,000197376	0,000197376	690.591542539	0,000000030
AB	1	0,000197376	0,000197376	690.591542539	0,000000030
Fehler	7	0,000002001	0,000000286		
Mangelnde Passform	3	0,000002001	0,000000667	*	*
Reiner Fehler	4	0,000000000	0,000000000		
Gesamt	12	0,249761314			

Das Symbol * bedeutet, dass der Wert zu klein ist.

Tabelle 5. Varianzanalyse für Antwort 2.

Quelle	Verteidigung	Adj SS	Adj MS	F-Wert	p-Wert
Modell	5	1.000087703	0,200017541	29,206710770	0,000150454
Linear	2	0.594033446	0,297016723	43,370603881	0,000113785
A	1	0,093304904	0,093304904	13,624451749	0,007745032
B	1	0,500728543	0,500728543	73,116756012	0,000059439
Quadrat	2	0,267850314	0,133925157	19,555851501	0,001363026
AA	1	0,001069278	0,001069278	0,156136818	0,704502971
BB	1	0,216321666	0,216321666	31,587451304	0,000798846
2-Wege Interaktion	1	0,138203943	0,138203943	20,180643085	0,002824322
AB	1	0,138203943	0,138203943	20,180643085	0,002824322
Fehler	7	0,047938393	0,006848342		
Mangelnde Passform	3	0,047938393	0,015979464	*	*
Reiner Fehler	4	0,000000000	0,000000000		
Gesamt	12	1.048026096			

Das Symbol * bedeutet, dass der Wert zu klein ist.

Das Symbol * bedeutet, dass der Wert zu klein ist.

Nach Alhadri et al. [35] ist ein Term statistisch signifikant, wenn sein p-Wert kleiner ist als 0,05. Basierend auf den Tabellen 4 und 5 sind alle Terme für die Korrelation signifikant (16), während die Der Term AA kann aus der Korrelation entfernt werden (17), da sein p-Wert größer als 0,05 ist. Nach der Eliminierung des insignifikanten Terms wird eine zweite ANOVA für Antwort 2 durchgeführt. Dann Man erhält folgende neue Korrelationen, die nur die signifikanten Terme enthalten:

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

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

Basierend auf den Gleichungen (18) und (19) ist der Term B negativ korreliert mit Antwort 1 und Antwort 2. Daher ist der Anstieg des Massentransferparameters wirkt sich ungünstig auf den lokalen Reibungskoeffizienten und die Nusselt-Zahl aus. Diese Die Erkenntnisse stimmen mit den in Abbildung 4 erzielten Ergebnissen überein .

Dann können die Wechselwirkungen zwischen den Schrumpfungs- und Massentransferparametern werden durch die Oberflächen- und Konturdiagramme in den Abbildungen 5 und 6 analysiert. Basierend In Abbildung 5 verringert die Erhöhung von A und B die Antwort 1. Die höheren und mittleren Ebenen von Schrumpfungsparameter (A) und Massentransferparameter (B) ergeben niedrige Werte von Re1/2 r Cf (Antwort 1). Das maximale Re1/2 r Cf (Antwort 1) tritt bei niedrigen Konzentrationen auf

Machine Translated by Google

dieser unabhängigen Parameter. Abbildung 6 zeigt, dass niedrigere Werte der Stoffübergangsparameter (B) und höhere Schrumpfungsparameter (A) führen zu hohe Werte von Reÿ1/2 (Antwort 2). Bei einem moderaten Massentransfer Parameter (B), hat die Erhöhung des Schrumpfparameters (A) keinen signifikanten Einfluss auf Reÿ1/2 (Antwort 2).

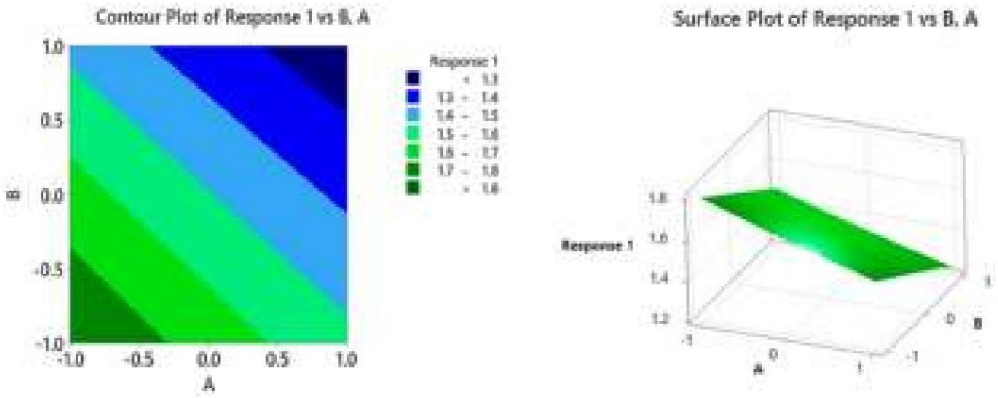


Abbildung 5. Kontur- und Oberflächendiagramme für Antwort 1.

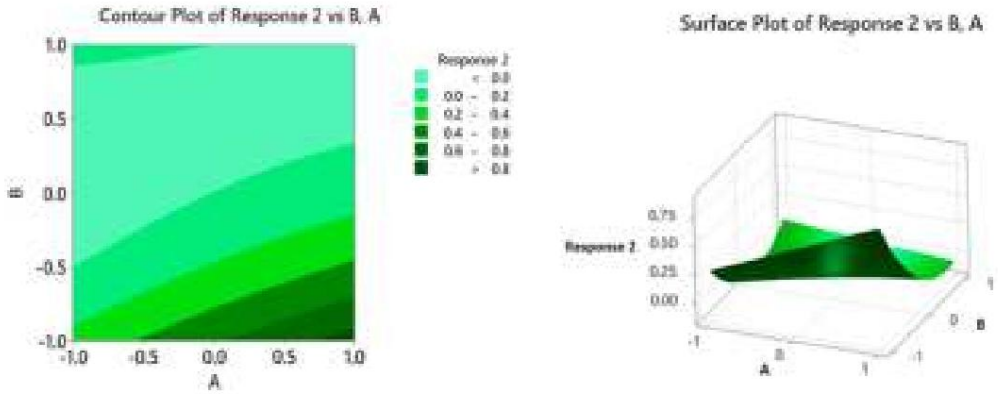


Abbildung 6. Kontur- und Oberflächendiagramme für Antwort 2.

Anschließend wird eine Optimierung durchgeführt, um die lokale Oberflächenreibung zu minimieren und zu maximieren. Koeffizient und Nusselt-Zahl. Der lokale Reibungskoeffizient hängt zusammen mit die Wandschubspannung. Ein niedriger Reibungskoeffizient wird angestrebt, um den Energieverbrauch zu senken in den meisten Anwendungen. Gleichzeitig ist eine hohe Wärmeübertragungsrate, dargestellt durch die lokale Nusselt Nummer, ist für eine bessere Wärmeübertragungsleistung bei Kühl- oder Heizprozessen erwünscht. Die zusammengesetzte Erwünschtheit beurteilt, wie die Konfigurationen der unabhängigen Parameter Optimieren Sie einen bestimmten Satz von Antworten. Die Erwünschtheit wird auf einer Skala von null bis eins gemessen. Ein Wert von Null bedeutet, dass eine oder mehrere Antworten ihre zulässigen Grenzen überschreiten. Ein Wert von eins stellt das optimale Szenario dar. Daher ist in der vorliegenden Untersuchung der Die Optimierung kann durch die Untersuchung der zusammengesetzten Erwünschtheit beobachtet werden.

Tabelle 6 zeigt das Optimierungsergebnis für den lokalen Reibungskoeffizienten und den Nusselt-Der minimale lokale Reibungskoeffizient (Antwort 1) und der maximale lokale Die Nusselt-Zahl (Antwort 2) kann durch Einstellen des Schrumpfungsparameters (A) und Massentransferparameter (B) bei hohen bzw. niedrigen Werten. Mit einer Erwünschtheit von 66% bei $\ddot{y} = \ddot{y}0,8$ und $\ddot{y}0,8 = \ddot{y}0,6$ ist der lokale Reibungskoeffizient bei 1,528780016 minimiert, während die lokale Nusselt-Zahl bei 0,888353037 maximiert ist. Daher ist die niedrigste Größe des Schrumpfungsparameters und des niedrigsten Stoffübergangsparameters optimierten die physikalische Größen, die im Stromflussproblem von Interesse sind. Unterschiedliches Verhalten kann beobachtet werden für andere Steuerparameter und Durchflussbereich.

Machine Translated by Google

Tabelle 6. Optimierung der Antworten.

Lösung	A	B	Antwort 2 Fit	Antwort 1 Fit	Verbundwerkstoff Erwünschtheit
1	1	ÿ1	0,888353037	1.528780016	0,659986551

5. Schlussfolgerungen

Die vorliegende Studie analysiert den rotierenden Scheibenfluss eines hybriden Nanofluids. Die Scheibe schrumpft in radialer Richtung und ist durchlässig, um Ansaugen/Injizieren zu
Der lokale Reibungskoeffizient und die Nusselt-Zahl für dieses Strömungsproblem werden mithilfe des RSM optimiert. Zunächst werden die maßgebenden Gleichungen für das Strömungsproblem, bestehend aus Differentialgleichungen und Randbedingungen, dargestellt und mithilfe des bvp4c-Solvers in MATLAB gelöst. Anschließend wird die Minitab 21-Software verwendet, um das RSM durchzuführen. Die Ergebnisse sind wie folgt zusammengefasst:

1. **Mit zunehmendem Massentransferparameter und der Größe des Schrumpfungsparameters** *(|ÿ|)* **nimmt das Radialgeschwindigkeitsprofil des hybriden Nanofluids in der Nähe der Scheibe ab.**
2. **Die Erhöhung des Massenübertragungsparameters und der Größe des Schrumpfungsparameters verbessert die Profile der Tangentialgeschwindigkeit, der Axialgeschwindigkeit und der Temperatur.**
3. **Der lokale Reibungskoeffizient und die Nusselt-Zahl nehmen mit zunehmendem Massentransferparameter ab. Der Injektionsfall weist höhere Werte dieser physikalischen Größen auf als der Saugfall.**
4. **Die Erhöhung der Größe des Schrumpfparameters verbessert die lokale Haut Reibungskoeffizient und verringert die lokale Nusselt-Zahl.**
5. **Basierend auf dem RSM, niedrige Werte von Re1/2** r Cf werden bei höheren und mittleren **Schrumpfparametern** *(ÿ)* **und Massentransferparametern erzeugt .** Gleichzeitig wird der höchste **Wert von Re1/2** r Cf **bei niedrigen Werten dieser unabhängigen Parameter beoba**
6. **Hohe Werte von Reÿ1/2** r Nur **treten bei niedrigeren Werten des Stoffübergangsparameters auf und bedeuten höhere Niveaus des Schrumpfungsparameters.**
   Die lokale Nusselt-Zahl wird durch die Erhöhung des Schrumpfungsparameters auf dem moderaten Niveau des Stoffübergangsparameters nicht signifikant beeinflusst.
7. **Bei einer Erwünschtheit von 66 % wird der lokale Reibungskoeffizient bei 1,528780016 minimiert, während die lokale Nusselt-Zahl bei 0,888353037 maximiert wird, wenn** *ÿ* = **ÿ0,8 und** S = **ÿ0,6.**

Die vorliegende Studie kann auf andere Arten von hybriden Nanofluiden ausgeweitet werden, wie etwa nicht-Newtonsche hybride Nanofluide, hybride Nanofluide aus Kohlenstoffnanoröhren und ternäre hybride Nanofluide. Darüber hinaus kann die komplexe nichtlineare Interaktion verschiedener Kontrollparameter in diesem Strömungsproblem mithilfe einer hochentwickelten maschinellen Lerntechnik, dem sogenannten künstlichen neuronalen Netzwerk (K

Ergänzende Materialien: Die folgenden unterstützenden Informationen können unter folgender Adresse heruntergeladen werden: https://www.mdpi.com/article/10.3390/computation12070141/s1.

Beiträge der Autoren: Konzeptualisierung, IP; Methodik, IP und RIY; Validierung, IP und NMA; formale Analyse, RIY; Schreiben – Vorbereitung des Originalentwurfs, RIY und IP; Schreiben – Überprüfung und Bearbeitung, NMA und IP; Überwachung, NMA, FMA und SSPMI; Mittelbeschaffung, NMA
Alle Autoren haben die veröffentlichte Version des Manuskripts gelesen und stimmen ihr zu.

Finanzierung: Diese Forschung wurde von der Universiti Putra Malaysia finanziert, Zuschussnummer GP-GPB 9711400.

Datenverfügbarkeitserklärung: Die in der Studie vorgestellten Originalbeiträge sind im Artikel/den Zusatzmaterialien enthalten, weitere Anfragen können an den/die entsprechenden Autor(en) gerichtet werden.

Interessenkonflikte: Die Autoren erklären, dass keine Interessenkonflikte bestehen. Die Geldgeber hatten keinen Einfluss auf die Gestaltung der Studie, auf die Erhebung, Analyse oder Interpretation der Daten, auf das Verfassen des Manuskripts oder auf die Entscheidung, die Ergebnisse zu veröffentlichen.

Machine Translated by Google

Verweise

1. **Gamachu, D.; Ibrahim, W. Gemischte Konvektionsströmung eines viskoelastischen Ag-Al2O3/Wasser- Hybrid-Nanofluids an einer rotierenden Scheibe vorbei.** Scr. **2021,** 96, **125205.** [CrossRef]
2. **Kármán, TV Über laminare und turbulente Reibung.** ZAMM J. Appl. Mathe. Mech. Z. Angew. Mathe. Mech. **1921, 1, 233–252.** [Querverweis]
3. **Ayano, MS; Otegbeye, O.; Mathunjwa, JS Numerische Simulation des Nanofluidflusses aufgrund einer dehnbaren rotierenden Scheibe.** Theor. Appl. Mech. **2023,** 50, **55–72.** [CrossRef]
4. **Sharma, K.; Vijay, N.; Bhardwaj, D.; Jindal, R. Wasserfluss, der Fe3O4- und Mn–ZnFe2O4 -Nanopartikel über eine rotierende Scheibe transportiert: Bedeutung von Thermophorese und Brownscher Bewegung.** J. Magn. Magn. Mater. **2023,** 574, **170710.** [CrossRef]
5. **Puneeth, V.; Aly, EH; Pop, I. Nanofluid, das über eine rotierende, sich ausdehnende und durchlässige Scheibe fließt: Ein instationäres Modell.** B **2023,** 37, **23502491.** [CrossRef]
6. **Rashid, A.; Dawar, A.; Ayaz, M.; Islam, S.; Galal, AM; Gul, H. Homotope Lösung des chemisch reaktiven magnetohydrodynamischen Flusses eines hybriden Nanofluids über einer rotierenden Scheibe mit Brownscher Bewegung und Thermophorese-Effekten.** ZAMM Z. An Math. Mech. **2023,** 103, **e202200262.** [CrossRef]
7. **Alkuhayli, NAM Wärmeübertragungsanalyse eines hybriden Nanofluidflusses auf einer rotierenden Scheibe unter Berücksichtigung thermischer Strahlungseffek** Case Stud. Therm. Eng. **2023,** 49, **103131.** [CrossRef]
8. **Kumar, P.; Poonia, H.; Areekara, S.; Sabu, AS; Mathew, A.; Ali, L. Bedeutung unregelmäßiger Wärmequellen und Arrhenius-Energie für den elektromagnetohydrodynamischen hybriden Nanofluidfluss über eine rotierende dehnbare Scheibe mit nichtlinearer Strahlung.** Numerisch Transf. A Appl. **2024,** 85, **1866–1888.** [CrossRef]
9. **Kulkarni, M. Gemischter konvektiver magnetisierter GO-MoS2/H2O- Hybrid-Nanofluidfluss um eine durchlässige rotierende Scheibe.** Asien-Pazifik. J. Chem. Eng. **2023,** 18, **e2923.** [CrossRef]
10. **Lone, SA; Anwar, S.; Raizah, Z.; Almusawa, MY; Saeed, A. Eine theoretische Untersuchung des MHD-wasserbasierten hybriden Nanofluidflusses über eine konvektiv beheizte rotierende Scheibenoberfläche mit Geschwindigkeitsschlupf und Null-Massenstrombedingun** J. Plus **2023,** 138, **1–14.** [CrossRef]
11. **Khashi'ie, NS; Waini, I.; Zainal, NA; Hamzah, K.; Arifin, NM; Pop, I. Mehrfachlösungen und Stabilitätsanalyse des magnetischen hybriden Nanofluidflusses über eine rotierende Scheibe mit Wärmeerzeugung.** J. Adv. Res. Fluid. Mech. Therm. Sci. **2023,** 102, **59–72.** [Querverweis]
12. **Vijay, N.; Sharma, K. Magnetohydrodynamischer hybrider Nanofluidfluss über eine verzögerte rotierende Scheibe mit Soret und Dufour Effekte.** Multidiszip. Modell. Mater. Struct. **2023,** 19, **253–276.** [CrossRef]
13. **Abu Bakar, S.; Pop, I.; Md Arifin, N. Unstationäre Strömung von hybridem Nanofluid über eine durchlässige, schrumpfende, geneigte rotierende Scheibe mit Strahlungs- und Geschwindigkeitsschlupfeffekten.** Neural Comput. Appl. **2024,** 36, **11525–11544.** [CrossRef]
14. **Ali, F.; Zaib, A.; Khan, MI; Alzahrani, F.; Eldin, SM Irreversibilitätsanalyse im Stagnationspunktfluss von Tri-Hybrid-Nanofluid über einer rotierenden Scheibe; Anwendung kinetischer Energie.** J. Indian. Chem. Soc. **2023,** 100, **100873.** [CrossRef]
15. **Singh, SP; Kumar, M.; Yaseen, M.; Rawat, SK Ternäres Hybrid-Nanofluid (TiO2ÿSiO2ÿMoS2/Kerosinöl) fließt über eine rotierende Scheibe mit quadratischer Wärmestrahlung und Cattaneo-Christov-Modell.** J. Cent. S. Univ. **2023,** 30, **1262–1278.** [CrossRef]
16. **Patgiri, B.; Paul, A. Untersuchung des viskoelastischen Ag+Cu+Fe3O4+Al2O3/Kerosinöl -Tetra-Hybrid-Nanofluidflusses über eine Dehnbare rotierende Scheibe mit exponentiell variierender Viskosität.** J. Taibah Univ. Sci. **2024,** 18, **2336327.**
17. **Ali, I.; Gul, T.; Khan, A. Instationäre hydromagnetische Strömung über einer geneigten rotierenden Scheibe durch neuronale Netzwerktechnik.** Mathematik **2023,** 11, **1893.** [CrossRef]
18. **Varun Kumar, RS; Kumar, RN; Ben Ahmed, S.; Madhu, J.; Verma, A.; Punith Gowda, RJ Unstationäre Strömung eines ternären Nanofluids über eine langsam rotierende Scheibe, die gleichmäßiger Saugwirkung und einem rückwärts propagierten neuronalen Netzwerk ausgesetzt ist.** Numerische Wärmeübertragung. Teil B Grun **2023, 1–21.** [CrossRef]
19. **Mehmood, T.; Ramzan, M.; Howari, F.; Kadry, S.; Chu, YM Anwendung der Response Surface Methodology auf den Nanofluidfluss über eine rotierende Scheibe mit autokatalytischer chemischer Reaktion und Optimierung der Entropieerzeugung.** Sci. [Querverweis]
20. **Shafiq, A.; Sindhu, TN; Al-Mdallal, QM Eine Sensitivitätsstudie zur Bedeutung von Kohlenstoffnanoröhren bei der Darcy-Forchheimer-Strömung in Richtung einer rotierenden Scheibe mithilfe der Response Surface Methodology.** Sci. Rep. **2021,** 11, **8812.** [CrossRef]
21. **Mathew, A.; Areekara, S.; Sabu, AS Bedeutung von Magnetfeld- und Schichtungseffekten auf den biokonvektiven Stagnationspunktfluss von Ferro-Nanofluid über eine rotierende dehnbare Scheibe: Vier-Faktor-Response-Oberflächenmethode.** J. Indian Chem. Soc. **2022,** 99, **100615.** [CrossRef]
22. **Hussain, S.; Ali, A.; Rasheed, K.; Pasha, AA; Algarni, S.; Alqahtani, T.; Irshad, K. Anwendung der Response Surface Methodology zur Optimierung des MHD-Nanofluidflusses über einer rotierenden Scheibe mit Wärmestrahlung und Joule-Heizung.** Case Stud. Therm. Eng. **2023,** 52, **103715.** [CrossRef]
23. **Khashi'ie, NS; Waini, I.; Hamzah, KB; Mukhtar, MF; Kasim, ARM; Arifin, NM; Pop, I. Numerische Lösung und statistische Analyse der instationären hybriden Ferrofluidströmung mit Wärmeerzeugung unter Einfluss einer rotierenden Scheibe.** ZAMM J. Appl. Angew. Math. Mech. **2023,** 103, **e202200384.** [CrossRef]
24. **Siddiqui, FR; Tso, CY; Chan, KC; Fu, SC; Chao, CYH Über den Kompromiss zwischen Dispersionsstabilität und Wärmetransport von Cu-Al2O3-Hybrid-Nanofluid bei verschiedenen Mischungsverhältnissen.** Int. J. Heat Mass Transf. **2019,** 132, **1200–1216.** [CrossRef]

Machine Translated by Google

25. Takabi, B.; Gheitaghy, AM; Tazraei, P. Hybride wasserbasierte Suspension von Al2O3 und Cu-Nanopartikeln auf laminarer Konvektion Wirksamkeit. J. Thermophys. Heat Trans. **2016,** 30, **523–532.** [CrossRef]

26. Oztop, HF; Abu-Nada, E. Numerische Untersuchung der natürlichen Konvektion in teilweise beheizten rechteckigen Räumen gefüllt mit Nanofluide. Int. J. Heat Fluid Flow **2008,** 29, **1326–1336.** [CrossRef]

27. Suresh, S.; Venkitaraj, KP; Selvakumar, P.; Chandrasekar, M. Synthese von Al2O3 -Cu/Wasser-Hybrid-Nanofluiden unter Verwendung der Zwei-Schritt- Methode und ihre thermophysikalischen Eigenschaften. Colloids Surf. A Physicochem. Eng. Asp. **2011,** 388, **41–48.** [CrossRef]

28. Turkyilmazoglu, M. Nanofluidströmung und Wärmeübertragung durch eine rotierende Scheibe. Comput. Fluids **2014,** 94, **139–146.** [CrossRef]

29. Yin, C.; Zheng, L.; Zhang, C.; Zhang, X. Strömung und Wärmeübertragung von Nanofluiden über eine rotierende Scheibe mit gleichmäßiger Dehnungsrate in radialer Richtung. Propuls. Power Res. **2017, 6, 25–30.** [CrossRef]

30. Box, GEP; Wilson, KB Über das experimentelle Erreichen optimaler Bedingungen. JR Stat. Soc. Ser. B (Methodol.) **1951,** 13, **1–38.** [Querverweis]

31. Mahanthesh, B.; Thriveni, K.; Rana, P.; Muhammad, T. Strahlungswärmeübertragung von Nanomaterial auf einem konvektiv beheizten Rundrohr mit Aktivierungsenergie und kinematischen Effekten der Nanopartikelaggregation. Int. Commun. Wärmemassenüber **2021,** 127, **105568.** [CrossRef]

32. Bhattacharya, S. Zentrales Verbunddesign für die Response Surface Methodik und ihre Anwendung in der Pharmazie. In Antwort Oberflächenmethodik in den Ingenieurwissenschaften; **IntechOpen: London, Großbritannien, 2021.**

33. Sahoo, P.; Barman, TK ANN Modellierung fraktaler Dimensionen in der maschinellen Bearbeitung. In Mechatronik und Fertigungstechnik; **Woodhead Publishing: Cambridge, Großbritannien, 2012.**

34. Rashidi, MM; Abelman, S.; Mehr, NF Entropieerzeugung in stationärer MHD-Strömung aufgrund einer rotierenden porösen Scheibe in einer Nanoflüssigkeit. Int. J. Heat Mass Transf. **2013,** 62, **515–525.** [CrossRef]

35. Alhadri, M.; Raza, J.; Yashkun, U.; Lund, LA; Maatki, C.; Khan, SU; Kolsi, L. Response Surface Methodology (RSM) und künstliche neuronale Netzwerk-Simulationen (ANN) für thermische hybride Nanofluidströmungen mit Darcy-Forchheimer-Effekten. J. Indian Chem. Soc. **2022,** 99, **100607.** [CrossRef]

Haftungsausschluss/Anmerkung des Herausgebers: Die in allen Veröffentlichungen enthaltenen Aussagen, Meinungen und Daten sind ausschließlich die der einzelnen Autoren und Mitwirkenden und nicht die von MDPI und/oder den Herausgebern. MDPI und/oder die Herausgeber lehnen jegliche Verantwortung für Personen- oder Sachschäden ab, die aus den im Inhalt erwähnten Ideen, Methoden, Anweisungen oder Produkten resultieren.

Machine Translated by Google

Berechnung

MDPI

Rezension

Numerische Strömungsdynamik-basierte Systemtechnik für die erdgebundene Astronomie

Konstantinos Vogiatzis 1,2,*, George Angeli [1], Gelys Trancho [2] und Rod Conan [1]

1 Giant Magellan Telescope Organization, Pasadena, CA 91101, USA; gyangeli@gmail.com (GA); rconan@gmto.org (RC)
2 TMT International Observatory, Pasadena, CA 91124, USA; gtrancho@tmt.org * Korrespondenz: konvoyages@gmail.com

Zusammenfassung: In diesem Artikel werden die neuesten Techniken der aerothermischen Modellierung vorgestellt, um die aktuellen Herausforderungen bei der Observatoriumskonstruktion zu bewältigen, insbesondere die der nächsten Generation extrem großer Teleskope (ELTs) wie das europäische ELT, das Thirty Meter Telescope International Observatory (TIO) und das Giant Magellan Telescope (GMT). Es werden die verschiedenen aerothermischen Simulationstechniken , die Synergie zwischen Modellierungsergebnissen und der integrierenden Modellierung des Observatoriums sowie aktuelle Anwendungen untersucht. Die vorgestellte Suite der aerothermischen Modellierung umfasst thermische Netzwerkmodelle, Modelle der numerischen Strömungsmechanik (CFD), thermische Festkörper- und Deformationsmodelle sowie konjugierte Wärmeübertragungsmodelle (gleichzeitige Fluid-/Festkörpersimulationen). Die aerothermische Suite ist Teil des Gesamtrahmens für die integrierte Modell Die Ergebnisse des IM-Frameworks, nominell Bildqualitätsmetriken (IQ) für einen bestimmten Teleskopzustand, werden in Form eines mehrdimensionalen Arrays in ein stochastisches Framework eingespeist, das die Bandbreite der beeinflussenden Betriebsparameter abdeckt und so eine statistische Darstellung der Leistung des Observatoriums liefert . Die Anwendungen des Frameworks reichen von der Standortauswahl, der Charakterisierung der Bodenschicht und der Standortentwicklung bis hin zur aktuellen besten Schätzung und Optimierung der Leistung des Observatoriums, dem Design aktiver Wärmeregelung, der Strukturanalyse und einer Reihe von Kosten-Leistungs-Vergleichsstudien. Abschließend befasst sich dieses Dokument mit geplanten Verbesserungen, der Entwicklung neuer Ideen, der Bewältigung neuer Herausforderungen und wie dies alles mit der Initiative „Computational

Schlüsselwörter: numerische Strömungsmechanik, aerothermische Modellierung, Systemtechnik, erdgebundene Teleskope

check for updates

Zitat: Vogiatzis, K.; Angeli, G.; Trancho, G.; Conan, R. Computational Fluid Dynamics-Based Systems Engineering for Ground-Based Astronomy. Computation **2024,** 12, **143. https://doi.org/10.3390/ calculation12070143**

Wissenschaftlicher Redakteur: Dimitrios Koubogiannis

Erhalten: 10. Juni 2024
Überarbeitet: 29. Juni 2024
Akzeptiert: 3. Juli 2024
Veröffentlicht: 11. Juli 2024

Copyright: © 2024 bei den Autoren. Lizenznehmer MDPI, Basel, Schweiz.

Dieser Artikel ist ein Open Access-Artikel vertrieben unter den Bedingungen und Bedingungen der Creative Commons Namensnennungslizenz (CC BY) (https:// creativecommons.org/licenses/by/ 4.0/).

1. Einleitung

Ein erheblicher Anteil (etwa ein Drittel) der gesamten Bildfehler erdgebundener optischer Observatorien hat aerothermische Ursachen, die meisten davon sind auf thermisches Seeing (~80 %), Windzittern und thermische Verformungen der Teleskopstruktur und Optik zurückzuführen. Diese Fehler sind aufgrund ihrer zufälligen Natur auch mit der größten Unsicherheit behaftet. Im Laufe der Jahre wurden verschiedene empirische aerodynamische und thermische Management-Design- und Betriebsstrategien entwickelt und implementiert. In den letzten zwei Jahrzehnten erfolgte die Optimierung der Konfiguration und des Betriebs dieser Werkzeuge jedoch durch die Modellierung der Wechselwirkung zwischen Berg und Observatoriu

In diesem Artikel stellen wir die neuesten Techniken vor, die bei der aerothermischen Modellierung eingesetzt werden, um die aktuellen Herausforderungen bei der Observatoriumskonstruktion anzugehen, insbesondere die der nächsten Generation von ELTs (extrem großen Teleskopen). Dies ist zufällig auch das Akronym des ersten Teleskops, das derzeit in Chile von der Europäischen Südsternwarte (ESO) gebaut wird und einen Hauptspiegeldurchmesser von ~39 m hat [1]. Um Verwirrung zu vermeiden, wird es oft E-ELT (European ELT oder ESO ELT) genannt. Auf der anderen Seite des Atlantiks gibt es zwei solcher Projekte, das Giant Magellan Telescope (GMT) [2] und das Thirty Meter Telescope International Observato

Machine Translated by Google

Die für die südliche bzw. nördliche Hemisphäre geplanten Missionen können vielfältige Forschungsmöglichkeiten bieten und entscheidende Durchbrüche in nahezu allen Bereichen der Astrophysik ermöglichen, von unserem Sonnensystem bis zu den entferntesten Sternen und Galaxien, von der Grundlagenphysik und Kosmologie bis hin zur Suche nach Hinweisen auf Leben auf Planete

Aktuelle Anwendungen der aerothermischen Modellierung reichen von der Standortwahl, Bodenschichtcharakterisierung und Standortentwicklung bis hin zur Optimierung des aerothermischen Observatoriumsdesigns, dem Design der Wärmeregelung, Strukturanalysen und einer Reihe von Kosten-Leistungs- Studien. Es wird ein Überblick über die von TIO und GMT verwendeten aerothermischen Modelltypen gegeben. Diese Modelle sind auf alle optischen Observatorien erweiterbar, einschließlich Solarobservatorien, und Aspekte davon sogar auf Radioteleskope. Anschließend folgt die Synergie zwischen Modellierungsergebnissen (wie Oberflächendruck, integrierte Kräfte, Momente, Temperaturfelder und Wärmeübertragungskoeffizienten) und der integrierenden Modellierung (IM) von Observatorien. Abschließend werden geplante Verbesserungen, die Entwicklung neuer Ideen, die Bewältigung neuer Herausforderungen und die Verknüpfung mit der „Compu

2. Integrierte Modellierungssynergie

2.1. Leistungsmesswerte und Anforderungsvalidierung **Die**

ELT-Projekte haben wichtige Leistungsparameter (Key Performance Parameters, KPPs) zur Messung, Verfolgung und Verwaltung der Entwicklung der erwarteten Observatoriumsleistung während der Konstruktion und Inbetriebnahme festgelegt.

Die allgemeinen Grundlagendokumente beginnen mit dem Operations Requirements Document (für TIO) oder Concept of Operations (für GMT) und dem Science Requirements Document (SRD) (alle Level 1), die aus vorgegebenen wissenschaftlichen Fällen abgeleitet werden. Die SRD-Anforderungen werden dann an das Observatory Requirements Document (ORD; Level 2) weitergeleitet, das die Antwort des Projekts auf das SRD darstellt und technische Anforderungen enthält, die die Grundlage für das Bauprojekt bilden. Die Anforderungen im ORD werden in technischen Einheiten angegeben, die während der Phase der Montage, Integration, Überprüfung und Inbetriebnahme (AIVC) des Projekts gemessen und überprüft werden können.

Die KPPs sind im ORD definiert und stellen die technischen Anforderungen dar, die bei Nichterfüllung die größten Auswirkungen auf die Wissenschaft hätten. Viele der KPPs der Stufe 2 sind mit mehreren wissenschaftlichen Anforderungen verknüpft. Jede Anforderung der Stufe 2 hat außerdem ein zugehöriges Leistungsbudget im Observatory Architecture Document (OAD) der Stufe 3. Abbildung 1 zeigt die aktuelle CBE-Analyse (Best Estimate): Zuweisungen aus den Fehlerbudgets , einschließlich der KPP-Budgets, werden in technischen Einheiten in die **Subsystem-Anforderungsdokumente der Ebene 4 weitergeleitet .**



Abbildung 1. Compliance-Zyklus und CBE-Analyse.

2.2. Integriertes Modellierungsframework

Das integrierte Modell ist ein einzelnes Computerframework, das Teilmengen spezialisierter Modelle kombiniert, die detaillierte numerische Darstellungen spezifischer Eigenschaften und Funktionen eines ELT sind [4,5]. Es ist eine Zusammensetzung aus mehreren physikalischen Modellen, zu denen auch die aerothermischen Modelle gehören, und einem verteilten Steuerungssystem, das die von den verschiedenen Modellen emulierten Sensoren und Aktoren miteinander verbindet. Eine IM-Instanz ist eine Zeitbereichssimulation, die mit einem Satz von Parametern konf

Machine Translated by Google

Modelle von Umweltstörungen liefern externe Randbedingungen für die physikalischen Modelle. Beispiele für externe Störungen sind Atmosphäre und lokale Sicht, Windkräfte, Wärmequellen usw. Umweltstörungen sind von Natur aus stochastisch, und für jede Modellinstanz wird ein zufälliges Vorkommen der Störungen gezogen. Daraus folgt, dass auch die optische Leistung stochastisch ist, und die Leistung eines Teleskopdesigns wird anhand der statistischen Momente der optischen Leistungsmetrik (in diesem Fall KPP) ermittelt. Das Ziel des IM besteht daher darin, die Fehlerbudgetterme der Stufe 3 und die KPPs der

Jede Simulation des IM erzeugt eine Ausgabe (KPP-Wert), die für einen bestimmten Satz von Störwerten gültig ist, den sogenannten Systemzustand. Jede Störung (oder jeder Einflussparameter) wird mit mehreren Werten diskretisiert, die den erwarteten Bereich abdecken. Um den gesamten Betriebsbereich abzudecken, muss die Simulation für eine andere Kombination von Störwerten wiederholt werden. Auf diese Weise wird ein mehrdimensionales Array von KPP-Werten oder Nachschlagetabellen (LUTs) erzeugt.

2.3. Stochastischer Rahmen

Das Observatoriumssystem kann als stochastischer Prozess betrachtet werden; sein Verhalten ist nichtdeterministisch, da der spätere Zustand des Systems sowohl durch vorhersehbare Aktionen als auch durch Zufallselemente bestimmt wird. Folglich ist jede Metrik, die die Systemleistung beschreibt, eine statistische Variable. Während einige Leistungsaspekte anhand einer Reihe von Eingaben deterministisch vorhergesagt werden können, sind diese Eingaben selbst normalerweise statistischer Natur [6,7].

Eine Vielzahl von Unvollkommenheiten und externen Störungen sind tatsächlich zufällig im Laufe der Zeit oder durch Realisierungen. Beispielsweise können die optischen Auswirkungen thermischer Verformungen optischer Elemente und ihrer Trägerstruktur deterministisch berechnet werden. Die Eingaben für die Berechnung thermischer Verformungen sind zufällige Umgebungs- und Betriebsparameter. Die übliche Reaktion auf diese Komplexität besteht darin, intuitiv „repräsentative“ und „Worst-Case“-Szenarien zu definieren und dann die „durchschnittliche“ und „grenzwertige“ Leistung zu berechnen.

Um einen besseren Einblick zu erhalten, haben wir einen stochastischen Rahmen zur Definition und Bewertung der Leistung entwickelt. Er basiert auf Daten aus den Tests der Projekte an den Observatorienstandorten Maunakea und Las Campanas sowie auf der Geschichte der Betriebsabläufe der Observatorien Gemini North und Magellan [8,9]. Die Leistung eines ELT wird anhand eines realen Beobachtungsprogramms ausgedrückt und bewertet, das in derselben Umgebung durchgeführt wird, in der es gebaut werden soll.

Es ist nicht praktikabel, dass ein einzelnes, einheitliches Modell alle für **die Leistung eines ELT relevanten Zeiträume von Millisekunden bis Jahren durchläuft .** Daher besteht unser Ansatz darin , **physikalische Prozesse in unterschiedliche mathematische Modelle aufzuteilen, die einigermaßen unabhängig voneinander untersucht werden können. Unter Verwendung der Point Source Sensitivity-Normalized (PSSn)-Metrik [10–12] als Beispiel-KPP können einzelne Ergebnisse zu Schätzungen auf Systemebene kombiniert werden. Es gibt Ausnahmen von diesem Ansatz. In einigen Fällen überlappen sich die Zeiträume gekoppelter Prozesse ausreichend, um die Entwicklung integrierter Modelle zu rechtfertigen. Ein besonderer Fall betrifft Wind, Teleskopstrukturdynamik und Steuerungsdynamik. Bei ELTs wird dies gründlich untersucht, einschließlich der Windstöße des Hauptspiegels und der engen Interaktion zwischen Steuerung und Struktur. In ähnlicher Weise wird Bildzittern aufgrund von Teleskopvibrationen direkt in adaptiven Optiksimulationen berücksichtigt. Über längere Zeiträume sind feste (Glas und Stahl) und aerothermische Prozesse eng gekoppelt. Die Berücksichtigung dieser Kopplung erfordert Iterationen zwischen den CFD- und FEA-Modellen oder die Entwicklung hochauflösender konjugierter Wärmeübertragungsmodelle.**

Das Wesentliche des Leistungsrahmens ist in Abbildung 2 dargestellt. Gruppe A (rot) bezeichnet die verfügbaren Eingaben. Gruppe B (blau) ist das, was durch Design und Betrieb gesteuert werden kann. Gruppe C (braun) zeigt die Ausgabe des entwickelten integrierten Modellierungsrahmens mit den vorab berechneten Aberrationen in LUT-Form (die Box Optik/Steuerung/Dynamik/CFD/FEA ist tatsächlich der integrierte Modellierungsrahmen). Schließlich entsprechen die Funktionen in Gruppe D (grün) der mathematischen/statistischen Verarbeitung und sind tatsächlich der Kern der Zeitbereichssimulation .

Machine Translated by Google

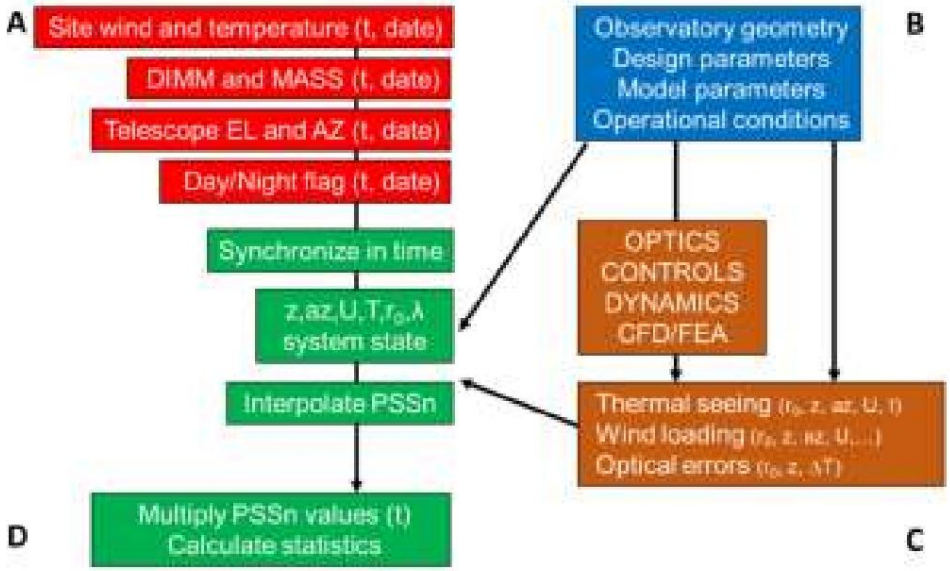


Abbildung 2. Flussdiagramm des stochastischen Rahmens. (A) Umwelteingaben, (B) kontrollierte Parameter, (C) integrierte Modellierungsausgaben, (D) Datenfusion und Statistik.

Die Vorteile dieses Frameworks sind nachfolgend zusammengefasst:

• Ermöglicht die statistische Darstellung von Fehlern, die durch Umgebungs- und Betriebsbedingungen zufällig verteilt sind. • Ermöglicht die statistische Darstellung von Fehlern, die von vorherigen zeitlichen Zuständen abhängen. des Systems;

• Ermöglicht die kombinierte Darstellung von Fehlern, die korreliert sind und nicht unabhängig voneinander bewertet werden können;

• Ermöglicht die kombinierte Darstellung von Fehlern, die unterschiedliche zeitliche und räumliche Maßstäbe aufweisen; • Bietet Wahrscheinlichkeitsverteilungen von Fehlern, um die Bandbreite der erwarteten Leistung unter verschiedenen Sichtbedingungen anzugeben , ein Wissen, das insbesondere für die Warteschlangenbeoba

• Ermöglicht die Untersuchung des Verhaltens von Beobachtungsstationen an verschiedenen Standorten; • Ermöglicht die Optimierung bestimmter Betriebsstrategien, wie z. B. Entlüftung, Tageslicht Wärmebehandlung und Häufigkeit der Kalibrierungsmessung;

• Enthüllt die wahre Auswirkung einer bestimmten Designentscheidung auf die erwartete Leistung des Observatoriums und die nachfolgende wissenschaftliche Produktivität und ermöglicht so kosteneffiziente Kom

3. Synergie der aerothermischen

Modellierung Das Wärmemanagement ist der Schlüssel zur Kontrolle der Bildqualität des Observatoriums. Um thermische Effekte zu minimieren, verwenden ELTs tagsüber Klimaanlagen und nachts passive Belüftung und Wärmeabgabekontrolle in verschiedenen Formen (Subsystemkühlung, geeignete Platzierung der Wärmequellen, Beschichtungen mit gewünschtem Emissionsgrad). Emissionsgrad und Reflexionsgrad der Gehäuseoberfläche werden optimiert, um eine Überhitzung tagsüber und ein

Es ist ratsam, den Unterschied zwischen der Temperatur des Teleskops (Struktur und Optik) und der durchschnittlichen Nachttemperatur zu minimieren. Insbesondere für die Optik ist dies aufgrund ihrer Zeitkonstante wichtig, um thermische Verformungen und Spiegelsicht zu verringern. Darüber hinaus werden räumliche Temperaturgradienten minimiert, da sie maßgeblich zur Fehlausrichtung des Teleskops beitragen.

Bei Sonnenaufgang schließt sich das Gehäuse und die darin eingeschlossene Luft beginnt sich zu erwärmen, da tagsüber die Wärme der im Gehäuse betriebenen Geräte freigesetzt wird, die Sonneneinstrahlung und das Eindringen von Außenluft. Luftaufbereitungsanlagen (AHUs) sind an Kühler/Trockenkühler im Anlagenbereich angeschlossen. Die AHU-Düsen versorgen das Gehäuseinnere an mehreren Stellen mit Luft, während die Rückläufe in der Nähe des Beobachtungsbodens liegen. Ziel ist es, vertikale Temperaturg

Machine Translated by Google

Umgebung auf die erwartete Nachttemperatur, indem die gesamte intern erzeugte und extern einwirkende Wärme entfernt wird.

Nachts wird der Strahlungsverlust in den Himmel durch die Gehäuseöffnung durch konvektive Wärmeübertragung durch die Gehäuseöffnung und die Belüftungsöffnungen sowie durch die in die Innenluft abgegebene Wärme ausgeglichen. Die ungleichmäßige räumliche Verteilung der abgegebenen Wärme kann sich besonders nachteilig auf die Sicht in Kuppel und Spiegel auswirken. Dieser Effekt wird gemildert, indem das Gehäuse durch die Belüftungsöffnungen mit Umgebungsluft gespült wird . Bei höheren Windgeschwindigkeiten muss die Spülung des Gehäuses jedoch eingeschränkt werden, um Windstöße auf die Teleskopstruktur und die Spiegel zu begrenzen. Die Belüftungsstrategie wird optimiert, um die Effekte der thermischen Sicht und der Windstöße auszugleichen. Als Grundlinie wird erwartet, dass die Gehäusebelüftungsöffnungen bei niedrigen Außenwindgeschwindigkeiten vollständig geöffnet, bei hohen Außenwindgeschwindigkeiten vollständig geschlossen und b

Die vom Observatorium abgeführte Abwärme wird in Abgasfahnen konzentriert, die vom entferntesten Punkt des Gebäudes abgelassen werden, der sich überwiegend in Windrichtung vom Teleskop befindet. Während der Nacht ist die maximale Temperaturabweichung der Fahne von der Umgebungstemperatur begrenzt, um sicherzustellen, dass etwaige Auswirkungen auf die Sicht in dieser Richtung vernachlässigbar sind.

Die zur Simulation der oben genannten physikalischen Prozesse verwendeten Modelle werden je nach Umfang, geometrischer Genauigkeit und Bearbeitungszeit in drei Hauptkategorien eingeteilt: • Thermische Netzwerkmodelle; • CFD-Modelle; • Konjugierte Wärmeübertragungsmodelle.

Zur Entwicklung der Modellierungswerkzeuge werden bekannte, handelsübliche Softwarepakete für allgemeine Zwecke eingesetzt . STAR-CCM+ (2210 oder höher) **[13] wird zur Entwicklung dreidimensionaler repräsentativer Observatoriums- und Subsystemmodelle eingesetzt, während eindimensionale thermische Netzwerkmodelle, Performance-Frameworks und Postprozessoren hauptsächlich in MATLAB (2020a oder höher) [14] und Python (3.7 oder höher) entwickelt werden.**

3.1. Thermische Netzwerkmodelle

Dabei handelt es sich um konzentrierte oder eindimensionale transiente thermische Modelle. Sie sind rechnerisch kostengünstig und haben kurze Durchlaufzeiten. Ihr Hauptzweck besteht in der Schätzung von Oberflächentemperaturen, beispielsweise der Gehäusehaut und anderer Komponenten.
Diese Temperaturen werden zur Unterstützung des Entwurfs, zur Validierung von Anforderungen und als Randbedingungen für hochpräzise Modelle verwendet. Da es sich um thermische Netzwerkmodelle handelt, können sie Luft als weiteren Knoten akzeptieren, sodass sie auch das mittlere Temperaturverhalten eines begrenzten Luftvolumens melden können. Der wahre Nutzen dieser Modelle liegt in der Tatsache, dass die Umgebungs- und Betriebsbedingungen sowie die virtuelle Simulationszeit mehrere Jahre umfassen, was die statistische Analyse von Temperaturunterschieden ermöglicht.

3.2. Numerische Strömungsmodelle

Dabei handelt es sich um hochpräzise, dreidimensionale stationäre oder transiente Modelle. Sie sind rechenintensiv und haben lange Durchlaufzeiten. Wie der Name schon sagt, besteht ihr Zweck darin, die Geschwindigkeit, Temperatur und das Druckverhalten von Flüssigkeiten (Luft) in Raum und Zeit an den **ELT-Standorten, um und in den Gehäusen und in den Komponenten abzuschätzen .**

Stationäre Simulationen über der Topographie liefern Schätzungen der Bodenschicht (GL) für Studien zur Standortcharakterisierung. Instationäre Simulationen über den ganzen Tag innerhalb des Gehäuses liefern die HVAC-Leistung. Schließlich liefern instationäre Simulationen bei Nacht die Leistung eines aerothermischen Observatoriums durch Kuppelsichtung und Teleskopwindbelastung. Die Simulationszeiten für Letzteres liegen im Minutenbereich.

3.3. Festkörper- und konjugierte Wärmeübertragungsmodelle

Dabei handelt es sich um dreidimensionale Übergangsmodelle. Im Allgemeinen sind sie rechnerisch kostengünstig und haben kurze Durchlaufzeiten, mit einigen Ausnahmen. Ihr Zweck besteht nicht nur darin, das thermische Trägheitsverhalten von Komponenten im Zeitverlauf abzuschätzen, sondern auch die räumliche Temperaturvariabilität und die daraus resultierende Verformung. In Fällen, in denen die Auswirkung ei

Machine Translated by Google

Wenn ein begrenztes Luftvolumen erforderlich ist oder die Variabilität der konvektiven Wärmeübertragung wichtig ist, werden Festkörper-/Flüssigkeitswechselwirkungsmodelle (konjugierte Modelle) entwickelt. Die Simulationszeit für diese Modelle beträgt normalerweise einige Tageszyklen.

3.4. Nachbearbeitungstools **Es**

gibt auch eine Reihe von Nachbearbeitungstools, um die verschiedenen Zwischenausgaben zu verarbeiten und Ergebnisse im endgültigen variablen Format bereitzustellen. Einige sind in die Softwaresimulationsdateien integriert , andere sind eigenständig.

Abbildung 3 zeigt die derzeit typische ELT-Synergie bei der aerothermischen Modellierung. Die Suite besteht aus einer Reihe von thermischen Netzwerk-, CFD- und konjugierten Wärmeübertragungsmodellen. Sie enthält außerdem ein spezielles Strukturmodell, das nur für thermische Verformungen entwickelt wurde. Der Zweck dieser Modelle besteht nicht nur darin, spezifische Ergebnisse für IQ-Schätzungen zu liefern, sondern sich auch gegenseitig zu ergänzen und zu unterstützen. Blau entspricht den hochpräzisen CFD-Modellen, Gold den konjugierten Wärmeübertragungs-, Wärmenetzwerk- und Wärmeverformungsmodellen, Grün sind IQ-Tools, die zum IM-Framework gehören, und Gelb sind die Eingabe-/Ausgabevariablen . Die CFD-Modelle liefern Wärmeübertragungskoeffizienten für die Festkörper- Wärmemodelle der Finite-Elemente-Analyse (FEA) der Spiegel- und Teleskopstruktur, die wiederum den CFD-Modellen Temperatur- und Wärmeströme als Randbedingungen für das Teleskop und die optischen Oberflächen liefern. Die Netzwerk-Wärmemodelle liefern den CFD-Modellen Wärmeströme für die Gehäuseoberflächen und andere Komponenten. Sie können den FEA-Modellen auch korrekte Strahlungseigenschaften liefern. Schließlich können sie schnelle qualitative Informationen über optimale Strategien zur Wärmeregelung bei Tageslicht liefern, um die rechenintensiven CFD-Simulationen bei Tageslicht zu minimieren. Die konvektiven Wärmeübertragungskoeffizienten, die die Wärmenetzwerk- und FEA-Modelle benötigen, werden durch CFD-Simulationen bereitgestellt.

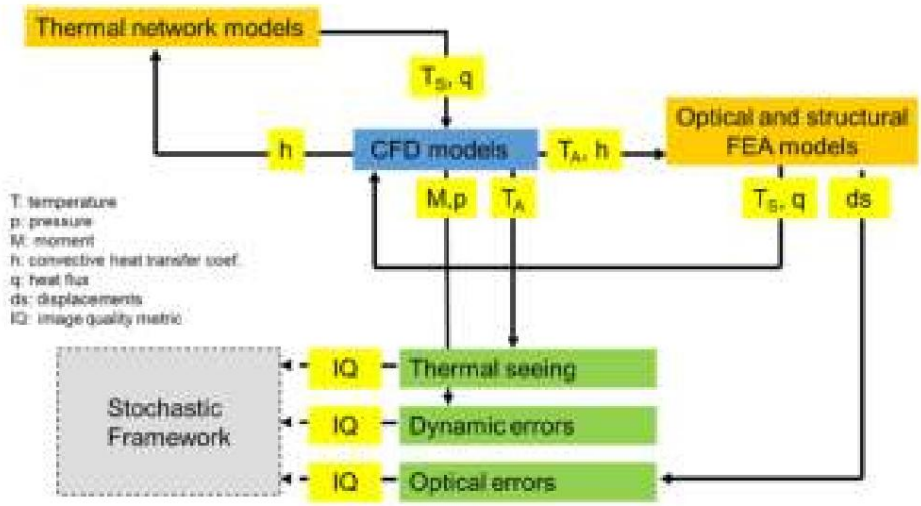


Abbildung 3. Flussdiagramm der Informationen zur aerothermischen Modellierung.

Die aerothermische Modellierungssuite kann eine breite Palette von Ergebnissen liefern, um die Designanforderungen des Subsystems zu validieren und/oder zu verifizieren. Die thermischen CFD-Simulationen ergeben Kraft-/Moment- und Temperaturfelder, die jeweils von den dynamischen und thermischen Sichtblöcken verwendet werden, während die thermischen FEA-Simulationen Verschiebungen ergeben, die direkt vom optischen Block verwendet werden. Auf diese Weise können Schätzungen der aerothermisch bedingten Fehlerbudgetbedingungen des Subsystems und **der Leistungsbudgets auf Systemebene erstellt werden .**

Die verfügbaren Eingaben, Parameter, die durch Design und Betrieb gesteuert werden können, und vorab berechnete Abweichungen aus den IM-Blöcken in mehrdimensionaler Matrixform (Look-up- Tabelle, LUT) werden innerhalb des stochastischen Rahmens kombiniert, um den Systemzustand zeitlich zu definieren. Schließlich erzeugen Funktionen, die der mathematisch/statistischen Verarbeitung entsprechen, Leistungsparameter auf Systemebene, wie z. B. die PSSn.

Machine Translated by Google

3.5. Anfrageverarbeitung auf Subsystemebene

Die ELT-IM-Teams haben einen internen Plan für die Entwicklung von aerothermischen Modellen. Die Planung ist an Überprüfungen auf Systemebene gebunden, während die spezifischen Modelle gemäß der entsprechenden Bedeutung des Fehlerbudgetterms priorisiert werden. Die Notwendigkeit anfänglicher Schätzungen der lokalen Sichtung und der Windbelastung des Teleskops erforderte, dass das erste zu entwickelnde Modell und das erste zu unterstützende und zu optimierende Subsystemdesign das Gehäuse sein sollte. Ein Teleskop auf Konzeptionsdesignebene würde darin platziert werden. Die thermischen Randbedingungen würden aus einem anfänglichen thermischen Netzwerkmodell stammen, das große Oberflächenbereiche berücksichtigt, die den optischen Pfad direkt beeinflussen. Die restlichen Wärmequellen würden aus den entsprechenden thermischen Anforderungen stammen. Dies bildete das CFD-Modell des Observatoriums. Beachten Sie hier, dass es eine Nacht- und eine Tagesversion dieses Modells gibt. Das Modell würde jährlich mit zunehmender geometrischer Genauigkeit aktualisiert. Subsystemmodelle würden entweder entwickelt, um die Genauigkeit der thermischen Randbedingungen für das Observatoriumsmodell zu erhöhen und so die Genauigk Dieser letztgenannte Prozess erzeugt das, was hier als aerothermische Subsystemabfrage bezeichnet wird.

Das Subsystemteam kontaktiert das IM-Team mit einer Anfrage (Abbildung 4). Typische Anfragen können Design-Kompromißstudien (geometrische Überlegungen, Geräteauswahl, Durchflussrate und Wärmeableitungsoptionen), Eingabedaten für Überlebensanalysen und die Leistungsauswirkungen irreversibler Designentscheidungen sein. Dabei kann es sich häufig um Überprüfungsmaßnahmen handeln. Es wird ein Meeting oder eine Reihe von Meetings zwischen den Teams abgehalten, um die direkt betroffenen Subsystemanforderungen (Ebene 4) und die entsprechenden Lei Dies ist wichtig, um den Umfang der vom IM-Team erwarteten Aktion zu definieren: welche Modelle werden benötigt, mit welcher Ausgabe und bis wann. Sobald der Umfang definiert ist, können alle Voraussetzungen identifiziert und die erforderlichen Ressourcen geschätzt werden.

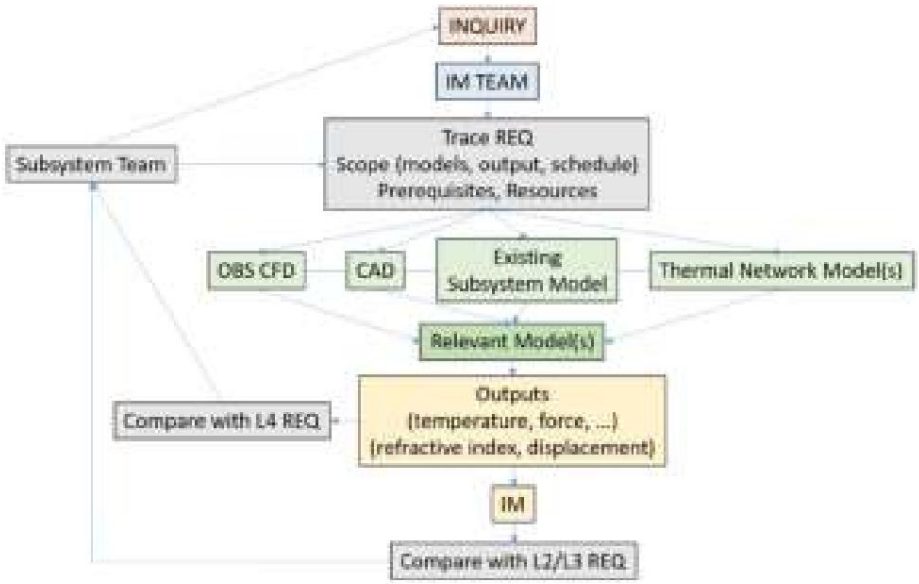


Abbildung 4. Repräsentativer Validierungsprozess für aerothermische Anforderungen von ELT.

Voraussetzungen sind allgemeine Eingaben (Windgeschwindigkeit, Teleskopausrichtung, Komponentenleistung /Flussraten usw.), ein vorhandenes Subsystemmodell, das mit unterschiedlichen Eingaben verwendet werden muss, ein CAD-Modell für eine neue Geometrie oder zur Aktualisierung einer vorhandenen Modelldarstellung, thermische Netzwerkmodelle für zusätzliche Temperaturberechnungen und Wärmeableitungsbilanzen auf System- oder Subsystemebene. Beachten Sie, dass die überwiegende Mehrheit der bisherigen Anfragen Informationen erfordert, die vom CFD-Modell des Ob

Oft ist entweder die Dringlichkeit oder der Zeitrahmen der Anfrage nicht mit den geschätzten Ressourcen vereinbar, was zu einer Reduzierung des Umfangs führt (minimaler Aufwand zur Erzielung akzeptabler Antworten).

Machine Translated by Google

Sobald alle relevanten Modelle und Eingaben identifiziert wurden, werden die Simulationen durchgeführt und die Ergebnisse gesammelt. Je nach Umfang der zu validierenden (oder zu verifizierenden) Anforderungen kann eine integrierte Modellierung erforderlich sein oder auch nicht. Es ist üblich, dass die erste Ergebnisrunde zusätzliche Anfragen und Änderungen sowie möglicherweise die Entwicklung neuer Modelle hervorbringt.

In den nächsten Abschnitten werden die verschiedenen Typen und Hauptanwendungen der aerothermischen Modelle genauer untersucht. Zum Abschluss dieses Abschnitts wird in Tabelle 1 eine Zusammenfassung der Auswirkungen der aerothermischen Modellierung auf das ELT-Design präsentiert , größtenteils in zeitlicher Reihenfolge (abhängig auch von der Reife des Subsystemdesigns). Die Zus Die meisten Modelle werden regelmäßig aktualisiert und ihre Genauigkeit nimmt mit zunehmender Designreife und gewonnenen Modellierungserfahrungen zu. Außerdem gab es vor der Entwicklung vieler dieser Modelle mehrere Instanziierungen der CBE-Gesamtleistung. Beachten Sie jedoch, dass nicht alle Observatorien diese Reihenfolge strikt einhielten, insbesondere bei der Standort- und Gehäuseauswahl sowie bei der Designphase.

Tabelle 1. Auswirkungen der aerothermischen Modellierung auf ELTs.

ELT-Entwicklungsaspekt	Modellierungsaktion	Systems Engineering-Funktion
Standortauswahl	GL-Modellierung. Vergleich mit Messungen vor Ort.	Kompromissstudien. Risikominderung (Modellvalidierung).
Site-Entwicklung	GL-Modellierung: Minimieren Sie die Auswirkungen auf die Standortqualität, wählen Sie einen bestimmten Standort innerhalb des Standorts aus und untersuchen Sie gegebenenfalls Interaktionen mit vorhandenen Observatorien. Vergleich mit Messungen vor Ort.	Kompromissstudien. Risikominderung (Modellvalidierung).
Gehege und Einrichtungen	Modellierung von Observatorien: Auswahl des Gehäusetyps, Optimierung der aerodynamischen Form, Windlasten, Entlüftungsfläche, -standort und -anzahl, Dimensionierung und Leistung der Kühlung, Wärmeregelung von Laufwerken, Versorgungseinrichtungen und Zwischenräumen, Oberflächentemperaturen/Emissionsgrad der Farbe und Isolierungsdicke.	Kompromissstudien. Validierung der Anforderungen.
Teleskopmontierung (Aufbau)	Solide thermische Modellierung: thermische Verformung, Teleskopausrichtung, Oberflächentemperaturen/Emissionsgrad der Farbe und Nachschlagetabelle für Position/Ausrichtung des Temperatursensors. Modellierung des Observatoriums: aerodynamische Optimierung des oberen Endes und der sekundären Stützstruktur.	Validierung der Anforderungen. Kompromissstudien.
Optische Baugruppen	Konjugierte Wärmeübertragungsmodellierung: Oberflächen- und Komponententemperaturen, Deformationswellenfrontfehler, Wärmekontrolle und Auswirkungen auf Messsensoren.	Validierung der Anforderungen.
Instrumente und Laserführung Sternensysteme	Konjugierte Wärmeübertragungsmodellierung: Oberflächen- und Komponententemperaturen, Fokusfehler, Turbulenzen im internen optischen Pfad und Designoptimierung.	Validierung der Anforderungen. Kompromissstudien.
Leistung CBE	Modellierung von Observatorien: thermisches Seeing/ Auswirkungen auf die Messtechnik, Windbelastung auf Struktur und Optik, thermische Verformung von Struktur und Optik sowie Ausrichtung des Teleskops. Modellierung vorhandener Observatorien für Vergleichs- und Netzauflösungsstudien (für mehrere Modelle).	Überprüfung der Anforderungen. Risikominderung (Modellvalidierung).
AIVC/Betrieb	Modellierung des Observatoriums: aerothermische Umgebung während des Baus, interne Temperaturgradienten ohne Klimaanlage, externe Windprofile und Auswirkungen auf die Messtechnik. Reduced Order Modeling (ROM) und Modellierung künstlicher neuronaler Netze (KNN) zur Charakterisierung des ersten Lichts und zur Betriebsoptimierung/Warteschlangenbeobachtung.	Validierung der Anforderungen. Überprüfung der Anforderungen.

Machine Translated by Google

4. Thermische Netzwerkmodellierung

Der stochastische Rahmen ist die Grundlage für jedes thermische Netzwerkmodell, um statistisch ein breites Spektrum an Umweltbedingungen abzudecken. Obwohl die wichtigste Variable von Interesse die Umgebungstemperatur ist, sorgen Wind und Variabilität der Teleskopausrichtung für die erforderliche Vielfalt an konvektiven Wärmeübertragungskoeffizienten und Strahlungssichtfaktoren sowohl für äußere als auch innere Gehäuseoberflächen sowie für Teleskopkomponenten. Tägliche Umweltaufzeichnungen sind wichtige Eingaben für jedes thermische Netzwerkmodell, da das Verhalten der Komponenten aufgrund der thermischen Trägheit ein „Gedächtnis“ aufweist; ihr aktueller thermischer Zustand hängt von vorherigen thermi

Die bisherige Version dieses Rahmens enthielt ein thermisches Modell mit konzentrierter Masse für den TIO-Primärspiegel, da das Seeing des Spiegels mithilfe einer semi-empirischen Beziehung berechnet werden konnte [15]. Diese Beziehung hat sich jedoch als nicht gültig für Riesenspiegel und alle Strömungsmuster innerhalb von ELT-Gehäusen herausgestellt und wird nicht mehr verwendet.

Das Framework wurde seitdem mit mehreren thermischen Netzwerkmodellen gekoppelt, die im Folgenden vorgestellt werden. Die Ausgabeparameter dieses Frameworks, die als Eingaben für andere Modelle oder für Designzwecke (Betriebsbereiche) verwendet werden, umfassen Folgendes: •

Umgebungstemperaturdrift seit der letzten Teleskopausrichtung, verwendet vom Teleskop/Spiegel thermische Verformungsmodelle;

• Temperaturdifferenz zwischen Sonnenaufgang und einer bestimmten Nachtzeit oder dem Nachtmittelwert , die zur Dimensionierung der Lüftungsanlage des Gehäuses und zur Ermittlung der Zulufttemperatur verwendet wird; • Temperaturdifferenz zwischen der äußeren Umgebungstemperatur am Tag und der Innentemperatur, unter Verwendung der Ergebnisse des Klimaanlagenmodells, die in Kombination mit der äußeren Windgeschwindigkeit zur Ermittlung der Infiltrationslast des Gehäuses verwendet w

4.1. Anlage

Die richtigen thermischen Randbedingungen auf den Gehäuseoberflächen sind wichtig, um das Temperaturfeld im optischen Pfad korrekt zu erfassen. An Orten mit geringer Windgeschwindigkeit dominieren Diffusion und Auftrieb, und die Temperaturgradienten auf den Oberflächen verwandeln sich in Schwaden, die den optischen Pfad beeinflussen. Wenn der Wind über den Bereich um die Gehäuseöffnung weht, erzeugt die Außenoberflächentemperatur einen Gradienten, der dann durch den optischen Pfad verläuft. Um den richtigen Wärmefluss auf den Gehäuseoberflächen abzuschätzen , wurde ein Modell implementiert, das die ständige Bewegung **der Gehäusekomponenten, Leitung, Konvektion und vor allem Strahlung berücksichtigen kann . Es enthält Knoten für die Gehäusehaut, Isolierung, Gehäusestruktur** und Innenluft. Es kann auch Informationen zu zeitlichen Temperaturgradienten für die Luft im Zwischenraum, den Beobachtungsboden und sogar die Struktur des Teleskops liefern. Es kann die Grenzen der Wärmeableitung für bestimmte Komponenten abschätzen. Schließlich kann es den **Leistungsbedarf der**

Eine vollständige 3D-Version dieses Modells für den TIO wurde erstmals 2011 vorgestellt; die aktuelle Version ist in [16] enthalten. Das GMT-Äquivalent findet sich in [17].

Die Auswirkungen sind wie

folgt: • Bietet kumulative Verteilungsfunktionen von Komponententemperaturen und -strömen: Außenhaut, Gehäusestruktur, Innenisolierung, Beobachtungsboden, Innenluft des Gehäuses und Luft im Überwachungsraum; • Validierung der Anforderungen: Außenfarbe und Emissionsgrad der Isolierung; • Bietet Statistiken zur maximal erwarteten Temperatur im Überwachungsraum; • Bietet Statistiken zur Wärmeableitung durch Isolierung und Observatoriumsboden; • Bietet Eingabe-Randbedingungen für CFD-Simulationen zur Observatoriumsleistung.

4.2. Optik

Obwohl für bestimmte optische Komponenten auch 3D-Festkörper-Thermomodelle existieren, ist es oft sinnvoll, schnelle Gegenstücke mit konzentrierter Masse zu entwickeln (z. B. [18]). Das Hauptziel dieser Modelle ist die Überprüfung der zulässigen Restdissipation nach dem Abkü

Machine Translated by Google

erforderlich) gekoppelt mit der statistischen Darstellung der Einhaltung einer Oberflächentemperaturanforderung (typischerweise für Wärmebildzwecke).

Die Auswirkungen sind wie

folgt: • Bietet eine Temperaturdifferenz zwischen Glas und Umgebung unter verschiedenen Umgebungsbedingungen.
talbedingungen;

• Validierung/Modifizierung der thermischen Spezifikationen für Primär- und Sekundärspiegel
ror-Systeme.

5. CFD-Modellierung astronomischer Standorte

5.1. Standortauswahl

Schon 2002 begann eine Kampagne zur Ermittlung möglicher Standorte für die nächste Generation eines US-Observatoriums. Ein wesentlicher Bestandteil dieser Kampagne war die Verwendung von CFD-Simulationen zur Validierung, Standortcharakterisierung und Vorauswahl, da nicht an allen in Frage kommenden Standorten die nötige Ausrüstung eingesetzt werden konnte.

Digitale Höhenkarten (DEMs) der interessanten Standorte mussten beschafft und verarbeitet werden, um Rechenbereiche und Netze zu erzeugen. Die DEMs deckten bestehende Observatoriumsstandorte ab , wie Maunakea (Hawaii, USA), Las Campanas (Chile), Paranal/Armazones (Chile), Tololo/Pachon (Chile), San Pedro Martir (Halbinsel Baja, Mexiko) und La Palma (Kanarische Inseln, Spanien) sowie einige neue Standorte in der Atacama-Wüste in Chile (Negro, Honar, Chajnantor, Tolonchar, Quimal) und sogar in der Antarktis (Dome C).

Auch wenn die Simulationen anfangs stationär und isotherm waren und sich auf topographisch bedingte mechanische Turbulenzen konzentrierten **[19,20], umfasste der letztendliche Umfang die Auflösung und Charakterisierung der GL (optische Turbulenzen), die experimentell schwieriger zu messen sind. Bis 2007 wurden auch an dieser Front bedeutende Fortschritte erzielt, einschließlich erster Modellvalidierungsbemühungen [21–24]. Eine funktionale Abhängigkeit von thermischer ÿT und mechanischer ÿM turbulenter Dissipation wurde verwendet, um den Brechungsindex- Strukturfunktionsparameter Cn 2~A ÿT ÿM ÿ1/3 aus stationären Simulationen abzuschätzen, während bei der Verarbeitung instationärer Felder die Theorie der schwachen Streuung verwendet wurde. Die CFD-Simulationen erzeugten turbulente kinetische Energie und Dissipationsraten, die anschließend zur Berechnung der turbulenten**

Zu den erforderlichen Eingaben gehören die folgenden:

• Wind- und Temperaturbedingungen gegen den Wind, die zusammen mit der topografischen Temperatur ein realistisches GL-Profil zwischen 7 m und 400 m über dem Boden ergeben. Die einzigen Variablen sind Windgeschwindigkeit und -richtung. Die Bodentemperatur wurde als berechnete Größe und nicht als Eingabe gewählt, entweder durch Auferlegung des erwarteten Nettowärmestroms oder durch Aufrufen eines grauen Wärmestrahlungsmodells mit einem Emissionsgrad von 0,8 und einer geeigneten effektiven Himmelstemperatur . Der Referenzstandort war der des entsprechenden Standortüberwachungssystems. • Einzelner Referenzdruck, der die durchschnittliche Standorthöhe widerspiegelt. **Für das entsprechende vertikale Dichteprofil wurde eine benutzerdefinierte Funktion** verwendet, die die erwartete **Referenzdichte bei der durchschnittlichen Standorthöhe ergab.**

Die Auswirkungen sind wie

folgt: • Auswahl des primären ELT-Kandidatstandorts;

• Risikominderung: Validierung der GL-Modellierung (Vergleich mit Messungen, sofern verfügbar); • Bei entsprechenden

Eingaben sind die modellierten GL-Profile realistisch, während sich die Mess- und Modellierungsunsicherheiten für optische Turbulenzen als vergleichbar erwiesen, wodurch die Verwendung der thermischen Modellierung eine wirtschaftliche und flexible Alternative zu Experimenten darstellt und in manchen Fällen die einzige Option ist.

5.2. Bodenschicht

5.2.1. Maunakea, 13N

Der Standort 13N auf Maunakea (HI, USA) ist der ausgewählte Standort für das TIO. Zu diesem Zweck wurde ein 20 × 13 km2 großes DEM von Maunakea mit einer Auflösung von 10 m erstellt. Die topografische

Machine Translated by Google

des Berechnungsbereichs ist auf die UTM-5Q-Koordinaten [X, Y] von [241000, 2192500] zentriert.
Aufgrund der sanften Hänge wurde als Höhe des Berechnungsbereichs 8000 m für Simulationen im vollen Maßstab und 5000 m für Simulationen mit einer Fläche von 3,5 x **3,0 km²** gewählt .

Während der TIO-Standortauswahlkampagne wurden zeitliche Aufzeichnungen von Windgeschwindigkeit, -richtung und -temperatur über dem Standort sowie optische Turbulenzdaten gesammelt. Basierend auf diesen Daten und der Tatsache, dass 13N auf der Nordseite unterhalb des Gipfels liegt, wurden stationäre Simulationen für drei Windrichtungen (O, SO, W) bei mittleren Windgeschwindigkeiten durchgeführt [25].

5.2.2. Las Campanas

Der Gipfel Las Campanas (Chile) ist der ausgewählte Standort für das GMT. Zu diesem Zweck wurde ein 22 × 24 km2 großes DEM mit einer Auflösung von 20 m mit einem 2 × 2 km2 großen hochauflösenden DEM (5 m) des Gipfels kombiniert . Die topografische **Grenze des Berechnungsbereichs liegt in der Mitte von Las Campanas mit den UTM-19J-Koordinaten [X, Y] von [336216, 6785453]. Die Höhe des Berechnungsbereichs wurde mit 5000 m gewählt.**

Zeitliche Aufzeichnungen von Windgeschwindigkeit, -richtung und -temperatur sowie turbulente Innenskala- und Cn- Werte wurden von der Umweltüberwachungsstation mit zwei Türmen gesammelt . Sowohl stationäre als auch instationäre CFD-Simulationen wurden für die vorherrschenden Standortbedingungen, NNE-Mittelwinde, durchgeführt. Es wurde ein Verfahren entwickelt, um die **Unsicherheit der topografischen Randbedingungen zu minimieren [26].**

5.2.3. La Palma, ORM Als

alternativer Standort für das TIO wurde das Observatorio del Roque de Los Muchachos (ORM) auf der Kanareninsel La Palma (Spanien) ausgewählt. Mehrere mögliche Standorte auf dem **Gipfel mussten hinsichtlich der GL-Stärke untersucht werden. Darüber hinaus machte das Vorhandensein bestehender Observatorien eine Untersuchung der Interaktion zwischen diesen Observatorien und dem TIO erforderlich.**
Der Mangel an lokalisierten Standorttests und die Beschaffenheit des Geländes führten im Jahr 2016 zur Verwendung von CFD-Simulationen in Kombination mit einem Seeing-Modell für die GL-Abschätzung optischer Turbulenzen [27].

Die Lage des ORM auf der Insel La Palma in Kombination mit zerklüftetem Gelände und der Nichtverfügbarkeit realistischer Eingabeprofile in Gipfelnähe erforderte einen großen Berechnungsbereich, der fast die gesamte Insel umfassen kann, mit einer zusätzlichen Pufferzone auf Meereshöhe für eine realistische GL-Entwicklung. An den Grenzen eines solchen Bereichs sind Geschwindigkeits- und Temperaturprofile mit größerer Sicherheit bekannt. Zu diesem Zweck wurde **ein 40 × 40 km² großes** DEM der Insel mit einer Auflösung von 50 m mit einem 4 × **3 km² großen hochauflösenden** DEM (10 m) des ORM-Gipfels **fusioniert . Die topografische Grenze des Berechnungsbereichs ist auf den ORM zentriert, mit UTM-28R-Koordinaten [X, Y] von [217900, 3185029]. Die Höhe des Berechnungsbereichs wurde mit 7500 m gewählt.**

Es wurden stationäre Simulationen für vier verschiedene Windrichtungen (NO, N, W, SW) durchgeführt. Es wurden zwei separate Studien durchgeführt. Die erste konzentrierte sich auf den GL-Vergleich zwischen den vier Kandidatenstandorten. Anschließend wurde für den auf Grundlage der Ergebnisse bevorzugten Standort und für zwei dieser Windrichtungen auch die Anwesenheit von nahegelegenen Observatorien wie GTC und TNG berücksichtigt, um gegenseitige Interferenzen zu ermitteln, die den lokalen **GL beeinflussen könnten [27]. Ein detaillierterer Bericht über die ORM-GL-Variabilität findet sich in [28].**

Die zusätzlichen Auswirkungen sind wie folgt:

• Auswahl alternativer Standorte für das TIO; • Bewertung der

Interaktion zwischen dem TIO und bestehenden Observatorien, wie vom Instituto de Astrofisica de Canarias gefordert.

6. CFD-Modellierung des Observatoriums

Aus 3D-CAD- **Modellen der Teleskopmontierung und des Gehäuses wurden CFD-Modelle mit hoher Genauigkeit für die Observatorien entwickelt .** Sie werden verwendet, um die aerothermische Umgebung um die Observatorien herum zu simulieren und zu analysieren. Die entwickelten **Modelle mit mehreren Millionen Elementen berücksichtigen die wichtigsten Observatoriumskomponenten wie die primären (M1) und sekundären (M2) Baugruppen, das sekundäre Stützgerüst, andere Unterkomponenten der Teleskopmontierung und das Gehäuse zusammen**

Machine Translated by Google

Als die Idee eines ELT aufkam, kam sofort der Einwand auf, dass übermäßige Windstöße das Projekt undurchführbar machen würden. Das Teleskop wäre zu exponiert und nicht steif genug, um die gewünschten Spezifikationen zu erfüllen. Jahrelange, umfangreiche Studien waren nötig, um das Problem zu lösen [29–32]. Winddruck- und -geschwindigkeitsmessungen innerhalb der Kuppel des noch im Bau befindlichen Gemini South, Windkanalstudien generischer ELT-Formen am Caltech, am NRC Institute for Aerospace Research in Kanada und in Europa sowie CFD-Simulationen und integrierte Modellierungen der Struktur, Steuerungen und Optik deuteten schließlich darauf hin, dass ein ELT mit den richtigen Strategien zur Minderung der Windlast kein sinnloses Unterfangen wäre [33]. Mit dieser neuen Zuversicht wurden Legacy-Studien durchgeführt, um durch Simulation konventioneller Kuppel-Verschluss-, Karussell- und Kalotten-Designs und mehrerer Belüftungs- und Windminderungskonfigurationen sowie Option Dieselben für TIO und GMT entwickelten Techniken wurden auch für die Designoptimierung des Vera Rubin-Observatoriums (damals Large Synoptic Survey Telesc

CFD-Simulationen haben im wahrsten Sinne des Wortes die Gebäudearchitektur, die Ummantelung, die Lichtblenden und die Kameraanforderungen der Anlage geprägt **[34–38].**

Auf der anderen Seite des Atlantiks hat das E-ELT ebenfalls einige nächtliche Observatoriums-Simulationen durchgeführt. Diese beziehen sich allerdings nicht direkt auf die optische Leistung, sondern konzentrieren sich auf die Geschwindigkeitsniveaus rund um das Teleskop und die Überlebensbedingungen [39].

Detaillierte Berichte zum Simulationsaufbau finden Sie in [40,41]. Häufige Aktualisierungen/ Änderungen sind aufgrund der Designentwicklung und der Erkenntnisse aus Studien wie denen in [28,42–45] erforderlich. Die wichtigsten sind im Folgenden zusammengefasst: • Die Geometrien werden aktualisiert, um die neuesten Designs und eine höhere Genauigkeit widerzuspiegeln. • Die Wärmeableitungsbudgets werden ebenfalls aktualisiert, und zusätzliche Grenzen werden zur Aufnahme der behobenen Wärmequellen geschaffen.

• Fortschritte bei Vernetzungsmethoden, Solverentwicklung und Rechenleistung werden sowohl beim Aufbau der Simulation als auch bei der Nachbearbeitung der Ergebnisse berücksichtigt. • Die Eingaben für den Upwind-Bereich wurden überarbeitet, um realistischere GL-Bedingungen widerzuspiegeln. • Die Modelle behalten die relative Bewegung zwischen tessellierten Teilen und den entsprechenden lokalen Koordinatensystemen bei, um dies zu unterstützen. Auf diese Weise können die Randbedingungen nur einmal angewendet werden und die Modellvorlagen können für mehrere Ausrichtungen und Windgeschwindigkeiten verwendet werden . Bei der Volumenvernetzung werden die Teile jedoch kombiniert, um numerische Fehler an den Volumenschnittstellen zu minimieren, auf die die PSSn-Berechnung für die thermische Seeing sehr empfindlich reagiert. Das Verfahren kann bei Bedarf wei

6.1. Tagsüber (Klimaanlage)

CFD-Simulationen bei Tageslicht wurden in [16,46] zwischen 2010 und 2024 für das TIO und in [47] für das GMT berichtet. Die durchgeführten Simulationen wurden ausgewählt, um zu zeigen, dass das Heizungs-, Lüftungs- und Kühlsystem (HVAC) des Gehäuses mindestens 90 % der Zeit wie erwartet funktionieren kann. Dies basiert auf dem erwarteten Wärmebudget bei Tageslicht und dem Temperaturunterschied zwischen Sonnenaufgangstemperatur und Zieltemperatur. Die Geometrie entspricht einem stationären Teleskop und Gehäuse an ihren nominellen

Die Auswirkungen sind wie folgt: • Zeitaufzeichnungen der Lufttemperaturen im Gehäuse in verschiedenen Höhen über dem Boden des Observatoriums und vertikale Temperaturprofile zu festgelegten Tageszeiten; • Validierung/Verifizierung des HVAC-Designs (maximale Durchflusskapazität, Aufteilung zwischen Primärversorgung und Umwälzraten, Düsenposition, Betriebsstrategie); • Optimale HVAC-Düsentemperatur als Funktion der zu erreichenden Zieltemperatur Leistungsanforderungen;
• Bietet Wärmeübertragungskoeffizienten für Konvektionsberechnungen für thermische Komponentenmodelle.

6.2. Nachts

Die aktuellen aerothermischen Leistungs-LUTs bestehen aus Ergebnissen für 3 verschiedene Teleskop- Zenitwinkel(0ÿ , 30ÿ , 60ÿ), 5 Teleskop-Azimutwinkel relativ zum Wind (0ÿ , 45ÿ , 90ÿ , 135ÿ , 180ÿ),

Machine Translated by Google

135ÿ , 180ÿ), 5–6 Windgeschwindigkeiten (2–3 für offene, 2–3 für geschlossene) und bis zu 3 verschiedene Sätze thermischer Randbedingungen, die verschiedenen Teilen der Nacht entsprechen (nominell ~1 Stunde nach Sonnenuntergang, mitten in der Nacht und kurz vor Sonnenaufgang). Eine effektive Verwendung des Modells besteht darin, das Netz in einer bestimmten Ausrichtung zu positionieren und dann eine Simulation auszuführen, bei der die Einlasswindgeschwindigkeit zwischen null und einem bestimmten Schwellenwert bei offenen Öffnungen variiert wird. Der Übergang von offenen zu geschlossenen Öffnungen erfolgt bei einer Einlasswindgeschwindigkeit von ~5–7 m/s. Dann wird für diese Ausrichtung eine separate Simulation ausgeführt, die Windgeschwindigkeiten von bis zu 17–18 m/s bei geschlossenen Öffnungen entspricht . Auf diese Weise Die Funktion für die Einlasswindgeschwindigkeit wird so definiert, dass genügend Zeit bei den Referenzwindgeschwindigkeiten der LUT verbracht wird, um vorübergehende Effekte zu eliminieren und genügend Zeit für Statistiken zu sammeln. Dies ist besonders wichtig für das Kuppel-Seeing aufgrund der längeren Zeitskalen, die mit der Diffusion der thermischen Randbedingungen in die Innenluft des Gehäuses verbunden sind. Obwohl dieser Ansatz in der Vergangenheit zur Schätzung der aerothermischen Leistung von TIO verwendet wurde [45], wird in einem späteren Abschnitt eine Alternative

Die zusätzlich erforderlichen Eingaben sind wie folgt:

• Aktuelle thermische Randbedingungen auf Observatoriumsoberflächen. Die Werte werden in drei Kategorien eingeteilt: Standard (wie adiabatisch, symmetrisch usw.), geschätzt und angenommen . Geschätzte Werte sind das Ergebnis einer Modellierung. Angenommene Werte gelten für Komponenten , die entweder temperaturgesteuert sind und eine Anforderungsspezifikation haben oder für die nicht genügend Informationen für eine genaue thermische Modellierung vorliegen. Sehr wenige Randbedingungen fallen in diese Kategorie, da zumindest ein thermisches Netzwerkmodell für die meisten Komponenten eine gewisse Schätzung liefern kann. Für viele Subsysteme gibt es bereits konjugierte Wärmeübertragungsmodelle, die Oberflächentemperaturen liefern. Dazu gehören optische Baugruppe Die meisten Randbedingungen werden als Temperaturdifferenzen von der Umgebungsreferenztemperatur angewendet . In einigen Fällen wird ein Gleichgewicht zwischen Konvektion und Strahlung angenommen, wobei die Wärmeleitung außer Acht gelassen wird. Diese entsprechen hauptsächlich Komponenten mit geringer thermischer Trägheit, wie der Stützstruktur und dem oberen Ende der Sekundärspiegelbaugruppe, der Außenhülle des Gebäudes und der Einrichtungen sowie der Innenverkleidung. Komponenten mit höherer thermischer Trägheit, wie die Betonkomponenten der Ummantelung und die untere Teleskopstruktur, werden durch die entsprechenden Modelle vorgegeben. Beachten Sie, dass die richtige Implementierung der Randbedingungen letztlich Kenntnisse über den Wärmehaushalt des Observatoriums erfordert **[48].**

Die Ergebnisse umfassen Folgendes: •

Dreidimensionale Temperaturfelder innerhalb des optischen Volumens vom Scheitelpunkt M1 bis zum Ende der Begrenzungsschicht des Gehäuses bei einer festgelegten zeitlichen Abtastrate. Diese werden als Eingaben im Postprozessor für das thermische Seeing verwendet [49,50]. Ein Nebenprodukt dieser Simulationen ist daher auch eine Zeitaufzeichnung von Karten mit optischen Wegdifferenzen (OPD). Für einen historischen Überblick über die frühen Modelle des thermischen Seeings kann der Leser [51,52] konsultieren. • Zeitaufzeichnungen von Druckkarten auf optischen Oberflächen. Diese werden als Eingaben für die Berechnung der windbedingten Bildunschärfe verwendet **[53,54].**

Druckkarten sind auf Anfrage auch für jede andere aufgelöste Komponente erhältlich. • Zeitaufzeichnungen von Momentkomponenten um das Teleskopkoordinatensystem, die aus Windkräften auf das gesamte Teleskop resultieren. Kräfte und Momente auf isolierten aufgelösten Teleskopkomponenten sind auf Anfrage erhältlich. Diese werden als Eingaben für die Berechnung des Bildzitterns verwendet **[9,42]. • Konvektive Wärmeübertragungskoeffizie konjugierte Wärmeübertragungsmodelle von Komponenten.**

Abbildung 5 zeigt repräsentative Kontur-Schnappschüsse des räumlichen Gradienten des Brechungsindex, ein Maß für optische Turbulenz, entlang der Normalen zur Teleskop-Elevationsachsenebene für TIO und GMT. Ebenso werden in Abbildung 6 repräsentative momentane OPD-Karten angezeigt.

Machine Translated by Google

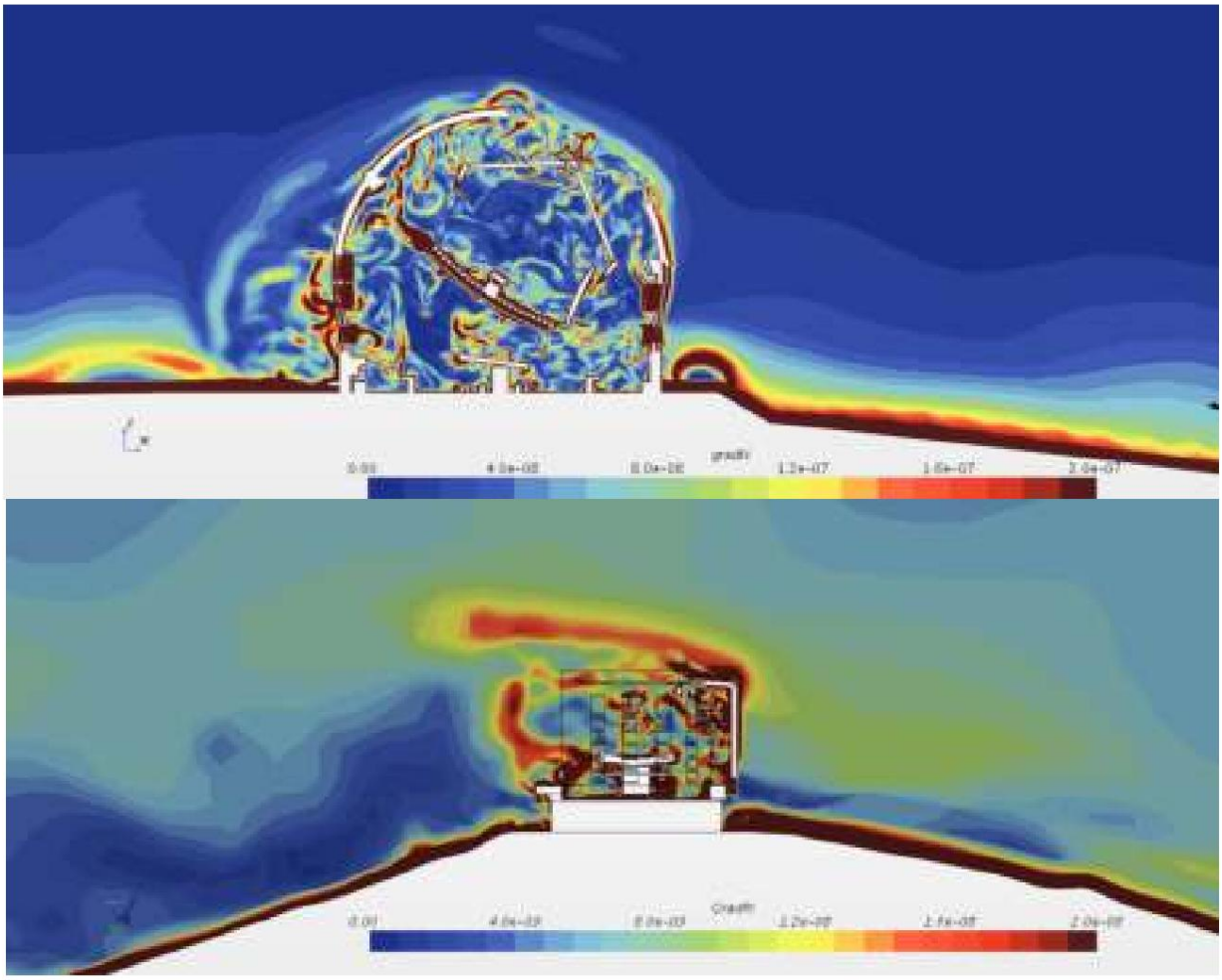


Abbildung 5. Repräsentative Kontur-Schnappschüsse des räumlichen Gradienten des Brechungsindex entlang der Normalen zur Elevationsachse des Teleskops: (oben) TIO, 30° Zenit und 45° Azimut relativ zum Wind und (unten) GMT, 0° **Zenit und 180° Azimut relativ zum Wind. Die Windgeschwindigkeiten liegen im Mittel (6–7 m/s) und die Entlüftungskonfiguration ist „offen“.**

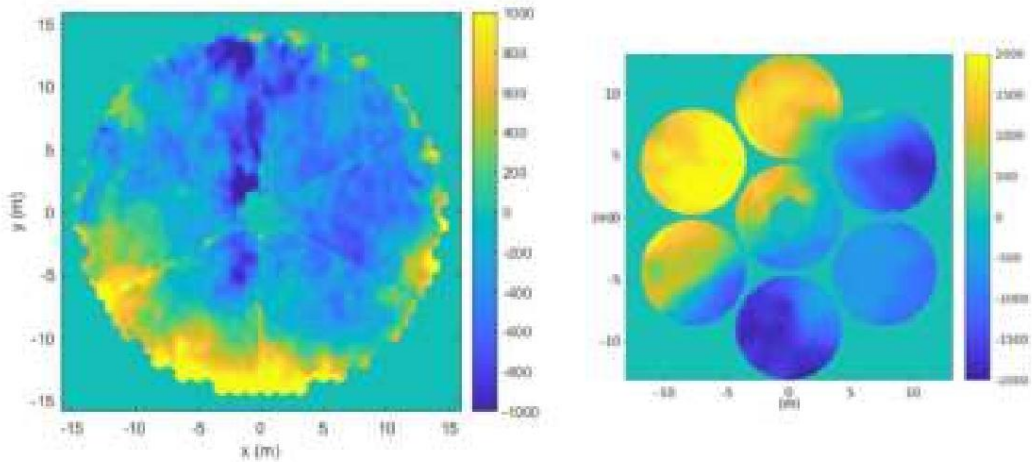


Abbildung 6. Repräsentative OPD-Karten (in nm) für TIO (links) und GMT (rechts).

Die Auswirkungen sind wie

folgt: • Observatoriumsweite aerodynamische Optimierung und Entwicklung einer Betriebsstrategie für die Umhausung durch einen Kompromiss zwischen Windschwankungen und thermischer Sicht;

Machine Translated by Google

- **Schätzung der Leistung des Observatoriums und des Fehlerbudgets in Bezug auf: thermisches Seeing, Bildzittern und windbedingte Bildunschärfe;**
- **Bietet thermisches Seeing mit Empfindlichkeit gegenüber Wärmequellen: Aktualisierung des Wärmeableitungsb und Designentscheidungen;**
- **Bietet Messsystemempfindlichkeit gegenüber Gehäuseumgebung: erwartete Messmentfehler;**
- **Bietet Wärmeübertragungskoeffizienten für Konvektion und Komponentenansichtsfaktoren für Strahlungsberechnungen für thermische Komponentenmodelle.**

6.3. Tagsüber (Solar)

Es wäre fahrlässig, die spezielle Kategorie von Observatorien nicht zu erwähnen, in denen die Beobachtungen tagsüber stattfinden: Sonnenobservatorien. Diese Techniken zur Leistungsabschätzung wurden kürzlich um die Optimierung von Gehäuse und Teleskopplattform sowie die Validierung der Anforderungen an Hitzeschilde und aktive Wärmekontrolle für das Europäische Sonnenobservatorium (EST) erweitert **[55].**

6.4. Validierung

Bis 2010 wurden **bei der Auflösung und Charakterisierung der GL erhebliche Fortschritte erzielt, einschließlich anfänglicher Modellvalidierungsbemühungen [21,25]. 2018 wurde ein zusätzlicher Validierungsversuch vorgestellt, diesmal unter Verwendung instationärer Simulationen [26]. Mit der richtigen Kenntnis der Umgebungsbedingungen können aktuelle Modellierungsmethoden realistische und nützliche Ergebnisse liefern. Ein anschauliches Beispiel ist in Abbildung 7 für Las Campanas** dargestellt **[28]. Die GL wird mit der am Paranal, dem Standort des Very Large Telescope (VLT) der ESO, gemessenen GL verglichen. Paranal liegt auch sehr nahe am Standort des E-ELT. Diese Profile werden sowohl vom GMT als auch vom E-ELT verwendet, um ihre Betriebsmodi der Ground Layer Adaptive Optics (GLAO) zu trainieren . Ähnliche Studien wurden, wie oben erwähnt, für Mauna**

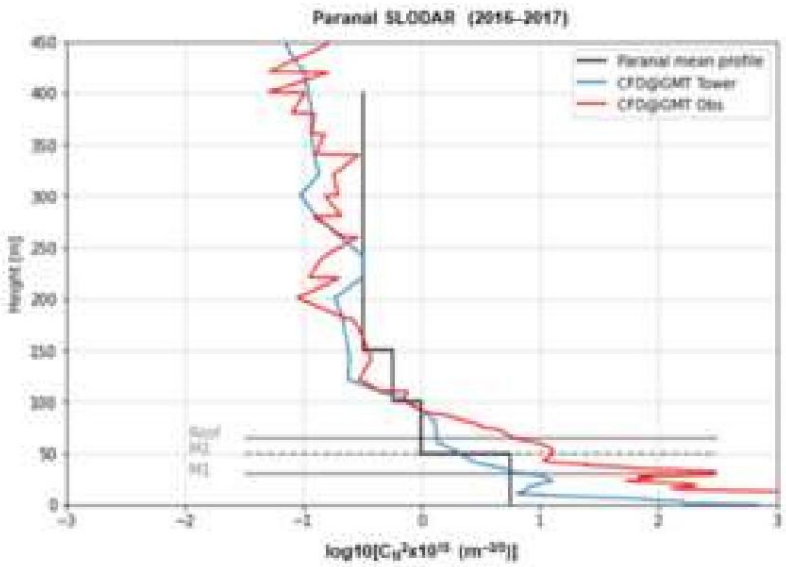


Abbildung 7. ^{2} **Profil in Las Campanas am Überwachungsturm und im Inneren des GMT-Geheges.**
Das grobe, mit SLODAR gemessene **Cn -Profil vom nahegelegenen Paranal-Standort ist darübergelegt.**

Das Verfahren zur nächtlichen Simulation der Leistung von Observatorien mit Fokus auf thermischem Seeing wurde durch Studien validiert, die im Jahr 2011 durchgeführt und in [56,57] berichtet wu Sie umfassten Messungen und Simulationen an zwei Observatorien, dem Keck II und dem CFHT (Canada–France–Hawaii Telescope), die sich den gleichen Basisstandort wie das TIO und damit auch den gleichen Berechnungsbereich und dieselben Aufwindbedingungen teilen.

Das Ziel der Studien aus der TIO-Perspektive war die Validierung des Modellierungsverfahrens, das zur Erfassung des lokalen Seeings erforderlich ist: die numerische Methode (Solver-Einstellungen und Mod

Machine Translated by Google

erforderliche Domänengröße, erforderliche geometrische Genauigkeit des Observatoriums, räumliche und zeitliche Auflösung , Randbedingungen und Darstellung von Wärmequellen auf Observatoriumsoberfläche

Die Keck-Observatorien waren an der Optimierung ihres aktiven Belüftungssystems interessiert, um die Leistung zu verbessern und die Betriebskosten zu minimieren.

Das CFHT interessierte sich für die differenzielle Leistung einer passiven Belüftung System, bevor über die Genehmigung entschieden wird.

Bei Keck II wurde ein Laserszintillometer installiert, das integrierte C_n^2- und durchschnittliche optische Turbulenzwerte im inneren Skalenbereich auf einem 63 m langen Weg zwischen M1 und M2 lieferte, zusammen mit Schallanemometern am oberen Stützring, um mechanische Turbulenzen zu erfassen. Das aktive Belüftungssystem wurde mit unterschiedlichen Geschwindigkeiten betrieben. Eine Infrarotkamera lieferte Temperaturunterschiede zur Umgebung für alle Observatoriumsoberflächen. Ähnliche Temperaturen wurden beim CFHT gemessen. Eine Kombination von Daten der CFHT MegaCam lieferte IQ; ein DIMM, das an der Basis der Öffnung installiert war, und eines, das am CFHT-Überwachungsturm installiert war, lieferten Schätzungen der scheinbaren Kuppelsic

Für alle gemessenen Teilmengen wurden die Teleskopausrichtungen, die externe Windgeschwindigkeit, -richtung und -temperatur aus den Daten des CFHT-Turmes und des Maunakea Weather Center extrahiert. Für Keck II wurden vier verschiedene Ausrichtungen über einen langen Zeitraum simuliert und für das CFHT drei, mit und ohne passive Belüftung. Im Fall von Keck II wurden 240 Kombinationen aus Ausrichtung, externer Windgeschwindigkeit und Lüftergeschwindigkeit abgetastet.

Die Keck II-Ausgaben lauten wie folgt:

• Brechungsindexvarianz entlang des Szintillometerpfads, integriertes C_n^2-Verhalten: vernünftige Vereinbarung mit Messungen; • Turbulente Energiedissipationsrate und innerer Maßstab: angemessene Übereinstimmung mit Messungen; • Integrallängenskala: stimmte mit der Blendenbreite wie erwartet überein; • Übereinstimmendes Verhalten von C_n^2 gegenüber der externen Windgeschwindigkeit; • Angepasstes Verhalten von C_n^2 gegenüber der Lüftergeschwindigkeit; • Identifizierte optimale Lüftergeschwindigkeit; die Hälfte dessen, was Keck zuvor verwendet hat.

Die CFHT-Ausgaben lauten wie folgt:

• Punktspreizfunktion (PSF) der Kuppelsicht entlang des optischen Pfads, PSF-Vollbreite-Halbmaximum-Funktion (FWHM): angemessene Übereinstimmung mit Messungen; • Signifikante Reduzierung der FWHM-Werte bei der Kuppelsicht durch passive Belüftung: mindestens 25 % ohne Berücksichtigung der Verbesserung der Oberflächentemperaturdifferenz (es stellte sich heraus, dass sie näher bei 50 % lag).

Die Auswirkungen sind wie folgt: • Risikominderung: Validierung der Kuppel-Seeing-Modellierung; • Optimale Auswahl der Keck-Lüftergeschwindigkeit: Senkung der Betriebskosten; • Unterstützung der Empfehlung zur Belüftung der CFHT-Kuppel: Verbesserung des differentiellen IQ; • Gesamtkommentar wie im Fall der Site-CFD: Modellierungs- und Messunsicherheiten waren vergleichbar.

In erster Näherung könnte man sich vorstellen, dass das optische Volumen der thermischen Sicht ein dem atmosphärischen OPD-Verhalten ähnliches aufweist, mit einem von Karman-Spektrum mit vorgeschriebener äußerer Skala und spektraler Steigung. Simulationen haben gezeigt, dass die spektrale Steigung mit zunehmender Auflösung schnell zu Kolmogorov konvergiert. Die optische Weglänge aktueller und in Planung/Bau befindlicher großer und extrem großer Teleskope beträgt mehrere zehn Meter, lang genug, um als „guter Fall“ des GL zu gelten. Unter diesen Bedingungen könnte die PSSn wie folgt angenähert werden:

$$\frac{FWHMp_{Geldautomat}}{FWHMp_{GESAMT}}$$

Im Allgemeinen ist dies eine schnelle und einfache Methode (mit einer gewissen Fehlerspanne), um die FWHM für die meisten Aberrationen zum Zwecke der Fehlerbudgetierung in PSSn umzuwandeln. Beachten Sie, dass die PSSn das Integral des Quadrats der PSF ist, normalisiert mit der der R

Machine Translated by Google

unter Einbeziehung von Informationen aus den PSF-Flügeln, während sich die FWHM nur auf die Breite der PSF bezieht, wo ihre Stärke die Hälfte ihres Maximums beträgt. Daher ist die Näherung möglicherweise nicht für alle Arten optischer Fehler gültig. Mehr dazu finden Sie in [11–13]. Normalerweise wird p **= 2 verwendet (entspricht einer Wurzelsummenquadratoperation zwischen dem Fehler und der Referenzatmosphäre). Für den spezifischen Term des thermischen Seeings sollte jedoch der Wert 5/3 verwendet werden, da das optische Volumen des thermischen Seeings Teil der Spalte des gesamten Seeings ist:**

$$\frac{FWHM5/3_{Geldautomat}}{FWHM5/3_{Geldautomat} + FWHM5/3_{TS}}$$

Dank der Validierungskampagne von Keck und CFHT und der Tatsache, dass die Autoren an der Systemtechnik für drei große und extrem große Observatorien in der Planung beteiligt waren, sind PSF-Karten für fünf Observatorien verfügbar geworden. Abbildung 8 fasst die Ergebnisse der thermischen Sichtung zusammen (mehrere Datensätze, Windgeschwindigkeiten und Ausrichtungen pro Punkt). Die Ergebnisse wurden neu skaliert, um derselben Referenzstandortatmosphäre mit Fried- Parameter r0 = 18 cm und einer Wellenlänge von 0,5 µm zu entsprechen. Die simulierten PSFs bestätigen, dass der obige Ausdruck für die Umrechnung zwischen FWHM und PSSn gültig ist. Darüber hinaus wurden die Werte für Keck und CFHT unabhängig voneinander als realistisch eingeschätzt, was die prognostizierte Leistung der Observatorien in der Planung ebenfalls realistisch macht, während sich das Vera Rubin-Observatorium (LSST) in der Endphase des Baus befindet und das erste Licht für 2025 erwartet w

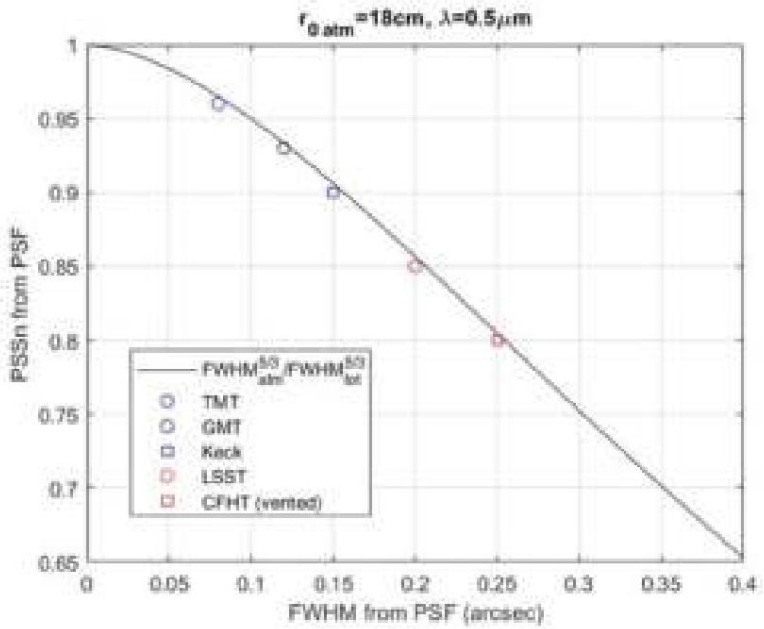


Abbildung 8. Observatoriumssimulationen: PSSn vs. FWHM.

7. Konjugierte Wärmeübertragung und thermische Festkörpermodellierung

Wie erläutert, besteht der Zweck dieser Modelltypen nicht nur darin, das thermische Trägheitsverhalten von Komponenten im Zeitverlauf abzuschätzen, sondern auch die räumliche Temperaturvariabilität und die daraus resultierende Verformung. Daher umfassen die typischen erforderlichen

Eingaben Folgendes: • Material- und thermische Eigenschaften von Komponenten, einschließlich Emissionsgrad; • Umgebungstemperaturprofil (entweder benutzerdefiniertes typisches Tagesprofil oder Teilmengen des stochastischen Rahmens);

- **Aktive Wärmelasten (bauteilgeneriert, zeitliche Aufzeichnungen wenn möglich);**
- **Konvektive Wärmeübergangskoeffizienten (aus CFD) für Oberflächen in Kontakt mit Luftvolumenstro Umsätze nicht**

modelliert; • Wärmewiderstand zwischen leitenden Komponenten.

Machine Translated by Google

Die Ergebnisse umfassen Folgendes: •

Zeitliche (und ggf. auch räumliche) Aufzeichnungen von Temperaturunterschieden zwischen Masse und/oder Oberflä
aus der Umgebung für jede Baugruppenkomponente;
• Zeitliche und räumliche Aufzeichnungen von Knotenverschiebungen aus einer Referenzgeometrie.

7.1. Spiegelbaugruppen

Das erste und charakteristischste Beispiel dieser Modellkategorie war das TIO Segment Support Assembly (SSA)-Modell. Es handelt sich dabei um ein transientes Modell, das die Wärmeübertragung durch Leitung, Konvektion und Strahlung zwischen dem Segment, dem Montagerahmen, den zwölf Randsensoren, den drei Aktuatoren, den entsprechenden Elektronikboxen und der Umgebung berücksichtigt.

Eine frühere Version dieses Modells enthielt keine Fluidkomponente. Der Nachteil war, dass konvektive **Wärmeübertragung nur als Parameter behandelt wurde , da es kein tatsächliches Strömungsmuster weg vom Segment gab .** Seitdem wurde das Modell zu seiner **Zwischenversion weiterentwickelt, die in [58] vorgestellt wird. Der grundlegende Unterschied besteht darin, dass sowohl die Feststoff- als auch die Lufttemperatur hinter dem Segment berechnet werden, wodurch die Notwendigkeit von Informationen über den Wärmeübertragungskoeffizienten oder „Feedbackschleifensimulatione Daher werden die Absonderungen von Wärmequellen wie Aktuatoren und Elektronikkästen genau dargestellt. Für das obere Segment werden Oberflächenwärmeübertragungskoeffizienten aus den CFD-Modellsimulationen des Observatoriums verwendet. Für das Segment selbst werden die korrekten Materialeigenschaften verwendet, aber für einige Baugruppenkomponenten, die nicht zu 100 % fest sind, wird die Dichte so angepasst, dass die resultierende Masse angesichts des von ihnen eingenommenen Volumens korrekt ist. Abbildung 9 zeigt die aufgelöste Geometrie zusammen mit der Abweichung der Oberflächentemperatur von der Umgebungstemperatur am Ende der Nacht für die endgültige Version des Modells**

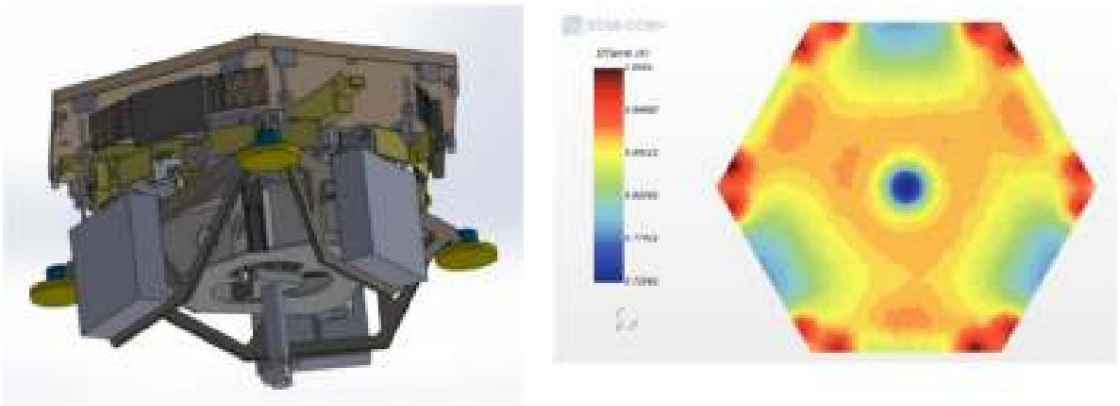


Abbildung 9. Aufgelöste Komponenten der TIO-Segmentunterstützungsbaugruppe (links) und repräsentative Temperaturverteilung auf der Vorderseite (rechts).

Das Spiegelsegment des GMT M1 besteht aus Borosilikatglas mit einer flachen Rückseite, einer parabolischen Oberseite und überwiegend sechseckigen Kernen (Lufteinschlüssen), die die beiden Seiten verbi Das M1-Wärmekontrollsystem (M1TCS) muss die Kerne mit (etwas unter) Umgebungslufttemperatur spülen, um die Umgebungsluft bei Nacht so genau wie möglich zu verfolgen. Konjugierte Wärmeübertragungsmodelle für einzelne Kerne wurden für verschiedene Kernhöhen und Düsenlängen entwickelt und für verschiedene Düsendurchflussraten simuliert. Ziel war es, einen konvektiven Wärmeübertragungskoeffizienten (HTC) auf den Kernoberflächen zu erzeugen, der einheitlich und mit dem der Spiegelvorderseite vergleichbar ist, vorgegeben durch die externe Windgeschwindigkeit, die Teleskopausrichtung und die Entlüftungsstrategie und ermittelt aus den CFD-Simulationen des Nachtobservatoriums.

Auf diese Weise sollte auch die Verformung der Frontplatte des Segments minimal sein. Die Luft wird durch Luftaufbereitungsgeräte (AHUs) im unteren Plenum der M1-Zelle aufbereitet und durch einen Düsenwald zu den Kernen geleitet. Der Kernstrom tritt in ein oberes Plenumvolumen (UP) aus , das durch eine isolierte Stahlplatte vom unteren Plenum (LP) getrennt ist. Die Luft aus dem oberen Plenum kann durch Einlässe an der Platte zurück zu den AHUs geleitet werden (geschlossener Kreislauf).

Machine Translated by Google

oder radial austreten, wobei die Luft aus dem Gehäuse von den AHUs verwendet wird (offener Kreislauf). Der obere Luftraum kann auch durch **einen Spalt am Rand des Segments von der Luft aus dem Gehäuse abgedichtet werden oder mit ihr kommunizieren .**

Es wurden konjugierte Einzelkern-Wärmeübertragungsmodelle für verschiedene Kernhöhen und Düsenlängen entwickelt und für verschiedene Düsendurchflussraten simuliert, um eine Nachschlagetabelle der HTCs auf der Vorderseite und der Kernspüleffizienz zu erstellen. Der HTC auf der Rückseite hängt jedoch vom Strömungsmuster im oberen Plenum ab. Als nächstes wurde das UP-CFD-Modell entwickelt, das alle Luftwegein- und -auslässe sowie den Wald aus Spiegellastverteilern (LSs) und Kerndüsen auflöst.

Gleichzeitig wurde deutlich, dass zur Erzielung von Verformungen entsprechend den verschiedenen Designoptionen ein 3D-Vollmodell eines gesamten Segments erforderlich war, das die erwartete Umgebungslufttemperatur und HTC-Karten der Oberfläche berücksichtigt und die resultierende Glastemperatur und die daraus resultierenden Verformungsfelder angibt. Beachten Sie, dass sich das On-Axis- Segment von den Off-Axis-Segmenten unterscheidet, was bedeutet, dass trotz identischer Strategie der gesamte manuelle und rechnerische Aufwand doppelt anfällt.

Um abschließend zu bestätigen, dass der von den AHUs im unteren Verteilerraum erzeugte Druckpegel und das Strömungsmuster die gewünschte Geschwindigkeits- und Temperaturgleichmäßigkeit durch die Düsen gewährleisten, wurde das LP-Modell entwickelt, das alle Einflussstrukturkomponenten umfasste: die AHUs und ihre Leitungen, Schaltschränke und Kühlrohrleitungen, die Aktuatoren und ihre Wärmequellen und natürlich die Düsen.

Einzelheiten zum GMT-Framework finden sich in [18]. Abbildung 10 zeigt das M1TCS Modellierungsflussdiagramm mit repräsentativen Modelldarstellungen und resultierenden Karten.

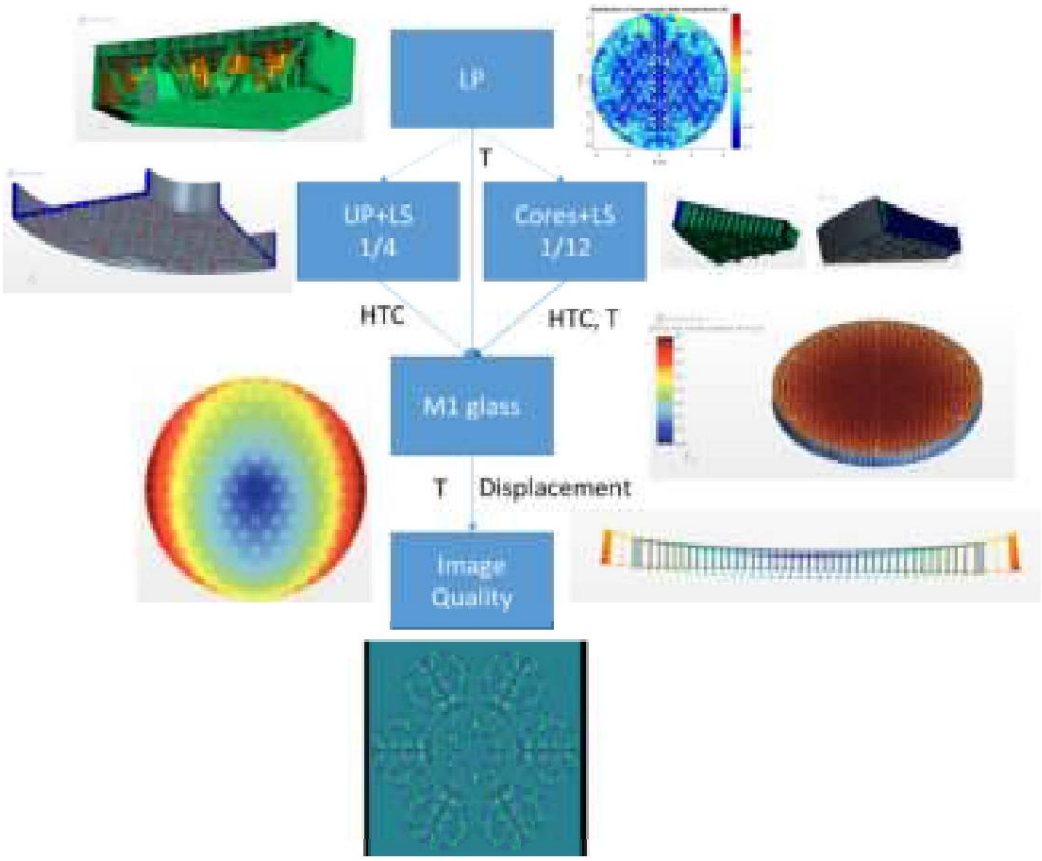


Abbildung 10. Das GMT M1TCS-Modellierungsflussdiagramm.

Das GMT Adaptive Secondary Mirror System (ASMS) besteht aus sieben deformierbaren 1-m -Spiegelsegmenten, die als Einzelspiegel fungieren sollen, und sieben Hexapod-Positionierern. Jeder Spiegel wird von 675 Aktuatoren deformiert, deren Wärmeableitung durch eine Kühlplatte thermisch kontrolliert wird. Die sieben Kisten mit den erforderlichen elektronis

Machine Translated by Google

aktiv gekühlt, während die 42 Hexapod-Aktuatoren nicht gekühlt werden. Außerdem gibt es Netzschalter- Hubs und Batterien, die den oberen Raum zwischen den Stützstreben belegen.

Es wurde ein hochauflösendes thermisches Festkörpermodell eines Segments erstellt, das den Hexapod, den Rahmen, das Elektronikgehäuse, die Kühlplatte, den Referenzkörper, den Windschutz und den Spiegel un Das Modell wurde als Achsensegment an eine verkleinerte Version des Montierungsmodells (obere Endstruktur, M1-Segmente, „Himmel“) angehängt, um Leitungs- und Strahlungseffekte richtig zu berücksichtigen. Die verbleibenden sechs Segmente und 36 Aktuatoren wurden als Formen mit gröberer Auflösung dargestellt, die in das Observatoriumsmodell aufgenommen werden sollten, und ihre Dichten wurden angepasst, damit sich ihre Oberflächentemperatur **im Laufe einer Nacht ähnlich verhält wie das Achsenmodell .**

Der Bedarf an zusätzlichen Informationen, wie etwa der Variabilität des Brechungsindex an den Sensorpositionen an den Segmentkanten und dem erwarteten Differenzdruck auf dem verformbaren Spiegel, führte dazu, dass das bereits gute Modell modifiziert werden musste, um den 100 nm- Abstand zwischen dem Spiegel und dem Referenzkörper, die Aktuatoren selbst als Zylinder sowie die Abstände zwischen ihnen und dem Referenzkörper richtig aufzulösen.

Nach der Überprüfung der 60 CFD-Fälle des Observatoriums im Bestand wurden Simulationen für mehrere Windgeschwindigkeiten bei dem erwarteten Auftreffwinkel zwischen Wind und Segment durchgeführt und die Differenzdruckkarten erstellt. Anschließend wurden die Simulationen mit den im Observatoriumsmodell enthaltenen Segmenten mit gröberer Auflösung durchgeführt, die nur Frontdruckkarten liefern. Eine Konvertierungsfunktion wurde formuliert, sodass Differenzdruckkarten aus allen 60 Fällen erstellt werden konnten, die den gesamten Bereich der **interessierenden Windgeschwindigkeiten und -ausrichtungen abdecken .**

Was die Umgebung des Randsensors betrifft, wurden an den Sensorstandorten aus den 60 Fällen 120 s lange Aufzeichnungen von Druck und Temperatur bei 20 Hz extrahiert und räumlich-zeitliche Statistiken des Brechungsindex berechnet. Diese Ergebnisse sind wertvolle Eingaben für das Segment- Kophasing-Modell.

Abbildung 11 zeigt eine repräsentative Druckkoeffizientenverteilung unter mittleren Winden auf den Oberflächen eines ASMS-Segments (Halbschnittansicht).

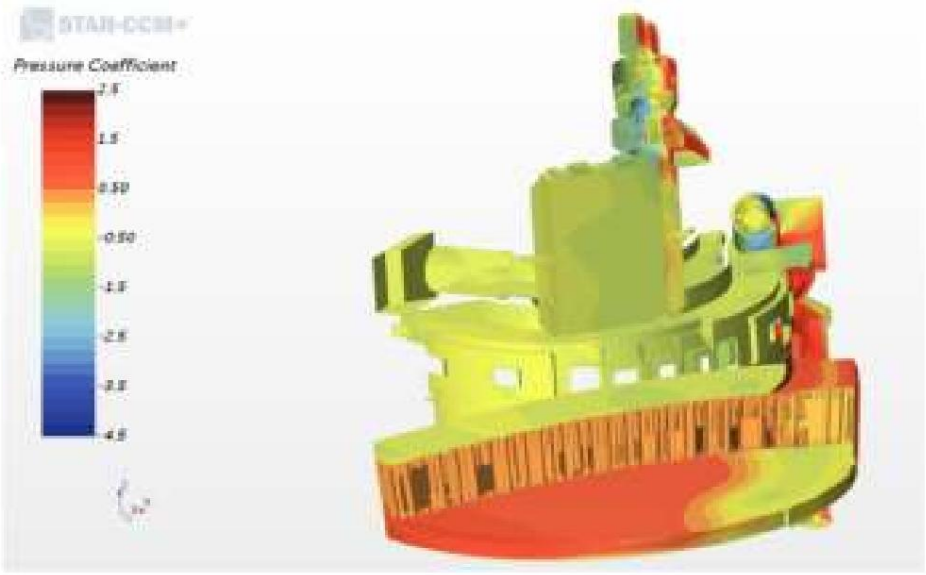


Abbildung 11. GMT ASMS-Modell und repräsentative Druckkoeffizientenverteilung.

Die Auswirkungen sind wie folgt:

• Validierung der thermischen Anforderungen an optische Baugruppen; • Schätzung der Fehlerbudgetbedingungen: Spiegel-Seeing, thermische Segmentverformung und Kuppel-Seeing; • Bereitstellung realistischer erwarteter Spiegelformen (thermische, druckbedingte Verformung) zur Aktuatorkorrektur und Phaseneinstellung.

Machine Translated by Google

7.2. Gehäusesysteme

Das TIO-Gehäusedesign besteht aus einer Doppelschalengeometrie, die einen Zwischenraum zwischen der Außenverkleidung und der Innenisolierung schafft. Der Großteil der thermischen Masse des Gehäuses und der mit seinem Betrieb verbundenen Wärmequellen befinden Das erforderliche Maß an Isolierung kann möglicherweise nicht überall erreicht werden (z. B. durch Lüftungstüren), und Dichtungen und Lücken können zu unerwünschter Infiltration führen. Die Azimutantriebe des Teleskops befinden sich oberhalb des Beobachtungsbodens. Im Gegensatz dazu verwendet das GMT-Gehäusedesign eine einschalige Geometrie, wobei sich die gesamte thermische Masse der Struktur innerhalb des Gehäusevolumens befindet. Die meisten Gehäusewärmequellen befinden sich hinter der Isolierung, und die Azimutantriebe des Teleskops befinden sich unterhalb des Beobachtungsbodens.

Es wurden Übergangsmodelle entwickelt, um die thermische Umgebung in diesen Zwischenräumen zu bewerten und mögliche Minderungsstrategien zu untersuchen. Die Modelle umfassen alle wichtigen Komponenten und die erwarteten beteiligten Wärmequellen, wie etwa die thermische Trägheit von Stahl- und Betonkonstruktionen, thermische Belastungen durch Schalttafeln und Wechselwirkungen mit der Außenumgebung und dem Boden. Besonderes Augenmerk wird auf die Azimutkorridore des Gehäuses gelegt , da die Antriebsleistung und die thermische Masse des Drehgestells in einer beengten Umgebung mit begrenzten und/oder teuren Belüftungsmöglichkeiten groß sind. Ziel ist es, die Temperatur unter einem bestimmten Grenzwert zu halten, der den Isolierungsspezifikationen entspricht, und den Druck auf einem Niveau zu halten, das verhindert, dass durch die Dichtungen oder durch die Gehäuseöffnungen, wenn diese geöffnet sind, Lecks in die Beobac

Genauer gesagt besteht das TIO-Modell [16] aus Folgendem: Außenverkleidung des Gehäuses , Luftzwischenräume in isolierten Volumina (Kappe, Azimutkorridor, feste Basis, Entlüftungsraum) und Isolierung. Ungefähr 100 große Schalttafeln werden als Blöcke aufgelöst. Die wichtigen Wärmequellen werden als Festkörper mit innerer Wärmeableitung und der Rest als Begrenzungen mit vorgeschriebenem Oberflächenwärmestrom aufgelöst. Obwohl im Montagemodell die Wärmeableitung des Gehäuseantriebs als volumetrische Quelle behandelt wird, wird die Größe dieser Quelle als konvektive Wärmeübertragung aus einzelnen Azimut- und Kappendrehgestellmodellen gewonnen , wie dem in Abbildung 12 dargestellten.

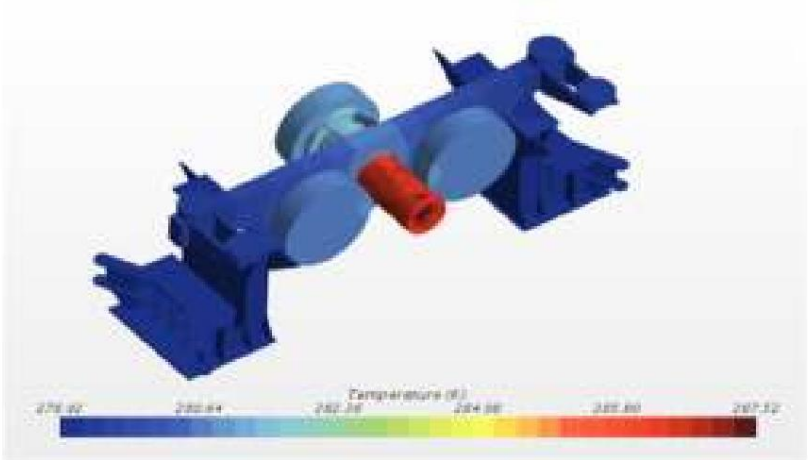


Abbildung 12. TIO-Gehäuse-Azimut-Drehgestell mit Antriebsmotor: Typische Oberflächentemperaturverteilung während der Nacht.

Das GMT-Modell besteht aus zwei Teilen, dem Pier Ventilation System (PVS)-Modell (äußere und innere feste Basisringe, Pier, Kabelwicklung, Teleskop-Azimutschiene, Teleskop-Azimutscheibe , Isolierung, Zwischenluft) und dem Mechanical Corridor-Modell (Isolierung, Azimutschiene , Drehgestelle, Bremsmassen, vier Antriebsbaugruppen und Schalttafeln). In Abbildung 13 werden **das PVS-Modell und eine stationäre repräsentative Lufttemp**

Machine Translated by Google

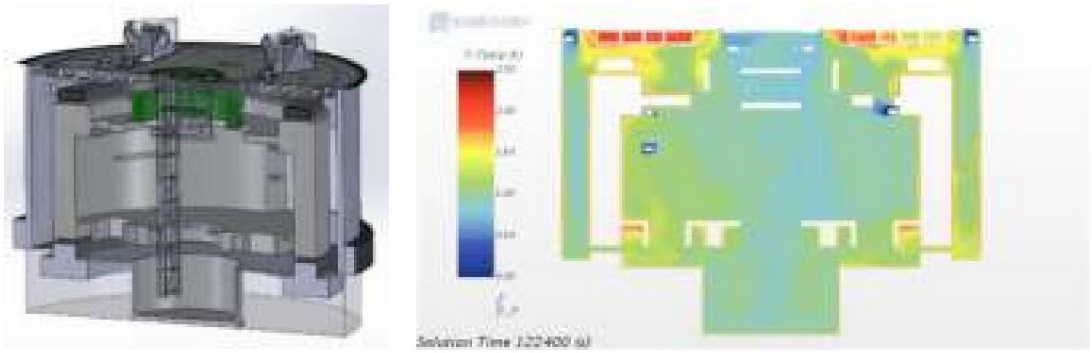


Abbildung 13. GMT-PVS-Modell (links) und stationäre Lufttemperaturkonturen in der Mittelebene (rechts).

Die Auswirkungen sind wie folgt:

• Validierung der Anforderungen an die Wärmeableitung und Isolationsleistung des Gehäuses; • Designauswahl: Option für aktive/passive Kühlung der Gehäuselaufwerke und Schalt
und Durchflussrate.

7.3. Teleskopstruktur **Das**

thermische Verhalten einer ELT-Teleskopstruktur (STR) und der am STR montierten Subsysteme hängt von der Wärmebelastung des Systems und den thermischen Eigenschaften der Komponentenmaterialien und der Umgebung sowie ihren Wechselwirkungen durch Konvektion, Leitung und Strahlung ab.

Ein älteres TIO-Modell aus dem Jahr 2010 [60] basierte auf eindimensionalen FEA-Elementen. Die resultierenden Verschiebungen wurden in die TIO Merit Function Routine (MFR) eingespeist, die sie in Translationen und Rotationen der optischen Oberflächen umwandelte. Diese wurden wiederum mit der optischen Empfindlichkeitsmatrix von TIO multipliziert, die den entsprechenden Zielfehler lieferte. So konnte die thermische Leistung der Struktur auf die Einhaltung der Anforderungen hin beurteilt und Konstruktionsrichtlinien bereitgestellt werden. Darüber hinaus konnten Strategien zur Korrektur der thermischen Drift und LUTs entwickelt werden.

Das neueste Modell aus dem Jahr 2014 verfolgt die täglichen Temperaturschwankungen im STR und die entsprechenden Verformungen [61]. Dieses Modell ist dreidimensional und berücksichtigt die Dicke der Strukturelemente. Es ermöglicht tägliche Simulationen und variable Höhenwinkel. Es umfasst auch alle Subsysteme und Komponenten, die thermisch mit der Struktur gekoppelt sind, und berechnet auch deren Temperatur. Schließlich führt es einen „Himmelskörper“ in der Größe der Öffnung ein, der die korrekte Berechnung der Strahlungskopplung mit dem STR ermöglicht. Das Modell besteht aus der M1-Zelle, dem M3-Turm und dem unteren Rohr als einem einzigen Körper, den Höhenzapfen sowie dem oberen Rohr und der Spinne als einem einzigen Körper.

Als spätere Ergänzung enthält es auch die Azimutstruktur unterhalb der Nasmyth-Plattform, Höhenantriebe und Magnete sowie hydrostatische Pads. Kontaktschnittstellen zwischen den unterschiedlichen Körpern entsprechen geschweißten Oberflächen. Die Segmenthandhabungs- und Reinigungssysteme wurden weggelassen, ebenso wie mehrere dünne, vergitterte Plattformen. Zusätzliche Komponenten, die nur über Strahlung mit der Struktur verbunden sind, sind ebenfalls enthalten: die Knotenkästen des M1-Steuerungssystems, das SSA als einzelner Block mit gleichem Volumen, das M1 als einzelner Körper (keine Segmentlücken), die M3- und M2-Baugruppen, die LGSF-, M3- und Top-End-Elektronikschränke, der Kanalabschnitt der Strahlübertragungsoptik oberhalb der Spinne und das Laserstartteleskop. Der geeignete/ gewünschte Grad des thermischen Kontaktwiderstandes zwischen diesen Komponenten und der Struktur ist ein Parameter. Abbildung 14 veranschaulicht die thermische Deformation der Teleskopst

Dieses Modell wird in der Zukunft erneut geprüft und die Studie wird aktualisiert, um das neueste Design widerzuspiegeln.

Ein Modellierungsrahmen mit ähnlicher Genauigkeit und Funktionalität wurde kürzlich für die GMT-Montierung entwickelt **[62]. Das Teleskopmodell besteht aus den M1-Segmentzellen, den Elevationszapfen (C-Ringen) und hydrostatischen Pads, dem Gregorianischen Instrumentenrotator**

Machine Translated by Google

drei sekundäre Stützträger und das obere Ende des Teleskops mit dem adaptiven Sekundärspiegel . Es enthält auch Elektronikschränke, Aktuatoren, optische Blenden und andere Geräte , die durch Strahlung oder Leitung thermisch mit der Struktur gekoppelt sein können. Das Gerüst besteht jedoch aus zwei separaten Modellen: einem thermischen Modell zur Berechnung instationärer Temperaturen und einem FEA-Modell zur Berechnung stationärer Verformungen. Dreidimensionale Momentaufnahmen der Temperaturfelder aus dem thermischen Modell, die verschiedenen Teilen der Nacht entsprechen, werden auf das FEA-Modell abgebildet, um die resultierende Verformung relativ zu einem anfänglichen Zustand ohne Dehnung zu schätzen, nom Die Verformung der gesamten Struktur ist verfügbar, aber die Verschiebungen an den Hardpoints, der Schnittstelle zwischen der Struktur und der Optik, werden vom optischen GMT-Modell weiter verarbeitet, um die resultierende optische Fehlausrichtung zu ermitteln. Das Ziel besteht darin, die Informationen des Strukturtemperatursensors schließlich über einen räumlichen Gradienten mit der optischen Fehlausrichtung zu korrelieren und eine LUT mit Korrekturanpassungen als Funktion der äußeren Umgebungsbedingungen zu entwickeln. Abbildung 15

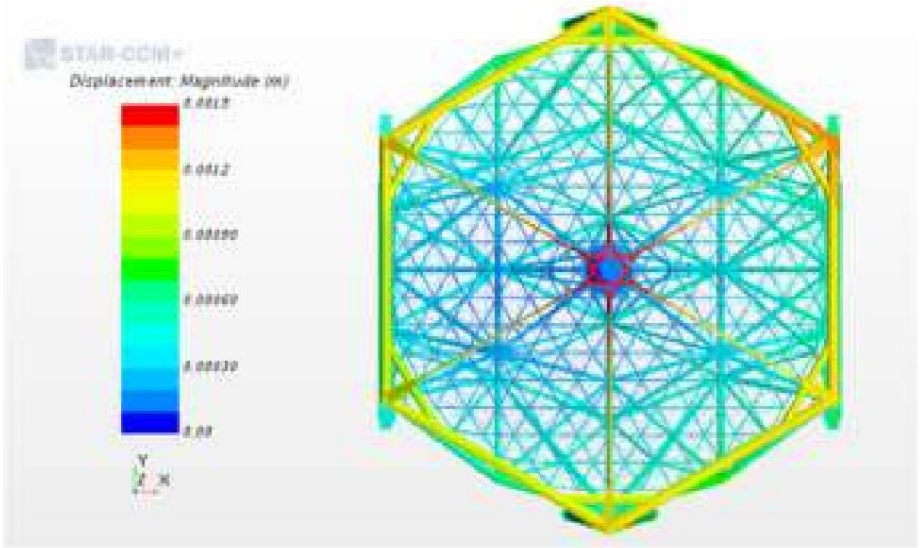


Abbildung 14. Ausmaß der thermischen Verformung der TIO-Teleskopstruktur (m) 12ÿStunden nach Sonnenuntergang.

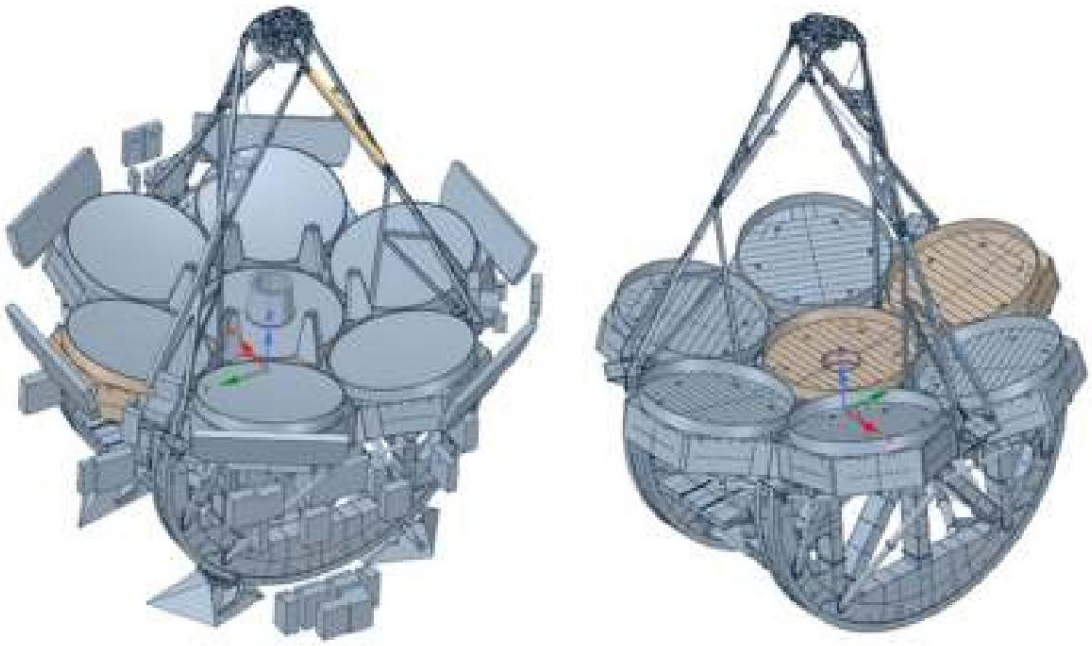


Abbildung 15. Thermische (rechts) und Deformationsmodelle (links) der GMT-Teleskopstruktur.

Machine Translated by Google

Die Auswirkungen sind wie

folgt: • Überprüfung der Anforderungen: Mindestabstand der Segmentlücke, verbleibender Nachführungsfehler am Himmel , Ausrichtungsfehler des Teleskops, maximaler Aktuatorhub und maximale Verschiebung der hinteren Brennweite;

• Bietet realistische erwartete thermische Fehlausrichtungen zum Testen von Korrekturstrategien; • Bietet Eingaberandbedingungen für CFD-Simulationen zur Observatoriumsleistung.

7.4. Subsysteme/Komponenten

7.4.1. Hubantriebe

Die Modellierung von Höhenantrieben begann 2014 mit einem eigenständigen Modell zur Schätzung der erforderlichen Kühlflussrate, damit die Antriebsoberflächen eine für die Kuppelsicht schädliche Temperatur nicht überschreiten und die Antriebsspulen die maximal zulässige Temperatur nicht überschreiten.

Es besteht aus vier Hauptkomponenten: der Trägerstruktur, Spulen, Forcern und Magneten. Es handelt sich um ein transientes Modell, das die Wärmeübertragung durch Leitung, Konvektion und Strahlung zwischen den Komponenten und der Umgebung berücksichtigt. Das Modell wurde später in das TIO-Teleskopstrukturmodell integriert, wie in Abbildung 16 dargestellt.

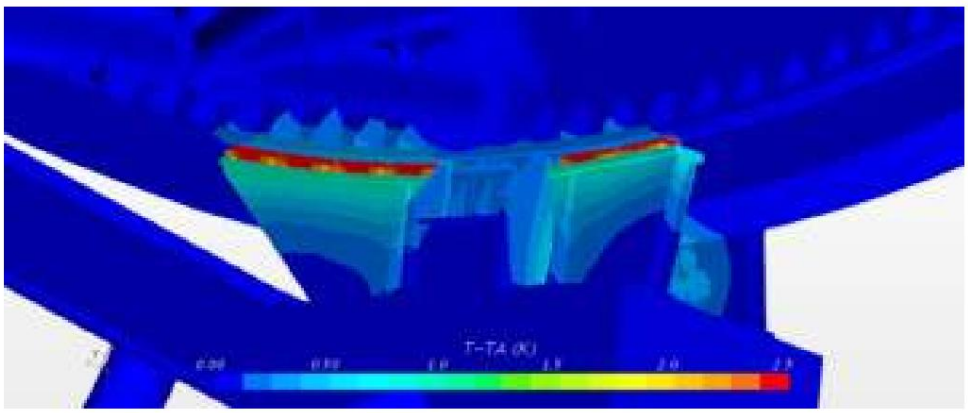


Abbildung 16. Detail des TIO-Höhenantriebsmodells und Abweichung der Oberflächentemperatur von der Umgebungstemperatur.

Die Auswirkungen sind wie folgt:

• Validierung der Kühlflussrate und der maximalen Spulentemperaturanforderungen von EL-Antrieben; • Bietet Eingaberandbedingungen für CFD-Simulationen der Observatoriumsleistung.

7.4.2. TIO-Laserleitstern-Anlage (LGSF)

Ein Modell des Strahlübertragungsoptikkanals (BTD) der LGSF wurde 2013 entwickelt [63]. Es löste die Kanaldicke und die Laserstrahlübertragungsspiegel und ihr Trägergerüst für den größten Teil des Laserstrahlpfads auf, der erheblichen Temperaturgradienten und/oder großen vertikalen Änderungen ausgesetzt ist. Es löste auch die Luft im Kanal und ihre thermische Wechselwirkung mit den oben genannten Komponenten durch konjugierte Wärmeübertragung auf. Die thermische Wechselwirkung des Laserstrahls mit der Optik wurde ebenfalls erfasst. Der Pfad von den acht **Lasern zum Truss Pointing Array (TPA) oder der Pfad innerhalb des Laser Launch Telescope (LLT) wurden nicht berücksichtigt .**
Das Modell diente dem LGSF-Designteam als Orientierungshilfe und ermöglichte eine erste Einschätzung der Stabilitätsleistung und Anforderungserfüllung des Laserstrahls.

Im Laufe der Jahre wurde das Design der Teleskopstruktur weiterentwickelt und ein neuer optischer Pfad für die LGSF vorgeschlagen. Sowohl der ursprüngliche als auch der neue optische Pfad wurden anhand optischer, mechanischer und anderer leistungsbezogener Kriterien des Teleskops verglichen. Zu den optischen Leistungskriterien gehörte eine Analyse erster Ordnung der in den Kar
Der neue vorgeschlagene Weg wies ein ähnliches thermisches Verhalten auf, wies jedoch eine deutlich geringere optische Turbulenz auf und wurde übernommen. Zu den Designänderungen infolge der Studie gehörten die Vergrößerung der Abstände zwischen bestimmten Optiken und die aerodynamische Umformung der Hüllen um die Transferoptiken. Die anfängliche Schätzung des Strahlzitterns lag deutlich innerhalb der budgetierten

Machine Translated by Google

Zwischen 2021 und 2023 wurde das Modell aktualisiert und umfasste nun auch das Laserbank-Array (LB), die Top-End-Baugruppe (TE) und das LLT [64]. Eine höhere geometrische Genauigkeit wurde auch durch zusätzliche Ausrüstung und ein Stützgerüst erreicht. Das Modell wurde in fünf Untermodelle (LB-Array, TPA, BTD, TE, LLT) aufgeteilt, von denen jedes das nächste hinsichtlich Durchflussrate und Lufttemperatur speist. Der optische Pfad wurde in mehrere Segmente aufgeteilt, um die Hauptverursacher von Strahlzittern und Fokusfehlern durch optische Elemente, insbesondere Linsen, Der Strahljitter wurde als Funktion der Zeit im Verlauf der Nacht bei niedriger und hoher zeitlicher Frequenz berechnet. Zusätzliche eigenständige Modelle des Laserkopfs (LH), der Standardlaserelektronik (LE) und der Gehäuse der Spitzenelektronik (TE.EL) wurden entwickelt, um die erwartete Kühlleistung und Außenoberflächentemperatur zu überprüfen. Abbildung 17 veranschaulicht den Modellinformationsfluss mit repräsentativen Modelldarstellungen und resultierenden optischen Turbulenzkonturen.

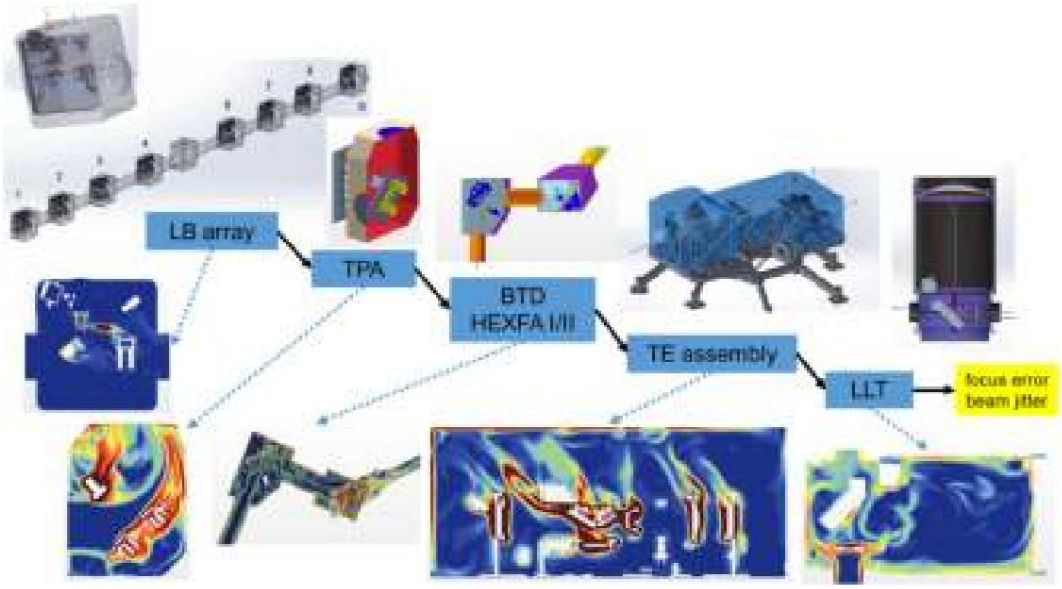


Abbildung 17. Flussdiagramm der TIO LGSF-Modellierung.

Die Auswirkungen sind wie folgt:

• Designänderungen zur Minimierung von Pfadturbulenzen und Verbesserung der Linsenkühlung; • Schätzungen der Budgetbedingungen für Strahlzittern und Fokusfehler.

7.4.3. Elektronik/Schaltschränke

Dabei handelt es sich um transiente Modelle, die sich auf die Form und das Volumen einer bestimmten Komponente konzentrieren, die typischerweise eine interne Wärmequelle umfasst. Das Volumen kann mehrere Teile aus unterschiedlichen Materialien sowie Luft umfassen. Daher sind nur die Gesamtmasse und eine durchschnittliche Wärmekapazität erforderlich, um ihre thermische Trägheit zu erfassen. Ihr Hauptziel besteht darin, die Verteilung der resultierenden Oberflächentemperatur und die Zeit anzugeben, die die intern abgeleitete Wärme benötigt, um die Oberfläche b

Ursprünglich wurden sie als eigenständige Modelle für einige wenige Komponenten entwickelt, in letzter Zeit sind sie jedoch routinemäßig in alle Baugruppenmodelle integriert. Dies ist die typische Art und Weise, die durchschnittliche Wärmequellenkomponente zu behandeln.

8. Unterstützung der CFD-

Modellierung Unterstützung von CFD-Modellen sind Modelle mit begrenztem Umfang, die entwickelt wurden, um bestimmte Design- und/oder Modellierungsfragen zu beantworten. Sie können stationär oder instationär sein und entsprechen in der Regel isolierten Komponenten.

Machine Translated by Google

8.1. Blendenabweiser des TIO-Gehäuses **Die**

Blendenabweiser des TIO sind eine einzigartige Funktion, die entwickelt wurde, um das obere Ende des Teleskops vor Wind zu schützen, indem der Gehäusedurchmesser auf das notwendige Minimum reduziert wird. Sie fungieren jedoch auch als Dichtung zwischen dem Gehäuse und dem Blendenverschluss.
Abbildung 18 veranschaulicht die Wirkung der Deflektoren auf die Geschwindigkeitsniveaus rund um das obere Ende des Teleskops durch diese frühe stationäre Simulation während der Konzeptionsphase im Jahr 2006. Dies entspricht einer Vergrößerung des Gehäusedurchmessers um ca. 2,5 m. Die Deflektoren haben einen Radius von ca. 5 m, eine Sehne von ca. 5 m (Spitze bis Scharnier) und eine projizierte Länge senkrecht zur Blendenebene von ca. 3,5 m. Im ausgefahrenen Zustand beträgt der Winkel zwisc
Während der Detailentwurfsphase wurde der niedrigste Strukturmodus auf ungefähr 5 Hz geschätzt. Aus Gründen der Ermüdung und der Überlebensfähigkeit wurden 2011 die natürliche Wirbelablösungsfrequenz und ihre Nähe zu den niedrigsten Strukturmodi ausgewertet.



Abbildung 18. Auswirkungen des TIO-Deflektordesigns auf die Geschwindigkeitsniveaus rund um das obere Ende des Teleskops (Geschwindigkeitsskala normalisiert mit Aufwindwert).

Es wurde **ein detailliertes CFD-Modell eines isolierten, einzelnen Deflektors mit einem Anstellwinkel von 30° (der Winkel, der die maximale Abwurffrequenz bestimmt) entwickelt und instationäre Simulationen sowohl für mittlere als auch für Überlebenswindbedingungen durchgeführt [58]. Die Strouhal-Zahl wurde zusammen mit den mittleren und dynamischen Kraftkomp Unter Überlebensbedingungen nähert sich die Abwurffrequenz dem ersten Strukturmodus.**
Die Ergebnisse könnten als Eingaben für das FEA-Modell des Deflektors verwendet werden, um die Auswirkungen der Windlast zu bestimmen und bei Bedarf Konstruktionsänderungen zu untersuchen.

8.2. Spinnenträger

Der Begriff „Spinne“ bezieht sich auf die dünne, mehrteilige Fachwerkstruktur, die den Sekundärspiegel eines Teleskops trägt und in vielen bestehenden Observatorien vorhanden ist.

Im Jahr 2012 wurde ein isoliertes, einzelnes Spinnenbalkenmodell, damals 0,25 m × 0,6 m × 20 m, entwickelt, um verschiedene Modellannahmen zu untersuchen.

Das ursprüngliche parametrische Modell, das zur Schätzung des Windzitterns auf der Grundlage konstanter CFD-Eingaben verwendet wurde, basierte auf Annahmen zum Strahlwiderstandskoeffizienten, zur Neigung des Kraftspektrums und zur Kraftdekorrelationslängenskala entlang des Strahls. Die Simulationen würden genaue Schätzungen dieser angenommenen Werte sowie die räumliche und zeitliche Auflösung liefern , **die zur korrekten Darstellung der physikalischen Phänomene erforderlich ist.**

Es wurden instationäre Simulationen unter Verwendung unterschiedlicher Oberflächenauflösungen, Windgeschwindigkeiten, turbulenter Intensität gegen den Wind sowie integraler Längenskalen und Abtastraten für Strömungen senkrecht zu den breiten und schmalen Strahlseiten und für eine Strömung in einem Winkel von 30° (Kom Zu den gesammelten Ergebnissen gehörten Druckaufzeichnungen an ausgewählten Standorten und integrierte Kraftaufzeichnungen sowie mittlere und effektive Widerstands- und Auftriebskoeffizienten.

Die Ergebnisse zeigten, dass das parametrische Modell für lokale Windgeschwindigkeiten über 1 m/s nicht gültig war. Es bestätigte auch die Annahme, dass das integrierte Kräftespektrum um ein festes Objekt aufgrund des aerodynamischen Dämpfungseffekts eine steilere Steigung aufweist als das des Punktdrucks. Die geeignete Oberflächenauflösung, die Wirbelablösung bei den erwarteten Frequenzen erfasst, wurde bestimmt und für das gesamte TIO

Machine Translated by Google

Struktur über dem Sechskantring, der M2-Baugruppe und dem Laser-Start-Teleskop (LLT). Die Auflösung des unteren Rohrs wurde ebenfalls entsprechend skaliert. Instationäre Simulationen würden in Zukunft direkt Kraftaufzeichnungen für Bildzittern-Schätzungen liefern. Die obere Teleskopstruktur des GMT ist ähnlich modelliert.

8.3. Strömungsbedingte Rohrschwingungen

Das Phänomen der strömungsbedingten Vibration ist bekannt und für ELTs potenziell problematisch, insbesondere im AO-Modus, da das Kühlsystem aus zahlreichen Rohren und Bögen b

Zur Unterstützung der Vibrationsfehlerbudgetierung wurden zwischen 2013 und 2021 in einer gemeinsamen Anstrengung von TIO und GMT mehrere einfache Rohr- und Ventilströmungsmodelle entwickelt, um das Ausmaß der dynamischen Kraft zu untersuchen, die die turbulente Strömung aufgrund von Reibung oder Trennung auf das Rohr ausübt, sowie ihr Spektrum. Zunächst wurde ein turbulenter, vollständig entwickelter Fall einer geraden Rohrströmung betrachtet, der die Einlassbedingungen für den Rest der S Dazu gehörten ein 90° -Bogen und ein S-förmiges Rohr, zwei aufeinanderfolgende 90° -Bögen. Verschiedene Rohrdurchmesser, Kugelhahnwinkel, Biegeradien und Durchflussraten wurden ebenfalls berücksichti

Die Ergebnisse zeigten, dass ein einzelnes Ventil größere Vibrationen verursachen kann als viele Meter Rohrleitung. Das Rohrleitungsnetz sollte so ausgelegt sein, dass die Ventilwinkel innerhalb eines Grenzwertes (<30°) bleiben. Obwohl die Ablösefrequenzen turbulenter Strömungen hinter einer 90° -Kurve bis zu 200 Hz betragen können, ist die absolute Größe der resultierenden dynamischen Kraft viel geringer als die erwarteten Pumpendrucks

8.4. Abluft der Summit-Anlagen

Observatorien verwenden verschiedene Kühlsysteme, die zur Klimatisierung der Gehäuse während des Tages und zur Kühlung der Instrumente, der Optik, der hydrostatischen Lager der Teleskope usw. verwendet we **Die Steuerung der Wärmeableitung des Kühlkreislaufs kann für IQ wichtig sein. Häufig erfolgt die Wärmeableitung in einem Gebäude neben dem Teleskopgehäuse. Die Lage und Ausrichtung der Abluftöffnungen wird unter Berücksichtigung der vorherrschenden Windrichtung ausgewählt. Dieser Ansatz basiert auf Statistiken und ist in Umgebungen mit bi- oder multimodalem Wind möglicherweise nicht sehr effektiv. Eine teurere Lösung besteht darin, einen Tunnel zu bauen, um die warme Luft vom Observatorium und dem optischen Pfad wegzuleiten. Sowohl die TIO- als auch die GMT-Standorte sind bimodal, mit ungefähr NO/SW-Windausrichtungen.**

Der Kühler des TIO-Gipfelgebäudes befindet sich daher an der nordwestlichen Ecke, wird aber voraussichtlich warme Luft in unmittelbarer Nähe des Observatoriums abgeben. Bei niedrigen Windgeschwindigkeiten und bestimmten Windrichtungen wird erwartet, dass diese Wolke hoch genug aufsteigt und den optischen Pfad stört, bevor sie Zeit hat, sich in der Luft au

Es wird jedoch erwartet, dass die Rauchfahne nur bei Westwinden und niedrigen Höhenwinkeln ein Problem darstellen kann. Bei Ostwinden löst sich die Rauchfahne auf, bevor sie den optischen Pfad des TIO kreuzt, selbst bei niedrigen Windgeschwindigkeiten (obwohl die völlige Abwesenheit von Wind nie simuliert wurde).

Im Jahr 2010 wurde eine Studie durchgeführt, um die Auswirkungen der Rauchfahne auf das atmosphärische Referenz- Seeing zu bewerten. Drei stationäre CFD-Fälle für niedrige (2,5 m/s), mittlere (6,5 m/s) und hohe Windgeschwindigkeiten (10 m/s) aus Westen (270°) wurden verarbeitet. Es wird angenommen, dass die Ergebnisse auch für Westwinde zwischen 225° (häufiger) und 315° (seltener) gültig sind. Der Zenitwinkel des Teleskops wurde auf 33° festgelegt . Die nominale Durchflussrate von 150.000 CFM führte zu einer Austrittsgeschwindigkeit von 2,5 m/s und einer Temperatur von ~10,5 K über Umgebungstemperatur. Die Werte entsprechen einer luftgekühlten Einheit.

Verschiedene optische Pfade wurden verarbeitet, um den entsprechenden r0-Wert der ersten 50 m hinter der Umzäunung abzuschätzen. Drei Azimut-Teleskopwinkel (65°, 0°, 45°) und drei Zenitwinkel (65°, 55°, 45°) wurden berücksichtigt. Für jede spezifische Teleskopausrichtung wurden drei Pfade berücksichtigt, bei X = 0 m und Y = ÿ15 m, Y = 0 und Y = +15 m im Teleskopkoordinatensystem. Die ersten Ergebnisse zeigten, dass nur für den 65° **-Zenitwinkel und nur für den Pfad Y = ÿ15 m erhebliche Auswirkungen festgestellt werden .**

Mit der Weiterentwicklung des Designs stieg die Gesamtleistung, die abgeführt werden musste, drastisch an, und es war ein Kompromiss zwischen Temperatur und Durchflussrate erforderlich. Eine neue Studie wurd

Machine Translated by Google

2020 [16] unter Berücksichtigung verschiedener Kombinationen von Abgastemperaturunterschieden und Strömungsraten erstellt. Für diese Studie wurden zwei wesentliche Änderungen vorgenommen. Die Simulationen waren instationär, da Fortschritte in der GL-Modellierung, wie in früheren Abschnitten erläutert, **genauere Schätzungen der erwarteten FWHM entlang eines Pfades ermöglichten .** Es wird erwartet, dass der Auspuff **Lamellen hat, die optimal angeordnet werden können, um die Wirkung der Abgasfahne zu minimieren. Daher wurde ein Abwärtswinkel von 45°** gewählt. Basierend auf früheren Erfahrungen konzentrierte sich die Studie auf Westwinde **mit 2 m/s und die Verarbeitung des Azimutsektors von 315°–45° .**

Die neue Studie bestätigte, dass nur der unterste Teil des optischen Pfads bei einem Zenitwinkel von 65° signifikant beeinträchtigt wird . Sie bestätigte auch, dass die Rauchfahne voraussichtlich nicht durch die Öffnungen in das Observatorium eindringt. Es wurde ein akzeptabler Temperaturunterschied von 15 K über der Umgebungstemperatur gewählt. Bei dieser Temperatur verschlechtert sich jedoch die Sicht mit zunehmender Strömungsrate, was auf mögliche Anpassungen des Ausblaswinkels und anderer geometrischer Merkmale hindeutet. Im Durchschnitt wird bei schwachen Westwinden und in niedrigen Höhenlagen di

Insgesamt scheint es, dass die Wolke den optischen Weg des Teleskops irgendwie kreuzt, wenn (a) die Windrichtung zwischen 225° und 315° liegt , **(b) die Windgeschwindigkeit weniger als nominell 4,5 m/s beträgt und (c) der Azimutwinkel des Teleskops zwischen 300° und 60°** liegt **und der Zenitwinkel des Teleskops größer als nominell 50° ist . Aus dem stochastischen Rahmen schließen wir, dass dies in etwa 0,4 % der Beobachtungszeit vorkommt.**

Die GMT-Trockenkühler befinden sich im Ost-Südosten des Geheges, weiter entfernt und bergab. Ihr Abgasstrom wurde auch in das CFD-Modell des Observatoriums integriert. Obwohl sie die Wärme vertikal und mit höherer Geschwindigkeit (5 m/s) abgeben, ist es noch unwahrscheinlicher, dass sie den optischen Pfad beeinflusst. Keine der 60 Basissimulationen, die bei der Leistungsbewertung verwendet wurden, deutet auf eine Wechselwirkung zwischen optischem Pfad und Abgasfahne hin.

Die Auswirkungen sind wie

folgt: • Validierung der Anforderungen: Temperaturdifferenz zwischen Kühlerabgas und Umgebungstemperatur, Durchflussrate, Ausrichtung und mögliche geometrische Änderungen in der Nähe des Abgasbereichs der Anlage.

8.5. TIO-Maschinenraum und Versorgungstunnel

Im Jahr 2015 wurde eine Erweiterung des CFD-Modells des Observatoriums entwickelt, die die Kabelaufwicklungsöffnung auf der Beobachtungsetage und den Versorgungstunnel sowie die Versorgungs- und Maschinenräume umfasste.

Ziel dieser Studie war die Untersuchung der Strömungsrichtung an der Kabelumwicklungsöffnung und im Versorgungstunnel, der zu erwartenden Temperaturen im Tunnel und in den Versorgungs- und Maschinenräumen sowie der Angemessenheit der Auslegungsdurchflussrate im Tunnel zur Entfernung gefährlicher Gase.

Es wurden Simulationen für eine Konfiguration durchgeführt, bei der innerhalb der Ummantelung ein Druckniveau entstehen würde, das niedrig genug wäre, um eine potenzielle Strömungsumkehr im Tunnel oder lokal an der Öffnung der Kabelumwicklung zu verursachen (mittlere bis hohe Windgeschwindigkeit, geschlossene Entlüftung, Zenit

Unter normalen Beobachtungsbedingungen gibt es nur eine Wärmediffusion durch die Kabelummantelung, die den optischen Pfad nicht wirklich beeinflusst. Bei hohen Windgeschwindigkeiten gibt es jedoch eine Strömung von der Kabelummantelungsöffnung ins Gehäuseinnere. Das Tunnelgasableitungsrohr sollte nicht in den Technikraum münden, sondern an den Abluftkanal des Technikraums angeschlossen werden. Um Wärmeverluste durch die Räume und in den Tunnel zu verhindern, sollte die Abluftströmungsrate des Technikraums 15 % höher sein

Im Jahr 2021 wurde das Modell überarbeitet und erheblich erweitert, um Konstruktionsänderungen zu berücksichtigen und eine höhere Genauigkeit zu erreichen [16]. Zu den Ergänzungen gehörten eine Schotttür, die das Tunnelvolumen im Brandfall teilt, die Hindernisse durch Zapfen und Kabelwicklungen sowie Pfeiler- und Fundamentbeton. Weitere Ziele waren die Bewertung der Auswirkungen des Schließens der Schotttür auf das Tunnelströmungsmuster und der Auswirkungen der Umleitung der abgesaugten Tunnelluft in den Maschinenraum (im Gegensatz zur direkten Umleitung in das Flüssigkeitskühlsystem ; wir hatten bereits entschieden, sie nicht in den Hauswirtschaftsraum abzulassen).

Die Studie bestätigte, dass das Schließen der Schotttür keine Auswirkungen hat (die Tunnelluft gelangt nicht in den Technikraum). Sie zeigte auch, dass das Leiten der Tunnelluft in den Technikraum die Ablufttemperatur um 2–4 K senken kann. Schließlich bestätigte sie die

Machine Translated by Google

erwartetes Abgastemperaturniveau während der Nacht, obwohl dieses Niveau in den ersten beiden Stunden nach Sonnenuntergang aufgrund der thermischen Trägheit und der Umschlagszeit des Spülvolumens (die Belastung tagsüber ist viel größer) wesentlich höher sein wird.

Die Auswirkungen sind wie

folgt: • Validierung der Anforderungen: Strömungszeichen an der Kabelwicklungsöffnung, Tunnellüfter- und Abluftströmungsraten , Ort der Tunnelgasableitung, Ablufttemperatur im Maschinenraum und Umgebungstemperatur um die Ausrüstung herum.

8.6. Segment-Ionenstrahl-Abbildung

Mehrere segmentierte Spiegelteleskope (z. B. E-ELT, TIO) verwenden Ion Beam Figuring (IBF), um die M1-Segmente auf ihre endgültigen Formspezifikationen zu bringen. Während dieses Prozesses, der viele Stunden dauern kann, steigt die Segmenttemperatur erheblich an. Die Klebeverbindungen auf der Rückseite des Segments können schwächer werden, wenn ihre Temperatur einen bestimmten Wert überschreitet

Für das TIO wurde 2020 ein transientes thermisches Modell des IBF-Prozesses entwickelt mit dem Ziel, verschiedene Scanmuster kostengünstig testen zu können, um den Prozess zu optimieren und den Temperaturanstieg zu minimieren [65]. Temperaturmessungen während der IBF-Experimente für das TIO wurden zur Validierung des Modells verwendet. Die Messungen bestanden aus einem Kalibrierungstest auf einer kleinen Probenscheibe (simuliert) und drei Segmentläufen (von denen zwei simuliert wurden), die verschiedenen Scanmustern und Geschwindigkeiten entsprachen.

Einer der wichtigsten Aspekte des Modells ist die Implementierung des Ionenstrahlflusses, der die Segmentoberfläche erreicht. Dies wird durch eine Gaußsche Verteilungsfunktion entweder auf der Oberfläche oder in einem Volumen mit festgelegter Dicke erreicht. Andere wichtige physikalische Phänomene, die berücksichtigt werden müssen, sind die diffuse Bestrahlung durch die Ionenstrahlkanone als Infrarotquelle, die Durchlässigkeit durch das Glas und die potenzielle Strahlungsreflexion auf umgebenden Trägeroberflächen. Trotz mehrerer Unsicherheiten wurde ein erster Satz von Eingaben ermittelt, der die maximal zu erwartende Temperatur auf der Rückseite des Se

8.7. Hexagonales Segmentprofilometer

Mehrere bestehende und zukünftige Observatorien verwenden segmentierte Primärspiegel, die aus sechseckigen Segmenten bestehen. Um die endgültigen Abbildungsspezifikationen dieser Segmente zu überprüfen, müssen optische Messmessungen durchgeführt werden. Für eine bestimmte Art von Messung, ein Laserprofilometer, wurde von einem TIO-Anbieter eine spezielle Kammer vorgeschlagen. Im Jahr 2012 wurde ein Modell entwickelt, um die relative Größenordnung thermischer Effekte zu untersuchen, wie etwa Segmentverformungen aufgrund einer ungleichmäßigen Temperaturverteilung in der Testkammer und eines variablen Brechungsindex entlang des Laserpfads.

Es besteht aus den folgenden Komponenten: Lasersonde, äußere Testkammer, Glasbarrieren, Segment, Stützstruktur und Luft innerhalb der Testkammer. Es handelt sich um ein Übergangsmodell, das Wärmeleitung, Konvektion und Strahlung zwischen den Komponenten und der Umgebung berücksichtigt. Zwei Konfigurationen der aktiven Testkammerbelüftung wurden in Betracht gezogen (Parallel- und Gegenstrom), Ergebnisse wurden erzielt und mögliche Strategien zur Fehlerminderung vorgeschlagen.

8.8. Werksabnahmeprüfungen

In den meisten Fällen weicht die Umgebung in einer Fabrik oder einem Labor, wo die endgültigen Abnahmetests für eine Observatoriumskomponente durchgeführt werden, von der Umgebung am tatsächlichen Observatoriumsstandort ab. Manchmal muss ein separater Satz von Anforderungen festgelegt werden: Wenn die Leistung während eines Fabriktests X ist, sollte die Leistung auf dem Berg Y sein. In solchen Fällen wird ein Modell verwendet, um die beiden zu verbinden. Nehmen wir als Beispiel die „Luftmesser“ -Baugruppe des Daniel K. Inouye Solara-Teleskops (DKIST). Es handelt sich um eine wichtige Komponente des Wärmesystems, die sowohl zum Belüften der Decke des Coude-Labors als auch als Schnittstelle zwischen Labor und Umgebung mithilfe eines Luftvorhangs dient.
Bei der Werksabnahmeprüfung zeigte die Strömungsvisualisierung des Luftvorhangs, dass die Strömung nach oben abgelenkt war, was auf einen unerwarteten Druckgradienten hindeutete, der durch Drucksensoren zwischen der Unterseite der Baugruppe und dem Fabrikboden bestätigt wurde. Es war

Machine Translated by Google

Die Hypothese, dass große Wirbel, die durch die Umkehrung des Luftmesserausflusses aufgrund der Bodennähe erzeugt wurden , den erhöhten Druck an den gemessenen Stellen verursacht haben könnten. Das tatsächliche CFD-Modell der Anordnung in der Observatoriumsinstallationskonfiguration ließ darauf schließen, dass das Luftmesser alle Leistungsanforderungen erfüllen oder übertreffen würde [66].

9. CFD-Vision 2030

Aus den vorangegangenen Abschnitten geht hervor, dass die Fähigkeit, aerothermische Strömungen mittels CFD zu simulieren, in den letzten zwei Jahrzehnten rasche Fortschritte gemacht hat und den Konstruktionsprozess in der Luft- und Raumfahrt grundlegend verändert hat. Fortschrittliche Simulationsfähigkeiten ermöglichen nicht nur eine Reduzierung des bodengestützten (und Flug-)Testbedarfs, sondern liefern auch zusätzliche physikalische Erkenntnisse und ermöglichen bessere Konstruktionen bei geringeren Kosten und Risiken. Trotz erheblicher Erfolge ist die zuverlässige Nutzung von CFD auf einen kleinen Bereich des Betriebsbereichs beschränkt geblieben , was teilweise daran liegt, dass aktuelle Methoden nicht in der Lage sind, turbulente, abgelöste Strömungen genau und/oder effizient vorherzusagen. Als relevantes Beispiel sei hier die 2015 begonnene Bemühung erwähnt, den hochauflösenden asymptotischen Wert des PSSn im Zusammenhang mit Thermal Seeing vorherzusagen **[43]. Obwohl schließlich eine Studie zur Quantifizierung der Unsicherheit mit zufriedenstellenden Ergebnissen durchgeführt wurde [28] und jüngste E-ELT-Bemühungen für lokalisierte Effekte, ohne das gesamte Observatorium aufzulösen, ebenfalls realistische Ergebnisse liefern [67], kann der Status dennoch mit den folgenden Zeilen zusammengefasst werden:** „Die Schätzung des lokalen thermischen Seeings, ausgedrückt in der PSSn-Metrik, scheint an der Grenze der machbaren oder vielmehr angemessenen Rechenleistung nicht mit der räumlichen Auflösung zu konvergieren. Inwieweit dieses Phänomen numerisch ist und inwieweit feinskalige Beiträge para Allerdings ist die Fehlertoleranz, mit der dies erreicht werden könnte, wahrscheinlich größer als die gewünschte Genauigkeit für die Durchführung einer Sensitivitätsanalyse für einzelne moderate Wärmequellen. Darüber hinaus ist auch die zeitliche Variabilität der Metrik größer als die gewünschte Genauigkeit.“

Computerwissenschaftler müssen die Frage beantworten, ob CFD an seine Grenzen gestoßen ist oder ob weitere Forschungsinvestitionen erforderlich sind, um CFD genau, effizient und zuverlässig genug zu machen, um zukünftige revolutionäre Leistungssteigerungen bei Luft- und Raumfahrtsystemen (in unserem Fall Observatorien) zu ermöglichen und eine Überprüfung durch Analyse sicherzustellen. Unter der Schirmherrschaft der NASA haben Boeing, Pratt & Whitney, die Stanford University, das Massachusetts Institute of Technology, die University of Wyoming und das National Center for Supercomputing Applications kürzlich die CFD Vision 2030-Studie durchgeführt **[68].**

Die Studie stellt einen Fahrplan für die Entwicklung von Schlüsseltechnologien dar, wie z . B. High-Performance Computing (HPC), physikalische Modellierung, Algorithmen und numerische Methoden, Geometrie- und Netzgenerierung, Wissensextraktion, multidisziplinäre Analyse und Optimierung (MDAO) mit quantifizierten Unsicherheiten und experimentelle Tests für rechnerische Validierungskampagnen. Innerhalb des American Institute of Aeronautics and Astronautics (AIAA) wurde ein CFD Vision 2030 Integration Committee eingerichtet [69], aber sein Ziel, revolutionäre Fortschritte bei rechnerischen Simulationstechnologien für die Analyse, das Design, die Zertifizierung und die Qualifikation von Luft- und Raumfahrtsystemen zu fördern, ist auch für ELTs sehr relevant. Der Fahrplan umfasst verschiedene Meilensteine, um bestimmte Herausforderungen anzugehen und zu überwinden, mit dem ultimativen Ziel, ein vollständiges Betriebssystem innerhalb eines Zeitfensters zu simulieren, das lang genug ist, um den Missionserfolg zu bewerten. Die Durchführung der Simulation und die Nachbearbeitung sowie die Schätzung der Leistungsparameter und ihrer Unsicherheiten sollten nur einige von vielen sein, und die Bearbeitungszeit sollte Wochen oder sogar Tage betragen. In der Luft- und Raumfahrtbranche ist damit beispielsweise ein manövrierendes Flugzeug mit einem vollständig funktionsfähigen Triebwerk bzw. mehreren Triebwerken sowie kritischen Subsystemen wie der Treib Eine Datenbank mit 1000 Simulationen wird ein Echtzeit-Feedbacktool mit hoher Genauigkeit während des Systembetriebs erstellen. In den nächsten Unterabschnitten werden wir untersuchen, wie sich dies auf den Fall eines bodengestützten Observatoriums übertragen lässt.

Machine Translated by Google

9.1. Geometrie und Netzgenerierung **Der**

erste Schritt in einem Modellierungsprozess ist die Festlegung der gewünschten geometrischen Genauigkeit der Simulation. Dies hängt natürlich von den beteiligten physikalischen Phänomenen und dem Simulationsumfang (Ausgaben) ab. Bei Vergleichsstudien zwischen mehreren Designoptionen müssen die geometrischen Unterschiede gut aufgelöst werden. Leider sind die geometrische Definition einer Komponente, ihre digitale Darstellung (CAD-Modell) und das tatsächlich hergestellte Produkt aufgrund von Toleranz- und Übersetzungsfehlern zwischen Softwareformaten nicht alle gleich. Dies kann manchmal Auswirkungen auf Leistungsvorhersagen haben. Die größte aktuelle Herausforderung ist jedoch die Inkompatibilität von CAD-Modellen mit Simulationsanforderungen. Dafür gibt es mehrere Gründe, der erste sind die oben genannten Toleranzfehler. Subsystemkomponenten, die zu einem vollständigen Systemmodell zusammengefügt werden, ergeben nicht immer eine geschlossene Oberfläche, die entweder für Luft (extern) oder Feststoffe (intern) vernetzt werden kann. Aerothermische Simulationsanforderungen schließen möglicherweise auch kleine Merkmale aus, von denen nicht erwartet wird, dass sie die aerothermische Umgebung beeinflussen, deren Entfernung jedoch mühsam ist und Lücken **und Löcher hinterlässt ,** die wiederum die Oberflächenkontinuität stören. **Moderne Softwareentwickler, sowohl CAD- als auch Simulationsentwickler, arbeiten aktiv an der Implementierung automatisierter Reparaturtechniken, aber die Aufteilung der Arbeit zwischen ihnen ist ein aktiver Streitpunkt. . . Auf der Simulationsseite sind nur wenige Softwarepakete in der Lage, die Geometrie innerhalb einer gewissen Toleranz zu „verhüllen“ und unerwünschte Lücken und Merkmale zu beseitigen. Diese Technik kann jedoch andere wichtige Details, die den Fluss beeinflussen, erheblich verändern, und manuelle Benutzereingriffe sind mühsam und zeitaufwändig. Daher pflegen sowohl TIO als auch GMT derzeit separate Simulations- CAD-Modelle für Subsysteme. Das Generieren und Aktualisieren dieser Modelle, um sie an den Konstruktionsfortschritt anzupassen, war eine arbeitsintensive Aufgabe. Um einer zunehmenden Anzahl von Modellen und Konfigurationen gerecht zu werden, sollten Best Practices sowohl von Systementwicklungsteams als auch von Anbietern implementiert werden. CAD-Modellierer sollten die Simulationsanforderungen verstehen und Baugruppen erstellen, die mit minimalem Aufwand in Simulationsmodelle umgewandelt werden können, um die Modellinteroperabilität zu maximieren. Simulationsmodellierer sollten weiterhin die Fortschritte bei der Re**

Wenn eine Geometriedarstellung vorhanden ist, besteht der nächste Schritt in der Generierung des Computernetzes. Es gibt zwei Hauptnetzkategorien: Oberfläche/normal zur Oberfläche u Ersteres bestimmt die Genauigkeit der berechneten Kräfte auf Strukturen und der Wärmeableitung. Letzteres ist für die korrekte Auflösung von Wirbeln in Scherschichten und Wirbelschleppen verantwortlich. Die Luft- und Raumfahrtgemeinschaft arbeitet aktiv an der automatischen Netzanpassung in Bereichen mit hohen Geschwindigkeitsgradienten , entweder durch Neuausrichtung, Morphing oder Verfeinerung. Komplexe Geometrien oder bewegliche Teile werden mit mehreren, sich überlappenden Netzen (Overset) aufgelöst, die durch Interpolation Informationen austauschen. Die Minimierung des Interpolatio An dieser Stelle wollen wir das Ziel für unsere Betriebssimulation des Observatoriums definieren: Das Teleskop wird nachgeführt, schwenkt dann zu einem anderen Ziel in anderer Ausrichtung und führt die Nachführung fort, während die Lüftungsschlitze und der Windschutz (sofern vorhanden) bei wechselnden Windverhältn

Im Jahr 2014 [70] wurde versucht, ein CFD-Modell für ein Observatorium zu entwickeln, das alle Konfigurationen, Ausrichtungen und Betriebsarten mit einem einzigen Netz auf der Grundlage von Gleitbereichen abdeckt. Es verfügte über die Möglichkeit, die Belüftungsöffnungen zu schwenken, zu öffnen und zu schließen und für Klimasimulationen in eine Tageskonfiguration umzuwandeln. Dies wurde jedoch mit bestimmten geometrischen und physikalischen Kompromissen erreicht. Der Betrieb der Belüftungsöffnungen beruhte auf Porosität, während Teile der Azimut- und Elevationsstruktur des Teleskops entfernt wurden, um ihre relative Bewegung zu berücksichtigen. Darüber hinaus wurde nachgewiesen [71] , dass gleichmäßige hexaedrische Netze , die auf das optische Volumen ausgerichtet sind, Fehler bei der Schätzung des thermischen Seeings minimieren. Daher ist Overset die einzige Möglichkeit für eine transiente Simulation mit mehreren Die Belüftung kann durch Morphing erfolgen, da die Bewegung eindimensional ist. Eine Netzanpassung um die Gehäuseöffnung und an das Kielwasser kann ebenfalls erforderlich sein, insbesondere wenn das Teleskop bei niedrigen Höhenwinkeln vom Wind weg zeigt.

Machine Translated by Google

9.2. Physikalische Modellierung, Algorithmen und numerische Methoden

Der Schwerpunkt dieses Jahrzehnts liegt auf der genauen Darstellung instationärer, turbulenter, abgelöster Strömungen, wie sie auch in geschlossenen Räumen häufig vorkommen. Es wurde gezeigt [45] , dass Reynolds-Averaged Navier–Stokes (RANS)-Modelle nicht in der Lage sind, optische Turbulenzen aufzulösen , und dass Detached Eddy Simulations (DES) oder Large Eddy Simula Derzeit werden große Anstrengungen in Richtung wandmodellierter und wandaufgelöster LES unternommen. Wirbel, wie die in Abbildung **5 beobachteten ,** lassen sich am besten in Verbindung mit räumlichen **und zeitlichen Diskretisierungsschemata höherer Ordnung auflösen. Schemata zweiter Ordnung werden durch solche dritter, vierter oder fünfter Ordnung ersetzt. Computerwissenschaftler sollten die Entwicklungen bei der Implementierung dieser Modelle in die verfügbare Software verfolgen und sie einsetzen. ELTs verwenden derzeit Modelle dritter Ordnung.**

Die Bemühungen zur Vorhersage des hochauflösenden asymptotischen Wertes der PSSn für thermisches Seeing laufen weiter. Im Fall des TIO mit einer nominalen OPD-Auflösung von ~16 mm erfordert die Auflösung des optischen Volumens allein 10 Milliarden Elemente. Daher werden nun neuartige Ansätze in Betracht gezogen, um das lokale Seeing-PSF-Verhalten anhand einer gröberen OPD-Kartenspektralanalyse zu charakterisieren [31,47,69]. Zu diesem Zweck **werden Validierungsstudien und** künstliche Intelligenz (siehe folgende Abschnitte) eingesetzt.

9.3. Hochleistungsrechnen

Industrie und staatliche Organisationen investieren jedes Jahr erhebliche finanzielle Mittel in den Kauf von Petascale-HPC-Systemen und die Entwicklung von Exascale- HPC-Systemen, die **1015 bzw. 1018 Gleitkommaoperationen pro Sekunde** (FLOPS) **ausführen können . Diese Bemühungen werden auch auf Quanten- und I Ebenso werden erhebliche Mittel und Anstrengungen aufgewendet, damit CFD-Codes die neuen Architekturen effizient nutzen können. Es gibt mehrere Gründe, die den Einsatz von HPC-Systemen für CFD-Simulationen von Observatorien**

nahelegen: • Großes Simulationsvolumen. Die zur Charakterisierung der aerothermischen Leistung des Observatoriums (Zenit- und Azimutwinkel, Windgeschwindigkeiten und -richtungen, Wärmefreisetzungsszenarien) erforderliche LUT-Auflösung kann Hunderte von Simulationen und Dutzende von Netzen ergeben. Diese Leistungs-LUTs müssen bei jeder größeren Designänderung und in regelmäßigen Abständen Teilmengen davon aktualisiert werden, um Handelsstudien zu ermöglichen; die erforderliche Bearbeitungszeit beträgt also

Monate. • Große Rechennetze. Genaues Windzittern und thermisches Sehen erfordern eine ausreichend hohe Auflösung, was mindestens mehrere zehn Millionen Elemente erfordert.

Um die Nettowärmeübertragung auf Gehäuse- und Teleskopoberflächen genau zu schätzen, sollte außerdem die konjugierte Wärmeübertragungsanalyse aktiviert werden, wobei die Gehäusestruktur, die Teleskopstruktur und andere wichtige Komponenten in derselben Simulation ebenfalls vernetzt werden müssen. Dadurch verdoppelt sich die erforderliche Maschengröße. Schließlich erfordert eine ordnungsgemäße GL-Charakterisierung und Interaktion mit dem Gehäuse ein relativ hochauflösendes Netz, das sich über die ersten 100 m über der Topographie erstreckt.

• Große Anzahl von Zeitschritten. Die Berechnung des Thermal Seeing PSSn erfordert Simulationen von mehr als 10 Minuten virtueller Zeit bei einer Abtastrate von 20 Hz oder mehr, insbesondere wenn die Reaktion eines adaptiven Sekundärspiegels richtig beurteilt werden soll. Darüber hinaus erfordern konjugierte Wärmeübertragungssimulationen viel längere Integrationszeiten, was die Anzahl der Zeitschritte drastisch erhöht, wenn auch eine hochpräzise Lösung des Luftstroms erwünscht ist.

Die integrierten Modellierungsteams von ELT arbeiten daran, die Netzgenerierung und die Simulationseinrichtung durch Skripting zu automatisieren, eine Vorgehensweise, die auch von großen Luft- und Raumfahrtherstellern angewendet wird . Produktions-CFD-Läufe werden auf einem Cloud-System von Amazon Web Services (AWS), einem Cluster von Knoten, bereitgestellt. Die Konfiguration des AWS-Clusters wird durch die Speicher- und Prozessormenge jedes Knotens, die Prozessorleistung und die für die Kommunikation zwischen den Knoten erforderliche Datenbandbreite bestimmt . **Nach der Durchführung einer Skalierbarkeitsanalyse können wir uns auf die Anzahl der Knoten des spezifischen Instanztyps einigen, die den erforderlichen Speicher, die erforderlichen Kerne und die erforderliche Netzwerkbandbreite bereitstellt. Der automatisierte Prozess konfiguriert und erstellt den Cluster, lädt die Simulationsdatei hoch und starte**

Machine Translated by Google

Die Durchführung von etwa 100 CFD-Läufen könnte leicht dazu führen, dass ein HPC- Cluster mit 500 Knoten erforderlich wäre, wenn wir alle Läufe gleichzeitig starten möchten.

Betrachten wir das Beispiel einer GMT AWS CFD-Simulation [59]. Nach dem Start einer Simulation wird ein lokaler Prozess gestartet, der die lokal erzeugten Daten mit einem Remote-S3-Repository synchronisiert. Einige Dateien lösen nach dem Hochladen auf S3 Lambda-Funktionen aus, die die Daten in den Dateien in neue Datenprodukte umwandeln, die mit den IM-Eingabedateien kompatibel sind . Jede CFD-Simulation generiert (derzeit) ~1 TB Daten, was erfordert, dass die lokale Festplatte mit dem höchsten verfügbaren Lese-/ Schreib-IO-Durchsatz konfiguriert wird. Am Ende jeder Simulation wird ein Nachbearbeitungsskript ausgeführt, das Daten extrahiert und verwendet, die erst nach Abschluss ei

Die Schritte eines CFD-Parameter-Space-Sweeps sind wie folgt: • Konfigurieren

und Erstellen des HPC-Clusters mit ParallelCluster (die Knoten werden angefordert als

Spot-Instanzen); •

Laden Sie die CFD-Konfigurationsdateien in den Cluster hoch.

• Starten Sie die CFD-Simulationen auf dem Cluster. •

Starten Sie für jede Simulation den Synchronisierungsprozess. •

Bearbeiten Sie für jede abgeschlossene Simulation die Ausgabedaten nach.

• Beenden Sie für jede abgeschlossene und nachbearbeitete Simulation den Synchronisierungsprozess.

• Löschen Sie für jede beendete Simulation die lokalen Daten.

Alle diese Schritte wurden früher manuell von einem Bediener ausgeführt, der für die Überwachung und Verwaltung des gesamten Simulationszyklus verantwortlich ist. Das GMT IM ist dabei, sie durch einen optimierten, ereignisgesteuerten Betriebsablauf zu ersetzen, der auf AWS-Diensten basiert, um den Simulationszyklus zu überwachen und zu verwalten. Beispielsweise wird eine CFD-Konfigurationsdatei in ein S3-Repository hochgeladen, das wiederum ein Ereignis auslöst, das die Datei an den HPC-Cluster überträgt, in dem der CFD-Fall ausgeführt wird. Die zugehörigen Prozesse werden automatisch sequenziert und gestartet, was erhebliche Einsparungen bei der manuellen Arbeit ermöglicht.

9.4. Wissensextraktion **Jede**

HPC-Simulation generiert Dateien mit 3D-Temperaturfeldern für die thermische Sicht, 2D-Druckkarten auf den optischen Oberflächen für die Windunschärfe und integrierte Kräfte auf verschiedene Komponenten bei jedem Zeitschritt. Darüber hinaus werden verschiedene „Screenshots“ variabler Konturen zu Animationszwecken gespeichert. Mit dem zunehmenden Simulationsvolumen, der Maschengröße und der Anzahl der Zeitschritte wird die Datenmanipulation und Nachbearbeitung sowohl aus Kommunikationsgründen als auch aufgrund der Verlangsamung der Simulation zu einer großen Herausforderung. Dieser Prozess muss auch automatisiert werden. Sobald die Simulation läuft, ist ein Synchronisierungsprozess mit einem Remote-AWS-Repository mit ausreichend Speicherplatz zum Empfangen der Ausgabedatendateien der Simulation erforderlich. Zusätzliche Skripte verarbeiten die Simulationsdaten nach, die Daten werden lokal gespeichert, der Synchronisierungsprozess wird beendet und die Remote-Daten werden gelöscht.

9.5. Validierung

Die CFD Vision 2030 forderte Anstrengungen zur Entwicklung und Durchführung integrierter experimenteller Tests zur Unterstützung einer rechnergestützten Validierungskampagne, die die neuen Modelle und Methoden vergleichen wird. Die astronomische Gemeinschaft hat die Testumgebungen bereits eingerichtet: bestehende Observatorien. Angesichts der begrenzten Datenmenge zum Kuppelseeing für bodengebundene Observatorien [56,57,72,73], ihres erheblichen Beitrags zur Bildverschlechterung und der bereits erwähnten Modellierungsbeschränkungen ist es wichtig, die CFD-Methodik und -Ergebnisse weiterhin anhand von Daten von in Betrieb befindlichen Teleskopen zu validieren. Derzeit gibt es Bemühungen, Überwachungsinstrumente für das Kuppelseeing zu bauen [73,74].

Ebenso basiert die Schätzung des Windzitterns der Teleskopstruktur auf CFD-Simulationen, die experimentell nicht vollständig validiert wurden. Eine der größten Unsicherheiten liegt in der Verbindung zwischen Oberflächendruckschwankungen und den daraus resultierenden Drehmomenten der Teleskopmontierung. Windkanaltests mit physikalischen Modellen könnten durchgeführt werden, um die Analyse der Kräfte und Drehmomente zu validieren, die durch Windstöße auf die Montierung ausgeübt werden. Genauer gesagt ist eine Validierung der Ergebnisse der dynamischen Windlastmodellierung erforderlich für

Machine Translated by Google

sowohl M1-Kolben- als auch Halterungskräfte am oberen Ende, sowohl im Hinblick auf die Vorhersage von Differenzdruckschwankungen als auch auf die Beziehung zwischen Geschwindigkeitsschwankungen, instationären Kräften und dem daraus resultierenden Halterungsdrehmoment.

9.6. MDAO

Mithilfe einer Reihe von CFD-Simulationsergebnissen sowie Messungen von Observatorien und Windkanälen kann eine Datenbank mit mehreren Genauigkeiten erstellt werden. Dies erweitert die aktuellen stochastischen Rahmenbedingungen, um eine Unsicherheitsquantifizierung für die verschiedenen Eigenschaften und Datenquellen durchführen zu können. Außerdem kann das Observatorium diese Datenbank zur Leistungsschätzung und **Betriebsoptimierung in Echtzeit nutzen .** Dies ist insbesondere dann nützlich, wenn schnelle technische Bewertungen **durchgeführt werden müssen, um Probleme während der Inbetriebnahme des Observa**

Mehrere der bereits definierten Strategien zur Fehlerminderung, wie z. B. Klimaanlagen tagsüber und Belüftung nachts, sind auf Umgebungsparameter angewiesen. Die aktuelle Modellierung hängt von bestimmten Referenzbedingungen gegen den Wind ab, die zudem im Parameterraum grob diskretisiert sind. Die von den Observatoriumsbetreibern verwendeten Informationen basieren jedoch auf verfügbaren Daten von technischen Sensoren und einem Standort- oder Umgebungsüberwachungssystem , das Temperatur, Windgeschwindigkeit, Windrichtung, atmosphärische Sicht usw. beschreibt. Es ist zu erwarten, dass diese Messungen von den Referenzbedingungen der Modellierung abweichen und durch die Einrichtungen auf dem Gipfel beeinflusst werden können. Daher sollte ein Betriebsplan erstellt werden, um die LUTs auf diese Messwerte neu zu referenzieren. Sensitivitätsanalysetechniken und Methoden künstlicher neuronaler Netze (KNN), die die Simulationsergebnisse an den Überwachungsstandorten als Trainingsdaten verwenden, können eingesetzt werden, um Änderungen der Systemreaktion auf variierende Parametereingaben nahezu in Echtzeit (im Minuten- oder sogar Sekundenbereich) vorherzusagen. Die Anwendbarkeit dieses Echtzeit-Tools umfasst die Abschwächung der thermischen Sicht und der Windlast durch den Betrieb von Entlüftungsöffnungen sowie das Wissen über dominante turbulente Längenskalen, Teleskop-Ausrichtungsfehler und Strategien zur Korrektur thermischer Fehlausrichtungen auf der Grundlage von Temperatursensoren. In Kombination mit den deterministischen optischen Fehlern und der aktuell gemessenen atmosphärischen Sicht wird somit jederzeit eine Momentaufnahme der Systemleistung in der gelieferten IQ-Metrik der Wahl verfügbar sein. Schließlich könnte sogar eine Leistungsprognose durch die Kopplung der Ergebnisse an rechnerische Randbedingungen möglich sein, die Ausgaben eines atmosphärischen Mesoskalenmodells oder eines anderen Wettervorhersagedienstes sind . In dem Maße, in dem die Niveaus und sogar das zeitliche Verhalten der atmosphärischen Sicht, der Windgeschwindigkeit und der Temperatur für die kommende Nacht einige Stunden im Voraus vorhergesagt werden können, können gelieferte IQ-Szenarien generiert werden, die eine Warteschlangenbeobachtung ermöglichen, d . h. die Auswahl der Reihenfolge der Ziele, des Betriebsmodus (begrenzte Sicht oder adaptive Optik) und des Instruments während der ganzen Nacht, um den IQ und die wissenschaftlichen Ergebnisse zu optimieren.

Der Status der aerothermischen Modellierung von Observatorien, die bestehenden Herausforderungen und mögliche Abhilfemaßnahmen sind in Tabelle 2 zusammengefasst . Wie erwartet **ist die Finanzierung die größte Herausforderung, da die Observatorien nicht gewinnorientiert und rein** wissenschaftlich ausgerichtet sind. Ein zukünftiges Problem kann **auch der Klimawandel/Wetterwandel sein, da ELTs voraussichtlich bis zum Ende des Jahrhunderts in Betrieb sein werden. Beachten Sie, dass kleinere Unterstützungsstudien kein Problem darstellen und**

Tabelle 2. Modellierungsstatus des Observatoriums.

Kategorie	Status	Herausforderungen	
Stochastische und thermische Netzwerkmodelle unter Verwendung mehrjähriger Umweltaufzeichnungen	Entwickelt	Klimawandel.	Abhilfemaßnahmen: Umweltüberwachungssysteme vor Ort und regelmäßige Aktualisierungen der A
Konjugierte Wärmeübertragungsmodelle für Subsysteme	Teilweise entwickelt; die meisten Instrumente befinden sich noch in der Entwicklung und CADs sind nicht ausgereift	CAD-Aufbereitung/Aktualisierung.	CAD-Konfigurationskontrolle; Vernetzung nach Teilen, um die Aktualisierungszeit während der Designentwicklung zu minimieren.

Machine Translated by Google

Tabelle 2. Fortsetzung

Kategorie	Status		Gegenmaßnahmen
CFD-Modelle des Observatoriums	Entwickelt, aber Overset Mesh Motion und Mesh Adaptivity sind noch nicht implementiert	Herausforderungen: Unzureichende Finanzierung der Rechenressourcen und/oder zu wenig Zeit bis zur Fertigstellung. Die gleichzeitige Simulation mit vielen Subsystemmodellen ist rechenintensiv. Die Simulation bei der gewünschten OPD-Auflösung ist rechnerisch nicht möglich. Verarbeitung Ihrer Daten. Validierung.	Erwarten Sie zukünftig mehr Rechenleistung bei geringeren Kosten. Entwickeln Sie ROM- und ANN-Modelle. In-situ-Verarbeitung. Messungen an bestehende Observatorien.
ROM- und ANN-Modelle für den Observatoriumsbetrieb (AIVC-Phase)	Frühe Entwicklung	Unzureichende Finanzierung für erforderliche Vollzeitäquivalente und Rechenressourcen. Unsicherheit über die Anzahl der Parameter, die ANNs stabil verarbeiten können, und die Anzahl der Simulationen, die für das Training erforderlich sind.	Falls die Finanzierung weiterhin unzureichend ist, gehen Sie zum operativen Geschäft über und prüfen Sie alternative Finanzierungsmöglichkeiten. Teilen Sie die Aufgaben in einfachere Aufgaben auf, mit wenigen Ein-/Ausgaben pro Aufgabe. Testen Sie die Software auf vorhandenen Observatorien.

10. Schlussbemerkungen In

diesem Dokument wurde versucht, einen Überblick über die Rolle der aerothermischen Modellierung in der erdgebundenen Astronomie in den letzten beiden Jahrzehnten zu geben und einen möglichen Fahrplan für das nächste Jahrzehnt vorzuschlagen.

Von der GL-Charakterisierung bis zur aerodynamischen Optimierung des Gehäuses, der Klimatisierung des Observatoriums tagsüber, der Kontrolle der Wärmeabgabe nachts und der Unterstützung bei der Konstruktion von Subsystemen sind CFD und konjugierte Wärmeübertragungsmodelle zu unverzichtbaren Werkzeugen in der ELT-Systemtechnik geworden . Es wurden umfangreiche Systemmodellierungen und Simulationen durchgeführt, um die Systemleistung vorherzusagen und anhand technischer Budgets (z. B. Bildqualität, Wärmeableitung) und Anforderungen (z. B. Zielgenauigkeit, Umwelteinschränkungen) zu bewerten. Solche Leistungsvorhersagemodelle unterstützen vier wichtige Systemtechnikfunktionen: Anforderungsvalidierung, Verifizierung, Risikominderung und Kompromissstudien. Simulationen haben die ELT-Designentscheidungen erheblich beeinflusst. Im heutigen Handelsbereich gibt es vielleicht weniger Möglichkeiten, das Design zu ändern, als stattdessen Integration, Verifizierung, Inbetriebnahme und Fehlerbehebung zu unterstützen sowie die Le

Während die Projekte ihren Weg der Erforschung und Entdeckung zielstrebig fortsetzen, werden auch die Bemühungen zur Bewältigung der neuen Herausforderungen fortgesetzt. Mithilfe neuartiger Techniken und moderner Technologien wird die aerothermische Modellierung neue Entdeckungen machen, die den Erfolg dieses bahnbrechenden Ingenieursvorhabens sicherstellen.

Beiträge der Autoren: Konzeptualisierung, KV und GA; Methodik, KV; Software, KV und RC; Validierung, KV; formale Analyse, KV und RC; Untersuchung, KV; Ressourcen, KV und RC; Datenkuratierung , KV und RC; Schreiben – Vorbereitung des Originalentwurfs, KV; Schreiben – Überprüfung und Bearbeitung, KV; Visualisierung, KV und RC; Überwachung, GA, GT und RC; Projektverwaltung, GA, GT und RC; Mittelbeschaffung, GA, GT und RC. Alle Autoren haben die veröffentlichte **Version des Manuskripts gelesen und stimmen ihr zu .**

Finanzierung: Diese Forschung wurde von TIO, Vertragsnummer TIO.BUS.CON.24.063 und GMTO, Vertragsnummer GMT-CON-01543, finanziert.

Datenverfügbarkeitserklärung: Die in dieser Studie präsentierten Daten sind nicht ohne weiteres verfügbar, da sie sich in zugangskontrollierten Repositorien befinden. Einige sind nicht mehr abrufbar. Die meisten dieser Studien laufen noch und das Design ist noch nicht abgeschlossen. Anfragen zum Zugriff auf die Datensätze sind an **gtrancho@tmt.org und rconan@gmto.org zu richten .**

Danksagungen: Das TMT International Observatory (TIO) dankt den TIO-Mitgliedern und der Gordon and Betty Moore Foundation für ihre Unterstützung. Die Mitglieder und ihre jeweiligen Kooperationsinstitutionen sind: California Institute of Technology (Caltech); das Nati

Machine Translated by Google

Research Council of Canada (NRC-CNRC); Association of Canadian Universities for Research in Astronomy (ACURA); Department of Science and Technology, Government of India (DST); Department of Atomic Energy of India (DAE); National Institute of Natural Sciences of Japan (NINS); National Astronomical Observatory of Japan (NAOJ); und die Regents of the University of California (UC). Diese Arbeit wurde auch von der Association of Universities for Research in **Astronomy (AURA) und der US National Science Foundation (NSF) unterstützt .**

Diese Arbeit wurde von der GMTO Corporation unterstützt, einer gemeinnützigen Organisation, die im Auftrag eines internationalen Konsortiums von Universitäten und Institutionen betrieben wird: Arizona State University, Astronomy Australia Ltd., Australian National University, Carnegie Institution for Science, Harvard University, Korea Astronomy and Space Science Institute, São **Paulo Research Foundation, Smithsonian Institution, University of Texas at Austin, Texas A&M University, University of Arizona, University of Chicago und Weizmann Insti**

Interessenkonflikte: Die Autoren erklären, dass keine Interessenkonflikte vorliegen.

Verweise

1. **European Extremely Large Telescope. Online verfügbar: https://elt.eso.org (abgerufen am 10. Juni 2024).**
2. **Giant Magellan Telescope. Online verfügbar: https://giantmagellan.org (abgerufen am 10. Juni 2024). 3.**
Thirty Meter Telescope International Observatory. Online verfügbar: https://www.tmt.org (abgerufen am 10. Juni 2024).
4. **Angeli, GZ; Roberts, S.; MacMynowski, D.; Fitzsimmons, J.; Dunn, J.; Vogiatzis, K.; Sheinis, A.** Modellierungstools zur Schätzung der Leistung des Thirty Meter Telescope: Ein integrierter Ansatz; **SPIE 5497(24); SPIE: Bellingham, WA, USA, 2004.**
5. **Conan, R.; Angeli, G.; Sitarski, B.; Dbusch, C.; Fitzpatrick, H.; Romano, H.; Vogiatzis, K.; Das, K.** GMTO-Ansatz zur Integration Modellbasierte Systemtechnik; **SPIE 11450(26); SPIE: Bellingham, WA, USA, 2020.**
6. **Angeli, GZ; Vogiatzis, K.** Statistischer Ansatz zur Systemtechnik für das Thirty Meter Telescope; **SPIE 7738(45); SPIE: Bellingham, WA, USA, 2010.**
7. **Vogiatzis, K.; Das, K.; Sitarski, B.; Schwartz, D.; Conan, R.; Angeli, GZ** Verwendung eines stochastischen Ansatzes zur Schätzung der aerothermischen Leistung des Giant Magellan Telescope; **AIAA 2019-2319; American Institute of Aeronautics and Astronautics: Reston, VA, USA, 2019.**
8. **Vogiatzis, K.; Angeli, GZ** Monte Carlo Simulation Framework für TMT; **SPIE 7017(29); SPIE: Bellingham, WA, USA, 2008.**
9. **Sitarski, B.; Vogiatzis, K.; Conan, R.; Angeli, GZ; Goodrich, R. Leistungsschätzungen für das Giant Magellan Telescope mittels statistischer Analyse. In Proceedings of the AO4ELT6, Quebec City, QC, Kanada, 9.–14. Juni 2019.**
10. **Seo, B.-J.; Angeli, GZ; Nelson, J. Analyse der normalisierten Punktquellenempfindlichkeit als Leistungsmaß für große Teleskope.** J. Appl. Opt. **2009,** 48, **5997–6007. [CrossRef] [PubMed]**
11. **Angeli, GZ; Seo, B.-J.; Nissly, C.; Troy, M.** Eine praktische Leistungsmetrik für Teleskope zur Bildgebung durch Turbulenzen; **SPIE 8127(4); SPIE: Bellingham, WA, USA, 2011.**
12. **Conan, R.** PSSn als Funktion der Feldaberration und der Polierrückstände des M1-Segments; **GMT-DOC-01940; GMTO Corporation: Pasadena, CA, USA, 2017.**
13. **Siemens Simcenter STAR-CCM+. Online verfügbar: https://plm.sw.siemens.com/en-US/simcenter/fluids-thermal-simulation/star-ccm/ (abgerufen am 10. Juni 2024).**
14. **Mathworks MATLAB. Online verfügbar: https://www.mathworks.com/products/matlab.html (abgerufen am 10. Juni 2024).**
15. **Zago, L. Der Einfluss der lokalen atmosphärischen Umgebung auf astronomische Beobachtungen. Doktorarbeit, Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, Waadt, Schweiz, 1995.** Thèse **Nr. 1394.**
16. **Vogiatzis, K.; Thompson, H.; Trancho, G.** Aerothermische Unterstützung für die Subsysteme des TMT International Observatory Enclosure und der Gipfeleinrichtungen ; **SPIE 13094(27); SPIE: Bellingham, WA, USA, 2024.**
17. **Sitarski, B.; Vogiatzis, K.** HVAC-Dimensionierung – Thermische Simulationen; **GMT-DOC-03957; GMTO Corporation: Pasadena, CA, USA, 2019.**
18. **Vogiatzis, K.; Fitzpatrick, H.; Conan, R.; Ranka, T.; Muller, G.; Xin, B.; Ashby, D.** GMT-Primärspiegel-Thermokontrollsystem und Thermal Deformation Modeling Framework; **SPIE 13099(102); SPIE: Bellingham, WA, USA, 2024.**
19. **Vogiatzis, K.; De Young, DS Standortcharakterisierung durch den Einsatz von Computational Fluid Dynamics. In Proceedings des 2. Baeckaskog-Workshops über extrem große Teleskope, Schloss Baeckaskog, Schweden, 9.–11. September 2003. SPIE 5382(74).**
20. **Vogiatzis, K.; Hiriart, D. Numerische Windmodellierung für die San Pedro Martir Sierra in Baja California.** Rev. Mex. Astron. Astrophys. **2004,** 40, **81–98.**
21. **Els, S.; Vogiatzis, K.** TMT Untersuchungen zum Einfluss kurzfristiger Änderungen lokaler thermodynamischer Bedingungen auf das Seeing: CFD vs. Beobachtungen; **SPIE 6267(55); SPIE: Bellingham, WA, USA, 2006.**
22. **Els, S.; Vogiatzis, K. Enthüllung des Beginns der Konvektion in terrestrischen Planetenatmosphären. In Proceedings of the IAU S239 Kongress der Astrophysik, Prag, Tschechische Republik, 21.–25. August 2006.**
23. **Els, S.; Schöck, M.; Skidmore, W.; Travouillon, T.; Rätsel, R.; Vogiatzis, K.; Wang, L.; Bustos, E.; Seguel, J.; Vasquez, J.; et al. Beobachtungen der turbulenten atmosphärischen Bodenschicht während der Standorttests für das Thirty Meter Telescope (TMT). In Proceedings of the EMS 2007-A-00109, Jahrestagung der European Meteorological Society und 8. Europäische Konferenz für Anwendungen der Meteorologie, San Lorenzo de El Escorial, Spanien, 1.–5. Oktober 2007.**

Machine Translated by Google

24. **Els, S.; Schöck, M.; Skidmore, W.; Travouillon, T.; Rätsel, R.; Bustos, E.; Seguel, J.; Vasquez, J.; Vogiatzis, K.; Walker, D.; et al. Die Standorttests für das Thirty Meter Telescope und seine potenzielle Rolle bei der Entwicklung kurzfristiger Prognosen von Beobachtungsbedingungen .** Astron. Nachrichten **2007,** 328, **7.**
25. **Els, SG; Vogiatzis, K.; Otarola, A.; Schöck, M.; Travouillon, T.; Riddle, RL; Skidmore, WA** Optische Turbulenzen über Bergen in 3D gesehen; **SPIE 7733(58); SPIE: Bellingham, WA, USA, 2010.**
26. **Das, K.; Vogiatzis, K.; Angeli, GZ; Rosenthal, W.; Bouchez, A.; Goodrich, W.** GMT Aerothermal Modeling Validation through Site Messung; **SPIE 10705(2)s; SPIE: Bellingham, WA, USA, 2018.**
27. **Vogiatzis, K.; Thompson, H.; Roberts, S.; Dumas, C.** Bodenschichtstudien für den alternativen TMT-Standort; **SPIE 10705(61); SPIE: Bellingham, WA, USA, 2018.**
28. **Vogiatzis, K.; Thompson, H.; Rogers, J.; Trancho, G.** Über die Beziehung zwischen thermischem Sehen und Observatoriumsdesign; **SPIE 12187(74); SPIE: Bellingham, WA, USA, 2022.**
29. **De Young, DS; Vogiatzis, K. Numerische Simulationen von Strömungen in extrem großen Teleskopgehäusen. In Proceedings of the SPIE 5382-44, 2. Baeckaskog-Workshop zu extrem großen Teleskopen, Schloss Baeckaskog, Schweden, 9.–11. September 2003.**
30. **MacMynowski, DG; Angeli, GZ; Vogiatzis, K.; Fitzsimmons, J.; Padin, S.** Parametrische Modellierung und Kontrolle windinduzierter Schwingungen an Teleskopen; **SPIE 5497(26); SPIE: Bellingham, WA, USA, 2004.**
31. **Vogiatzis, K.; Segurson, A.; Angeli, GZ** Schätzung der Auswirkung von Windlasten auf die Leistung extrem großer Teleskope mit Hilfe der numerischen Strömungsmechanik; **SPIE 5497(30); SPIE: Bellingham, WA, USA, 2004.**
32. **MacMynowski, DG; Blaurock, CA; Angeli, GZ; Vogiatzis, K.** Modellierung der Windböen des Thirty Meter Telescope; **SPIE 6271(25); SPIE: Bellingham, WA, USA, 2006.**
33. **MacMynowski, DG; Vogiatzis, K.; Angeli, GZ; Fitzsimmons, J.; Nelson, EJ Windlasten auf erdgebundenen Teleskopen.** Appl. Opt. **2006,** 45, **7912–7923. [CrossRef]**
34. **Sebag, J.; Vogiatzis, K.** Wärmebedarf von LSST-Kameras mittels CFD und Thermal Seeing-Modellierung; **SPIE 7738(13); SPIE: Bellingham, WA, USA, 2010.**
35. **Sebag, J.; Vogiatzis, K.; Barr, J.; Neill, D.** LSST Summit Enclosure: Optimierung des Anlagendesigns mittels aerothermischer Modellierung; **SPIE 8449(3); SPIE: Bellingham, WA, USA, 2012.**
36. **Cho, M.; Vogiatzis, K.; Sebag, J.; Neill, D.** Windreaktionen des LSST-Sekundärspiegels; **SPIE 8449(4); SPIE: Bellingham, WA, USA, 2012.**
37. **Sebag, J.; Vogiatzis, K.** Schätzung des Dome Seeing für LSST; **SPIE 9150(26); SPIE: Bellingham, WA, USA, 2014.**
38. **Vogiatzis, K.; Xin, B.; Claver, C.; Angeli, GZ; Selvy, B.** Dome Seeing Sensitivity Analysis for LSST; **SPIE 10705(3); SPIE: Bellingham, WA, USA, 2018.**
39. **Marchiori, G.; Rampini, F.; Mian, S.; Ghedin, L.; Marcuzzi, E.; Bressan, R.** ELT-Kuppel und Teleskop: Überblick über die Leistungsanalyse; **SPIE 10705(13); SPIE: Bellingham, WA, USA, 2018.**
40. **Vogiatzis, K.; MacMartin, D.; Wang, L.; Trancho, G.** Das Verfahren zur Schätzung der aerothermischen Leistung des TMT International Observatory; **SPIE 13099(100); SPIE: Bellingham, WA, USA, 2024.**
41. **Vogiatzis, K.; Das, K.; Angeli, GZ; Bigelow, B.; Burgett, W.** Computational Fluid Dynamics Modeling of GMT; **SPIE 10705(28); SPIE: Bellingham, WA, USA, 2018.**
42. **MacMartin, DG; Vogiatzis, K.** Instationäre Windlasten für TMT: Ersetzen parametrischer Modelle durch CFD; **SPIE 9150(25); SPIE: Bellingham, WA, USA, 2014.**
43. **Vogiatzis, K.; Thompson, H.** Über die Präzision der Aero-Thermal-Modellierung für TMT; **SPIE 9911(40); SPIE: Bellingham, WA, USA, 2016.**
44. **Vogiatzis, K.** Auswirkungen von Vernetzung, Solver-Parametern und Nachbearbeitung auf die aerooptische Bildqualitätsmetrik-Modellierung; **AIAA 2018-1502; Amerikanisches Institut für Luft- und Raumfahrt: Reston, VA, USA, 2018.**
45. **Das, K.; Vogiatzis, K.; Angeli, GZ** Bewertung von Turbulenzmodellen und Netzverfeinerung für aerooptische Simulationen großer erdgebundener Teleskope; **AIAA 2018-4156; Amerikanisches Institut für Luft- und Raumfahrt: Reston, VA, USA, 2018.**
46. **Vogiatzis, K.** Thermische Modellierungsumgebung für TMT; **SPIE 7738(11); SPIE: Bellingham, WA, USA, 2010.**
47. **Vogiatzis, K.; Conan, R.** Vorläufige Bewertung des GMT HVAC-Systems mittels CFD; **GMT-DOC-03938; GMTO Corporation: Pasadena, CA, USA, 2019.**
48. **Thompson, HA; Vogiatzis, K.** Wärmebilanz und Wärmemanagement des TMT-Observatoriums; **SPIE 9150(83); SPIE: Bellingham, WA, USA, 2014.**
49. **Pazder, J.; Vogiatzis, K.** Seeing-Schätzungen für Kuppel und Spiegel des Thirty Meter Telescope; **SPIE 7017(26); SPIE: Bellingham, WA, USA, 2008.**
50. **Conan, R.; van Dam, M.; Vogiatzis, K.; Das, K.; Bouchez, A. Modellierung der Kuppelsicht des Giant Magellan Telescope mittels Dynamiksimulationen. In Proceedings of the AO4ELT6, Quebec City, QC, Kanada, 9.–14. Juni 2019.**
51. **Vogiatzis, K.; Angeli, GZ** Strategien zur Schätzung von Spiegel- und Kuppelseeing für TMT; **SPIE 6271(27); SPIE: Bellingham, WA, USA, 2006.**
52. **Vogiatzis, K.; Upton, R.** TMT-Studien zur Modellierung von Thermal Seeing: Validierung von Spiegel- und Kuppelseeing-Modellen; **SPIE 6271(48); SPIE: Bellingham, WA, USA, 2006.**
53. **McMynowski, DG; Colavita, MM; Skidmore, WA; Vogiatzis, K.** Primärspiegel-Dynamische Störungsmodelle für TMT: Vibration und Wind; **SPIE 7738(14); SPIE: Bellingham, WA, USA, 2010.**
54. **Vogiatzis, K.; McMynowski, DG** Instationäre aerodynamische Simulationen für die Windbelastung des TMT-Primärspiegelsegments; **SPIE 7738(61); SPIE: Bellingham, WA, USA, 2010.**
55. **Soler, M.; Vogiatzis, K.; Cozar-Castellano, J.; Bonaque, S.; Bello-Asin, M.; Nunez Cagigal, M.; Baretto Cabrera, M.** Local Seeing Analyse für das European Solar Telescope; **SPIE 13094(153); SPIE: Bellingham, WA, USA, 2024.**

Machine Translated by Google

56. Vogiatzis, K.; Otarola, A.; Skidmore, W.; Travouillon, T.; Angeli, GZ Validierung lokaler Thermalseeing-Modelle durch Messungen im Observatorium; **SPIE 8449(1); SPIE: Bellingham, WA, USA, 2012.**

57. Salmon, D.; Benedict, T.; Baril, M.; Wang, S.-Y.; Thanjavur, K.; Vogiatzis, K.; Racine, R. Eine fluiddynamische Studie der CFHT-Kuppel mittels CFD und Wassertunneltests; **SPIE 8449(2); SPIE: Bellingham, WA, USA, 2012.**

58. Vogiatzis, K. Aerothermal modeling framework for TMT. In Proceedings of the Integrated Modeling of Complex Optomechanical Systems, Kiruna, Schweden, 15.–17. August 2011. SPIE 8336(10).

59. Vogiatzis, K.; Fitzpatrick, H.; Das, K.; Conan, R.; Angeli, G.; Sitarski, B.; Romano, R.; Dribusch, C.; Walls, B. Aerothermische Modellierung zur Designunterstützung, Anforderungsvalidierung und Leistungsbewertung von GMT-Subsystemen; **SPIE 12187(22); SPIE: Bellingham, WA, USA, 2022.**

60. Cho, M.; Corredor, A.; Vogiatzis, K.; Angeli, GZ Thermische Analyse der TMT-Teleskopstruktur; **SPIE 7738(12); SPIE: Bellingham, WA, USA, 2010.**

61. Vogiatzis, K.; Sadjadpour, A.; Roberts, S. Thermisches Modell der TMT-Teleskopstruktur; **SPIE 9150(72); SPIE: Bellingham, WA, USA, 2014.**

62. Fitzpatrick, H.; Conan, R.; Vogiatzis, K.; Das, K.; Dribusch, C. Ein rechnergestützter Rahmen für die Untersuchung des thermomechanischen Verhaltens des Giant Magellan Telescope im Tagesverlauf; **SPIE 13099(98); SPIE: Bellingham, WA, USA, 2024.**

63. Vogiatzis, K.; Boyer, C.; Wei, K.; Tang, J.; Ellerbroek, B. Aero-Thermal Simulations of the TMT Laser Guide Star Facility; **SPIE 9148(243); SPIE: Bellingham, WA, USA, 2014.**

64. Vogiatzis, K.; Wang, L.; Trubey, M.; Irarrazaval, B.; Boyer, C. Aerothermische Modellierung des Laserleitfadens des TMT International Observatory Star Facility; **SPIE 13099(101); SPIE: Bellingham, WA, USA, 2024.**

65. Vogiatzis, K. Ion Beam Figuring Modeling; **Dokument TMT.SEN.TEC.20.070; TMT International Observatory: Pasadena, CA, USA, 2020.**

66. McQuillen, I.; Phelps, L. Werksabnahmeprüfung und Modellverfeinerung für die Luftmesserbaugruppe des Sonnenteleskops von Daniel K. Inouye; **SPIE 10705(25); SPIE: Bellingham, WA, USA, 2018.**

67. Martins, D.; Holzlohner, R.; Verinaud, C.; Kleinclaus, C. Transienter Wellenfrontfehler durch gekühlte Luft im Windrichtungsabwärts von Teleskopspinnen; **SPIE 12187(12); SPIE: Bellingham, WA, USA, 2022.**

68. CFD Vision 2030-Studie. Online verfügbar: http://ntrs.nasa.gov/search.jsp?R=20140003093 (abgerufen am 10. Juni 2024).

69. Website des AIAA CFD Vision 2030 Integration Committee. Online verfügbar: https://cfd2030.com (abgerufen am 10. Juni 2024).

70. Vogiatzis, K. Transient Aero-Thermal Simulations for TMT; **SPIE 9150(24); SPIE: Bellingham, WA, USA, 2014.**

71. Vogiatzis, K.; Thompson, H.; Roberts, S. Zur Präzision aerothermischer Simulationen für TMT: Revisited; **SPIE 10705(4); SPIE: Bellingham, WA, USA, 2018.**

72. Racine, R.; Salmon, D.; Cowley, D.; Sovka, J. Spiegel, Kuppel und natürliches Sehen am CFHT. Publ. Astron. Soc. Pac. **1991,** 103, **1020–1032.** [Querverweis]

73. Bustos, E.; Tokovinin, A. Dome Seeing Monitor und seine Ergebnisse für das 4-m-Blanco-Teleskop; **SPIE 10700; SPIE: Bellingham, WA, USA, 2018.**

74. Lai, O.; Withington, K.; Chun, MR; Laugier, R. Untersuchung von Bodenschicht- und Kuppelturbulenzen in astronomischen Observatorien mithilfe eines lokalisierten optischen Turbulenzsensors. In Proceedings of the Imaging and Applied Optics Congress, Washington, DC, USA, 22.–26. Juni 2020.

Haftungsausschluss/Anmerkung des Herausgebers: Die in allen Veröffentlichungen enthaltenen Aussagen, Meinungen und Daten sind ausschließlich die der einzelnen Autoren und Mitwirkenden und nicht die von MDPI und/oder den Herausgebern. MDPI und/oder die Herausgeber lehnen jegliche Verantwortung für Personen- oder Sachschäden ab, die aus den im Inhalt erwähnten Ideen, Methoden, Anweisungen oder Produkten resultiere

Machine Translated by Google

Berechnung

MDPI

Artikel

Degn-Harrison-Reaktions-Diffusionsmodell mit gebrochener Ordnung: Dynamik der Stabilität und Synchronisation in begrenzter Zeit

Ma'mon Abu Hammad [1], Issam Bendib[2], Waseem Ghazi Alshanti [3], Ahmad Alshanty[4], Adel Ouannas [5], Amel Hioual 5,* und Shaher Momani 6,7

1 Fakultät für Mathematik, Al-Zaytoonah-Universität von Jordanien, Amman 11733, Jordanien; m.abuhammad@zuj.edu.jo
2 Labor für Angewandte Mathematik und Modellierung, Institut für Mathematik, Fakultät für Exakte Wissenschaften, Universität der Brüder Mentouri, Constantine 25000, Algerien; bendib.issam@doc.umc.edu.dz
3 Fakultät für Mathematik, Al Zaytoonah University of Jordan, Amman 11733, Jordanien; w.alshanti@zuj.edu.jo
4 Abteilung für Cybersicherheit, Al Zaytoonah University of Jordan, Amman 11733, Jordanien; a.alshanty@zuj.edu.jo
5 Institut für Mathematik und Informatik, Universität Oum EL-Bouaghi, Oum El Bouaghi 04000, Algerien; ouannas.adel@univ-oeb.dz
6 Nonlinear Dynamics Research Center (NDRC), Ajman University, Ajman 346, Vereinigte Arabische Emirate; s.momani@ajman.ac.ae
7 Fakultät für Mathematik, Universität von Jordanien, Amman 11942, Jordanien
* Korrespondenz: amel.hioual@univ-oeb.dz

Zusammenfassung: Ziel dieser Studie ist es, das Thema der zeitlich begrenzten Synchronisation innerhalb einer bestimmten Teilmenge zu behandeln von Degn-Harrison-Reaktions-Diffusionssystemen mit gebrochener Ordnung. Um dieses Ziel zu erreichen, beginnen wir mit die Einführung eines neuen Lemmas speziell für die Stabilitätsanalyse in begrenzter Zeit. Abweichend von bestehenden Kriterien stellt dieses Lemma eine bedeutende Erweiterung früherer Erkenntnisse dar und legt den Grundstein für nachfolgende Untersuchungen. Auf dieser Grundlage entwickeln wir effiziente abhängige lineare Regler, die für die Synchronisation in begrenzter Zeit konzipiert sind. Durch die Nutzung der Potenz einer Lyapunov-Funktion leiten wir neue, robuste Bedingungen ab, die das Erreichen von Synchronisation innerhalb eines vordefinierten Zeitrahmens. Dieser innovative Ansatz verbessert nicht nur unsere Verständnis der Synchronisation in begrenzter Zeit, sondern bietet auch praktische Lösungen für ihre Realisierung in komplexe Systeme. Um die Wirksamkeit und Anwendbarkeit unserer vorgeschlagenen Methodik zu validieren, numerische Simulationen durchgeführt. Mit dieser umfassenden Analyse wollen wir dazu beitragen, wertvolle Einblicke in das Gebiet der Reaktions-Diffusionssysteme mit gebrochener Ordnung und ebnete den Weg für praktische Implementierungen in realen Anwendungen.

Stichwörter: Synchronisation in begrenzter Zeit; Degn-Harrison-Reaktions-Diffusionssysteme; Stabilität in begrenzter Zeit; Lyapunov-Funktion

check for updates

Zitat: Hammad, MA; Bendib, I.; Alshanti, WG; Alshanty, A.; Ouannas, A.; Hioual, A.; Degn–Harrison mit gebrochener Ordnung Reaktions-Diffusions-Modell: Finite-Zeitdynamik der Stabilität und Synchronisation. Berechnung **2023,** 12, 144. https://doi.org/10.3390/Berechnung12070144

Wissenschaftliche Herausgeber: Endre Kovács, Denis Butusov und Valerii Ostrovskii

Erhalten: 3. Juni 2024
Überarbeitet: 7. Juli 2024
Akzeptiert: 10. Juli 2024
Veröffentlicht: 12. Juli 2024

Copyright: © 2023 bei den Autoren. Lizenznehmer MDPI, Basel, Schweiz. Dieser Artikel ist ein Open Access-Artikel vertrieben unter den Bedingungen und Bedingungen der Creative Commons Namensnennung (CC BY)-Lizenz (https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

1. Einleitung

Die Entwicklung geeigneter Regler ist für die dynamische Systemanalyse, insbesondere für die Synchronisation, von wesentlicher Bedeutung. Forscher haben verschiedene mathematische Modelle, um die einzigartigen Synchronisationsmuster dieser Systeme zu verstehen. Mathematische Modelle wie Reaktions-Diffusions-Gleichungen werden verwendet, um kontinuierliche Räume zu beschreiben Systeme wie oszillierende biologische oder chemische Medien, die komplexe dynamische Strukturen wie Bifurkationen, räumliche Muster und Drehinstabilitäten offenbaren. Studien legen nahe, dass Reaktions-Diffusionssysteme, die niedrigdimensionalen Oszillatoren ähneln, können Synchronisation aufweisen . Beispielsweise wurde in [1] die Synchronisation im Degn-Harrison-System untersucht. Reaktions-Diffusionssystem, Referenz [2] konzentrierte sich auf die Synchronisationskontrolle im Lengyel-Epstein-System, und Referenz [3] diskutiert die Synchronisation im FitzHugh–Nagumo Modell mit einem spezifischen Kontrollansatz. Im letzten Jahrzehnt gab es eine signifikante zunehmendes Interesse an fraktionalen Reaktions-Diffusions-Systemen, insbesondere im Hinblick auf die Synchronisation [4]. In [5] wird beispielsweise die Synchronisation in einer bestimmten Art von fraktional geo

Machine Translated by Google

Räumlich-zeitliche partielle Differentialsysteme wurden mit Hilfe der fraktionalen Lyapunov-Technik untersucht. Darüber hinaus wurde ein hybrider Ansatz entwickelt, um zwischen zwei Reaktions-Diffusions-Systemen ganzer und gebrochener Ordnung zu synchronisieren. Anwendungen für spezifische chemische Modelle werden in [6] diskutiert.

In diesem Rahmen haben sich verschiedene Methoden und Strategien herausgebildet, um die Herausforderung der Synchronisierung partieller Differentialgleichungen anzugehen. Diese Ansätze decken ein breites Spektrum ab und umfassen aktive Steuerungstechniken sowie lineare und nichtlineare Steuerungsschemata , wie in [7,8] beschrieben. Es **wurden verschiedene Formen der Synchronisierung beschrieben, jede mit ihren einzigartigen Merkmalen und Anwendungen. Dazu gehören die Synchronisierung in begrenzter Zeit , die Phasensynchronisierung, die antizipierte Synchronisierung, die vollständige Synchronisierung, die Verzögerungssynchronisierung, die Funktions-QS-Synchronisierung, die projektive Synchronisierung und die verallgemeinerte Synchronisierung, wie in den Referenzen [9–11] ausführlich beschrieben. Durch eine umfassende und gründliche Überprüfung verschiedener Methoden ist es unser Ziel, tief in die Komplexität der Synchronisierung in partiellen Differentialgleichungen einzutauchen. Wir möchten die vielfältigen Ansätze erläutern, die Forscher und Praktiker in diesem Bereich entwickelt und verwendet haben. Indem wir Erkenntnisse aus einem breiten Spektrum vorhandener Literatur integrieren und die gesammelten Ergebnisse zahlreicher früherer Studien zusammenfassen, streben wir danach, einen sinnvollen Be Unsere Arbeit beleuchtet nicht nur den aktuellen Stand der Forschung, sondern identifiziert auch mögliche Wege für zukünftige Fortschritte und fördert so den weiteren Fortschritt in diesem wichtigen Forschungsbereich.**

Unter zeitlich begrenzter Synchronisierung versteht man eine besondere Art der Synchronisierung, bei der ein koordiniertes Verhalten zwischen Systemen innerhalb einer vorgegebenen und begrenzten Zeitspanne erreicht wird . Anders als bei herkömmlicher Synchronisierung, die zum Konvergieren eine unbestimmte Zeitspanne benötigt , wird bei zeitlich begrenzter Synchronisierung sichergestellt, dass Systeme innerhalb einer festgelegten Zeitspanne synchron sind. Dieses Konzept findet Anwendung in verschiedenen Bereichen, beispielsweise in Steuerungssystemen , Kommunikationsnetzwerken und der Robotik. Im Bereich der Robotik beispielsweise kann zeitlich begrenzte Synchronisierung die Effizienz und Zusammenarbeit zwischen mehreren Roboteragenten verbessern, indem ihre koordinierten Bewegungen innerhalb einer festgelegten Zeitspanne garantiert werden . In Kommunikationsnetzwerken ist eine schnelle Synchronisierung entscheidend für eine effektive und zuverlässige Datenübertragung, wie in den Referenzen [12–15] hervorgehoben wird. Trotz ihrer Bedeutung ist die Forschung zur zeitlich begrenzten Synchronisierung räumlich ausgedehnter Systeme, die durch Reaktions-Diffusions-Systeme (RDS) be

In den letzten Jahren wurden verschiedene numerische Methoden entwickelt, um Reaktions-Diffusionsgleichungen effektiv zu lösen. Standardmethoden wie Differenzen-, Element- und Spektralmethoden werden aufgrund ihrer Robustheit und Rechenleistung häufig verwendet [16–18]. Fortschritte in der numerischen Analyse haben zu weiteren Techniken wie adaptiver Netzverfeinerung und paralleler Berechnung geführt, wodurch die Genauigkeit und Effizienz von Simulationen verbessert wird. Für Systeme mit gebrochener Ordnung wie das Degn-Harrison-Reaktions-Diffusionsmodell wurden spezielle Methoden wie fraktionale Differenzen- und fraktionale Spektralmethoden vorgeschlagen. Diese Methoden bewältigen effektiv die einzigartigen Herausforderungen gebrochener Ableitungen und bieten tiefere Einblicke in die Dynamik des Systems [19,2

Diese Forschung stellt einen bedeutenden und originellen Beitrag zur Untersuchung der zeitlich begrenzten Synchronisation innerhalb einer bestimmten Teilmenge räumlich-zeitlicher partieller Differentialsysteme mit gebrochener Ordnung dar. Unser Hauptziel ist eine umfassende Untersuchung sowohl der zeitlich begrenzten Stabilität als auch der zeitlich begrenzten Synchronisation in miteinander verbundenen fraktionalen Reaktions- Diffusions-Systemen. Diese Systeme zeichnen sich durch ihr komplexes dynamisches Verhalten aus, das von räumlichen und zeitlichen Variablen beeinflusst wird, was ihre Untersuchung anspruchsvoll, aber dennoch wichtig macht. Um zeitlich begrenzte Stabilität zu erreichen Bei diesem Ansatz wird eine geeignete Lyapunov-Funktion konstruiert, die dabei hilft, die Bedingungen abzuleiten, unter denen der Gleichgewichtspunkt des Systems in einer begrenzten Zeit erreicht werden kann. Diese Methode ist von entscheidender Bedeutung, da sie sicherstellt, dass der Zustand des Systems innerhalb eines vorgegebenen Zeitrahmens zum gewünschten Gleichgewicht konvergiert, wodurch die Vorhersagbarkeit und Kontrolle solcher Systeme verbessert wird. Um eine Synchronisation in begrenzter Zeit zu erre

Machine Translated by Google

Kontrolltechnik. Diese Kontrollstrategie ist darauf ausgelegt, die Zustände von fraktionalen Reaktions-Diffusions-Systemen zu synchronisieren und sicherzustellen, dass sie innerhalb eines begrenzten Zeitintervalls ein koordiniertes Verhalten zeigen. Unser Ansatz ist allgemein genug, um auf eine breite Palette von fraktionalen Reaktions-Diffusions-Systemen anwendbar zu sein, was ihn zu einem vielseitigen Werkzeug für Forscher und Praktiker auf diesem Gebiet macht. Um die Wirksamkeit und Praktikabilität unserer vorgeschlagenen Kontrollmethoden zu veranschaulichen, führen wir detaillierte Analysen des Synchronisierungsverhaltens von miteinander verbundenen Degn-Harrison-Systemen mit fraktionaler Ordnung durch. Diese Systeme dienen aufgrund ihrer Komplexität und Relevanz in verschiedenen Anwendungen als repräsentatives Beispiel. Durch Simulationen und theoretische Analysen demonstrieren wir, wie unsere Kontrolltechniken effektiv eine Synchronisierung in begrenzter Zeit erre

Das Dokument ist wie folgt strukturiert: In Abschnitt 2 gehen wir auf die grundlegenden Prinzipien der Bruchrechnung ein und vermitteln den Lesern ein umfassendes Verständnis der mathematischen Grundlagen, die für das Verständnis der nachfolgenden Diskussionen von wesentliche Abschnitt 3 enthält eine Beschreibung der Degn-Harrison-Modelle. Abschnitt 4 untersucht die zeitlich begrenzte Stabilität von Gleichgewichtspunkten in Reaktionsdiffusionsmodellen. Diese Analyse ist entscheidend, um das Übergangsverhalten des Systems zu verstehen und festzustellen, ob es innerhalb einer begrenzten Zeit einen stabilen Zustand erreichen kann. Die praktischen Auswirkungen dieser Analyse sind erheblich und umfassen Anwendungen im Entwurf von Steuerungssystemen, der Musterbildung in chemischen und biologischen Prozessen und der Synchronisierung dynamischer Systeme. Abschnitt 5 konzentriert sich auf die Erstellung eines zeitlich begrenzten Synchronisierungsschemas für Reaktionsdiffusionssysteme, insbesondere durch die Untersuchung des Degn-Harrison-Reaktionsdiffusionssystems. Abschnitt 6 präsentiert eine Reihe verschiedener Beispiele zur Veranschaulichung der Prinzipien der zeitlich begrenzten Stabilität und zeitlich begrenzten Synchr

2. Grundlegende Werkzeuge

Das Ziel dieses Abschnitts besteht darin, die grundlegenden Definitionen und Schlüsselsätze der Bruchrechnung vorzustellen, die für das Verständnis der nachfolgenden Analyse wesentlich sind.

Definition 1 **([21,22]).** Der Riemann-Liouville-Integraloperator gebrochener Ordnung einer beliebigen integrierbaren Funktion **E** kann wie folgt definiert werden:

$$\text{Ich}^{\ddot{y}}_{z}\,\mathbf{E(z)} = \frac{1}{\ddot{y}(\ddot{y})}\int_{0}^{z}(\mathbf{z}\ \ddot{y}\ \ddot{y})^{\ddot{y}\ddot{y}1}\ E(\ddot{y})d\ddot{y}, \tag{1}$$

wobei **z ÿ 0, 0** < **ÿ** < 1 und **ÿ(.)** die Gammafunktion ist.

Definition 2 **([21,22]).** Die Caputo-Fraktionsableitung von **E** wird wie folgt definiert:

$${}^{C}_{0}D^{\ddot{y}}_{z}\,\mathbf{E(z)} = \frac{1}{\ddot{y}(1\ \ddot{y}\ \ddot{y})}\int_{0}^{z}(\mathbf{z}\ \ddot{y}\ \ddot{y})^{\ddot{y}\ddot{y}}\ \frac{d}{d\ddot{y}}E(\ddot{y})d\ddot{y}, \tag{2}$$

wobei **0** < **ÿ** < 1.

Wir betrachten das folgende nichtlineare System gebrochener Ordnung:

$${}^{C}_{0}T\ddot{y}_{z}\ \mathbf{E(z)} = \ddot{y}\mathbf{(z,}\ E(z)),\ \ddot{y}\ \ddot{y}\ \mathbf{(0,1),z} > \mathbf{0,}$$
$$\textbf{wobei } E(0) = E0 \textbf{ ist.} \tag{3}$$

wobei *ÿ :* Rn **ÿ** Rn , **E(z) ÿ** Rn **, und** $\mathbf{{}^{C}_{0}D\ddot{y}_{z}}$ **ist die Caputo-gebrochene Ableitung der Ordnung ÿ, ÿ und ein Punkt** Rn **ist ein Gleichgewichtspunkt eines nichtlinearen Systems gebrochener Ordnung (3) , wenn E ÿ** ÿ(E **ÿ) ÿ 0.**

Definition 3 **([23]).** **E ÿ** wird als anfänglicher Gleichgewichtspunkt einer nichtlinearen Gleichung mit gebrochener Ordnung System (3) wenn **E0** = **E ÿ** oder äquivalent dazu bezeichnet **als E(z) ÿ Eÿ , ÿz ÿ [z ÿ ,** +ÿ).

Machine Translated by Google

Definition 4 ([23]). **E ÿ** wird als Gleichgewichtspunkt endlicher Zeit bezeichnet, der nichtlinear ist und gebrochener System (3) wenn es ein **z** gibt ÿ Ordnung > 0 ist, so dass **E(z)** ÿ= **E ÿ ,z ÿ [0,z ÿ)** und **E(z) ÿ Eÿ , ÿz ÿ [z ÿ ,** +ÿ).

Definition 5 ([23]). Angenommen, D **ÿ ÿ** ist eine offene Umgebung von 0, und es gibt eine Funktion **z ÿ (E0) : D\{0} ÿ Rÿ,** genannt die Untergangszeit, die die folgenden Bedingungen erfüllt, dann heißt **E ÿ** ein in endlicher Zeit stabiler Gleichgewichtspunkt des Systems (3). 1. **ÿE0 ÿ D\{0},**

E(z) = **E(z, E0) ÿ D\{0}, ÿz ÿ [0,z ÿ** (E0)), limzÿz **ÿ(E0) E(z)** = 0, und
E(z) ÿ 0 für **z ÿ [z ÿ (E0),** +ÿ).

2. Für jede offene Umgebung *Uÿ* von 0 gibt es eine offene Teilmenge *Uÿ ,* die 0 in D enthält, so dass für **ÿE0 ÿ Uÿ\{0}** und **ÿz ÿ [0,z ÿ** (E0)), **E(z)** = **E(z, E0) ÿ** *Uÿ .*

Theorem 1 ([23]). **E ÿ** ist ein in endlicher Zeit stabiler Gleichgewichtspunkt der nichtlinearen Systeme gebrochener Ordnung (3) , falls es eine differenzierbare Ljapunow-Funktion **L : [0, +ÿ) × ÿ ÿ** R+ gibt . drei Funktionen der Klasse **M ÿ1, ÿ2, ÿ3** und *ÿ* > **0 ,** so dass 1. ÿ1ÿE(z)ÿ

ÿ L(z, E(z)) ÿ ÿ2ÿE(z)ÿ, 2. **L**
ÿ
(z, E(z)) < **ÿÿ3E(z,** E(z)), <
3. $\int_0^{\ddot{y}} \frac{dE}{\ddot{y}3(E)}$ +ÿ,(ÿÿ : **0** < *ÿ* **ÿ** ÿ).

Lemma 1 ([24,25]). Für alle **E(z) ÿ** Rn und **ÿ ÿ (0,** 1) gilt die folgende Ungleichung

$$\overset{C\ \ddot{y}}{0\ z}D \quad E^{T}(z)E(z) \ddot{y} 2E \quad {}^{T}(z)\overset{C\ \ddot{y}}{0}D_{z} : E(z), z \ddot{y} 0. \tag{4}$$

Definition 6 ([26]). Die Mittag–Leffler-Funktion mit **ÿ** > **0 ,** notiert mit **Eÿ** und definiert durch

$$E\ddot{y}(z) = \ddot{y} \sum_{\ddot{y}(\ddot{y}j+1)}^{+\ddot{y}} \frac{z^{\ddot{y}}}{\ddot{y}(\ddot{y}j+1)}, \tag{5}$$
j=0

Satz 2 ([27]). Es sei **L(z)** eine stetige und positiv definite Funktion, die erfüllt

$$\overset{C}{0\ z}D^{\ddot{y}}\ \mathbf{L(z)\ \ddot{y}}\ \ddot{y}QL(z),\ \mathbf{\ddot{y}z\ \ddot{y}\ 0,} \tag{6}$$

wobei **0** < **ÿ** < **1** und **Q** eine positive Konstante ist. Dann gilt:

$$\mathbf{L(z)\ \ddot{y}}\ L(0)E\ddot{y}\ \mathbf{\ddot{y}Qz\ddot{y}\ ,\ \ddot{y}z\ \ddot{y}\ [0,z\ \ddot{y}\ ),} \tag{7}$$

wobei **Eÿ** eine Mittag-Leffler-Funktion mit der Abbindezeit ist.

$$z^{\ddot{y}} = \left(\frac{\ddot{y}(\ddot{y}+1)}{Q}\right)^{\ddot{y}\ \ddot{y}1}, \tag{8}$$

Darüber hinaus ist **L(0)** positiv und **L(z)** = **0** für **z ÿ z**ÿ .

3. Beschreibung der Modelle

Das Degn-Harrison-System veranschaulicht den Reaktionsprozess mit zwei Substanzen: Sauerstoff, bezeichnet als E1, und einem Nährstoff, bezeichnet als E2. Ein wichtiger Aspekt dieses Systems ist, dass ein Überschuss an Sauerstoff die Atmung hemmt, was durch eine

$\frac{}{E1\ 1 + \frac{2}{1}}$ **nichtlineare Ratenfunktion dargestellt wird . Diese Funktion erfasst den Sättigungseffekt, bei der qE Sauerstoff nimmt mit seiner Konzentration zu, bleibt jedoch aufgrund des quadratischen Terms im Nenner konstant.**

Wenn man bedenkt, dass ähnliche Hemmphänomene mit vergleichbaren

E1 Reaktionsschemata erweitern wir das Hemmgesetz mit der gleichen nichtlinearen $\frac{}{\text{Funktion}\ 1 + qE}$ **.**
1

Machine Translated by Google

Diese Erweiterung ermöglicht die Modellierung einer größeren Bandbreite von Reaktionsprozessen, bei denen die Hemmung eine entscheidende Rolle spielt.

Das auf Grundlage dieses erweiterten Hemmgesetzes entwickelte Reaktions-Diffusions-Modell ist als Degn-Harrison-Reaktions-Diffusions-Modell bekannt. Dieses Modell ist durch partielle Differentialgleichungen gekennzeichnet, die die räumliche und zeitliche Entwicklung der Konzentrationen von E1 und E2 beschreiben. Die maßgebenden Gleichungen für das Degn-Harrison-Reaktions-Diffusions- Modell lauten wie folgt:

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

In diesem Zusammenhang stellt **ÿ eine begrenzte Domäne in** Rn **mit einer ausreichend glatten Grenze dar, die als ÿÿ bezeichnet wird. Die Koeffizienten k1 und k2 geben die Diffusionsraten der Reaktanten E1 bzw. E2** an . **Der Parameter q fungiert als Skalierungsfaktor, der die Stärke der Wechselwirkung zwischen den Variablen E1 und E2 beeinflusst. Diese Diffusionskoeffizienten sind entscheidende Parameter, die bestimmen, wie schnell sich Substanzen in der Domäne ÿ ausbreiten .**

Die Konstanten a, b, q, k1 und k2 werden während des gesamten Reaktionsprozesses als positiv angenommen. Diese Konstanten stellen typischerweise Reaktionsgeschwindigkeitsparameter und andere spezifische Eigenschaften der Kinetik des Systems dar.

Der Laplace-Operator, der die räumliche Diffusion der Reaktanten berücksichtigt, ist bezeichnet mit ÿ. In einem n-dimensionalen Raum wird der Laplace-Operator wie folgt definiert:

$$\nabla = \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial^2}{\partial r_i^2},$$

2 wobei $\frac{\partial^2}{\partial}$ **die zweite partielle Ableitung in Bezug auf die i-te räumliche Koordinate** ÿr **2** ri darstellt . **Die Referenzen [28,29] liefern weitere mathematische Hintergründe und Anwendungen des Laplace-Operators in Reaktions-Diffusions-Systemen und betonen seine Bedeutung bei der Beschreibung der räumlichen Aspekte des Prozesses.**

Das Reaktions-Diffusions-Modell, das diese Definitionen und Annahmen enthält, ist entscheidend für die Analyse des Verhaltens des Degn-Harrison-Systems unter dem Einfluss von Diffusion und nichtlinearen Reaktionen. Die präzise Formulierung des Modells ermöglicht eine detaillierte Untersuchung der Dynamik und der Synchronisationseigenschaften des Systems innerhalb der Domäne ÿ.

4. Stabilitätsanalyse

Das Ziel der Untersuchung von Gleichgewichtspunkten mit begrenzter Stabilität in Reaktions-Diffusions- Modellen besteht darin, das Übergangsverhalten des Systems zu verstehen und festzustellen, ob es innerhalb eines begrenzten Zeitrahmens einen stabilen Zustand erreichen kann. Diese Art der Analyse ist entscheidend für die Vorhersage des Systemsverhaltens über begrenzte Zeiträume, was erhebliche Auswirkungen auf verschiedene praktische Anwendungen hat. Zu diesen Anwendungen gehören der Entwurf von Steuerungssystemen, die Bildung von Mustern in chemischen und biologischen Prozessen und die Synchronisierung dynamischer Systeme.

In unserer Studie konzentrieren wir uns auf einen einzigartigen Gleichgewichtspunkt, der als Lösung für das folgende System der Gleichung (10) dient. Durch die Analyse dieses Gleichgewichtspunkts können wir Einblicke in die Stabilität und die Synchronisationseigenschaften der Reaktions-Diffusion gewinnen

Machine Translated by Google

System. Diese Analyse trägt dazu bei, sicherzustellen, dass das System schnell einen gewünschten Zustand erreicht und diesen Zustand trotz vorhandener Störungen oder Änderungen der Anfangsbedingungen b

$$\begin{aligned} \ddot{y}\ k1\ddot{y}E_1\ddot{y} + a\ \ddot{y}\ E\ddot{y}_1 \quad & \frac{E_1^{\ddot{y}} E_2^{\ddot{y}}}{1+qE_{\ddot{y}2}^{\ddot{y}}} = 0, \\ \ddot{y}\ k2\ddot{y}E_2\ddot{y} + b\ \ddot{y} \quad & \frac{E_{\text{Teil 1}}^{\ddot{y}}}{1+qE_1^{2\,\ddot{y}2}} = 0, \end{aligned} \tag{10}$$

Der eindeutige Gleichgewichtspunkt der Systeme (10) ist gegeben durch

$$E^{\ddot{y}} = (E^{\ddot{y}}{}_{E_2^{\ddot{y}}) = a\ \ddot{y}\ b,\ b\ 1}, \quad \frac{1 + q(a\ \ddot{y}\ b)^2}{a\ \ddot{y}\ b}, \tag{11}$$

Lemma 2 ([30]). Es gilt die folgende Ungleichung

$$\frac{E^{-}1E^{-}}{2\,1 + qE^{-}{}_1^2} \quad \frac{E1E2}{1 + qE_1^2}\ \ddot{y}\ P\ E^{-}{}_{1\ \ddot{y}\ E1} + E^{-}{}_{2\ \ddot{y}\ E2}, \tag{12}$$

Wo

$$P\ \ddot{y}\ \max\left\{\frac{5}{4}K, \frac{1}{2\ \ddot{y}\ q}\right\}, E2 < K. \tag{13}$$

Lemma 3 ([31]). **ÿ** ist ein beschränkter Bereich in Rm mit einem glatten Rand, der mit **ÿÿ bezeichnet wird,** gehört zur Klasse C^2ÿÿ(r) . **ÿ(r) ÿ H1(ÿÿ) = ÿ(r)** Dann gilt wertige Funktion darstellt, und $\overline{\ddot{y}\ddot{y}}$

$$\ddot{y}1 \int_{\ddot{y}} |\ddot{y}(r)|^2 dr\ \ddot{y} \int_{\ddot{y}} |\nabla\ddot{y}(r)|^2_{\text{Herr Dr.}} \tag{14}$$

wobei **ÿ1** als positiver Eigenwert des folgenden Problems bestimmt wird:

$$\begin{aligned} &\ddot{y}\ddot{y}\ddot{y}(r) = \ddot{y}\ddot{y}(r), r\ \ddot{y}\ \ddot{y}, \ddot{y}\ddot{y}(r)\ r\ \ddot{y} \\ &\overline{\ddot{y}\ddot{y}\cdot} = 0, \ddot{y}\ddot{y} \end{aligned} \tag{15}$$

Theorem 3. Der Gleichgewichtspunkt $E\ \ddot{y} = a\ \ddot{y}\ b, b \quad \frac{1 + q(a\ \ddot{y}\ b)^2}{a\ \ddot{y}\ b}$ stellt eine in begrenzter Zeit stabile Gleichgewichtspunkt der nichtlinearen Systeme gebrochener Ordnung (9), sofern die folgenden Bedingungen erfüllt sind:

$$|E2| < K, P\ \ddot{y}\ \max\left\{\frac{5}{4}K, \frac{1}{2\ \ddot{y}\ q}\right\}, \min\{k1\ddot{y}1\ \ddot{y}\ 2P + 1, k2\ddot{y}2\ \ddot{y}\ 2P\} > 0. \tag{16}$$

Die Zeit der endlichen Stabilität des Gleichgewichtspunktes wird wie folgt geschätzt:

$$z_1^{\ddot{y}} = \frac{L2(0)}{2\ \min\{k1\ddot{y}1\ \ddot{y}\ 2P + 1, k2\ddot{y}2\ \ddot{y}\ 2P\}L2(zmax)}. \tag{17}$$

Beweis. Wir konstruieren die positive Ljapunow-Funktion wie folgt:

$$L2(z) = \frac{1}{2\ \ddot{y}}\ (E1\ \ddot{y}\ E\ddot{y}1)^2 + (E2\ \ddot{y}\ E\ddot{y}\ 2)^2_{\text{Herr Dr.}} \tag{18}$$

wobei 0Dz die Normalableitung bezeichnet. Nach Lemma 2 erhalten wir also:

Machine Translated by Google

$$0DzL2(z) = \frac{1}{2\ddot{y}} \; 0Dz(E1\ \ddot{y}\ E\ddot{y}\ 1)^2 + 0Dz(E2\ \ddot{y}\ E\ddot{y}\ 2)^2\ Dr.$$

$$= \int_{\ddot{y}} (E1\ \ddot{y}\ E\ddot{y}1)\,0Dz(E1\ \ddot{y}\ E\ddot{y}\ 1)\,dr + \int_{\ddot{y}} (E2\ \ddot{y}\ E\ddot{y}_2)\,0Dz(E2\ \ddot{y}\ E\ddot{y}\ 2)\,dr$$

$$= \int_{\ddot{y}} (E1\ \ddot{y}\ E\ddot{y}_1)\,k1\ddot{y}(E1\ \ddot{y}\ E\ddot{y}\ _1)\ \ddot{y}\ (E1\ \ddot{y}\ E\ddot{y}\ )_1\ddot{y}\ \frac{E1E2}{1 + qE_1^2}\ \frac{E_{12}\ddot{y}E_2\ddot{y}}{1 + qE_1}\ Dr.$$

$$+ \int_{\ddot{y}} (E2\ \ddot{y}\ E\ddot{y}2\ )\,k2\ddot{y}(E2\ \ddot{y}\ E\ddot{y}\ 2)\ \ddot{y}\ \frac{E1E2}{1 + qE_1^2}\ \frac{E_{12}\ddot{y}E_2\ddot{y}}{1 + qE_1}\ Dr.$$

$$\ddot{y} \int_{\ddot{y}} (E1\ \ddot{y}\ E\ddot{y}_1)(k1\ddot{y}(E1\ \ddot{y}\ E\ddot{y}\ _1)\ \ddot{y}\ (E1\ \ddot{y}\ E\ddot{y}\ )_1\,dr + \int_{\ddot{y}} |E1\ \ddot{y}\ E\ddot{y}1\ |\frac{E1E2}{1 + qE_1^2}\ \frac{E_1\ddot{y}E_2\ddot{y}}{1 + qE_1^2\ddot{y}2}\ Dr. \quad (19)$$

$$+ \int_{\ddot{y}} (E2\ \ddot{y}\ E\ddot{y}2\ )k2\ddot{y}(E2\ \ddot{y}\ E\ddot{y}\ 2)\,dr + \int_{\ddot{y}} |E2\ \ddot{y}\ E\ddot{y}2\ |\frac{E1E2}{1 + qE_1^2}\ \frac{E_1\ddot{y}E_2\ddot{y}}{1 + qE_1^2\ddot{y}2}\ Dr.$$

$$\ddot{y}\ k1 \int_{\ddot{y}} (E1\ \ddot{y}\ E\ddot{y}_1)\ddot{y}(E1\ \ddot{y}\ E\ddot{y}\ )_1 dr\ \ddot{y} \int_{\ddot{y}} (E1\ \ddot{y}\ E\ddot{y}_1)^2\ Dr.$$

$$+ P \int_{\ddot{y}} |E1\ \ddot{y}\ E\ddot{y}1\ |(|E1\ \ddot{y}\ E\ddot{y}\ 1\ | + |E2\ \ddot{y}\ E\ddot{y}\ 2\ |)\ dr$$

$$+ 2\ k \int_{\ddot{y}} (E2\ \ddot{y}\ E\ddot{y}2\ )\ddot{y}(E2\ \ddot{y}\ E\ddot{y}\ 2)\ dr + P \int_{\ddot{y}} |E2\ \ddot{y}\ E\ddot{y}2\ |(|E1\ \ddot{y}\ E\ddot{y}\ 1\ | + |E2\ \ddot{y}\ E\ddot{y}\ 2\ |)\ dr.$$

Mit der Formel von Green erreichen wir:

$$0DzL2(z)\ \ddot{y}\ \ddot{y}k1 \int_{\ddot{y}} |\ddot{y}(E1\ \ddot{y}\ E\ddot{y}\ 1\ )|^2\ dr\ \ddot{y}\ k2 \int_{\ddot{y}} |\ddot{y}(E2\ \ddot{y}\ E\ddot{y}\ 2\ )|^2\ dr\ \ddot{y}\ (1\ \ddot{y}\ P) \int_{\ddot{y}} (E1\ \ddot{y}\ E\ddot{y}_1)^2\ Dr.$$

$$+ P \int_{\ddot{y}} (E2\ \ddot{y}\ E\ddot{y}2\ )^2\ dr + 2P \int_{\ddot{y}} |E1\ \ddot{y}\ E\ddot{y}1\ ||E2\ \ddot{y}\ E\ddot{y}2\ |\ dr$$

$$\ddot{y}\ \ddot{y}k1 \int_{\ddot{y}} |\ddot{y}(E1\ \ddot{y}\ E\ddot{y}\ 1\ )|^2\ dr\ \ddot{y}\ k2 \int_{\ddot{y}} |\ddot{y}(E2\ \ddot{y}\ E\ddot{y}\ 2\ )|^2\ dr\ \ddot{y}\ (1\ \ddot{y}\ P) \int_{\ddot{y}} (E1\ \ddot{y}\ E\ddot{y}_1)^{\text{Schlafzimmer}} \quad (20)$$

$$+ P \int_{\ddot{y}} (E2\ \ddot{y}\ E\ddot{y}2\ )^2\ dr + P \int_{\ddot{y}} |E1\ \ddot{y}\ E\ddot{y}1\ |^2 + |E2\ \ddot{y}\ E\ddot{y}\ 2\ |^2\ Dr.$$

$$\ddot{y}\ \ddot{y}k1 \int_{\ddot{y}} |\ddot{y}(E1\ \ddot{y}\ E\ddot{y}\ 1\ )|^2\ dr\ \ddot{y}\ k2 \int_{\ddot{y}} |\ddot{y}(E2\ \ddot{y}\ E\ddot{y}\ 2\ )|^2\ dr\ \ddot{y}\ (1\ \ddot{y}\ 2P) \int_{\ddot{y}} (E1\ \ddot{y}\ E\ddot{y}_1)^{\text{Schlafzimmer}}$$

$$+ 2P \int_{\ddot{y}} (E2\ \ddot{y}\ E\ddot{y}2\ )^{2\ \text{Zimmer.}}$$

Mit Lemma 3 erhalten wir:

$$0DzL2(z)\ \ddot{y}\ \ddot{y}(k1\ddot{y}1\ \ddot{y}\ 2P + 1) \int_{\ddot{y}} (E1\ \ddot{y}\ E\ddot{y}_1)^2\ dr\ \ddot{y}\ (k2\ddot{y}2\ \ddot{y}\ 2P) \int_{\ddot{y}} (E2\ \ddot{y}\ E\ddot{y}2\ )^{\text{Schlafzimmer}}$$

$$\ddot{y}\ \ddot{y}2\ \min\{k1\ddot{y}1\ \ddot{y}\ 2P + 1, k2\ddot{y}2\ \ddot{y}\ 2P\}L2(z). \quad (21)$$

Sei $\ddot{y}3,1 = 2\ \min\{k1\ddot{y}1\ \ddot{y}\ 2P + 1, k2\ddot{y}2\ \ddot{y}\ 2P\}$ **eine streng positive Konstante. Somit gilt**

$$\int_0^{\ddot{y}} \frac{1}{d\ddot{y}} = <\ \ddot{y},\ \ddot{y}3,1\ 2\ \min\{k1\ddot{y}1\ \ddot{y}\ 2P + 1, k2\ddot{y}2\ \ddot{y}\ 2P\} \quad (22)$$

Die Ljapunow-Funktion L2 ist im Intervall $0\ \ddot{y}\ z < z$ abnehmend. $\ddot{y}_1\ \ddot{y}\ zmax$. **Diese impliziert, dass** $L2(z) > L2(z\ \ddot{y}_1) >$ **L2(zmax). Weiterhin gilt:**

$$L2(z)\ \ddot{y}\ L2(0)\ \ddot{y}\ 2\ \min\{k1\ddot{y}1\ \ddot{y}\ 2P + 1, k2\ddot{y}2\ \ddot{y}\ 2P\} \int_0^z L2(s)\,d\ddot{y}$$

$$\ddot{y}\ L2(0)\ \ddot{y}\ 2\ \min\{k1\ddot{y}1\ \ddot{y}\ 2P + 1, k2\ddot{y}2\ \ddot{y}\ 2P\} \int_0^z \mathbf{L2(zmax)}\,d\ddot{y}$$

$$= L2(0)\ \ddot{y}\ 2\ \min\{k1\ddot{y}1\ \ddot{y}\ 2P + 1, k2\ddot{y}2\ \ddot{y}\ 2P\}\mathbf{L2(zmax)z.}$$

Machine Translated by Google

Durch Anwenden der Definitionen 4 und 5 gilt für den Fall, $\ddot{y}_1$**, die Funktion** L2(z) **strebt gegen Null:**

$\lim_{z\ddot{y}z_1}$ **dass z** sich **z nähert ,** L2(z) **ÿ** L2(0) **ÿ 2 min{k1ÿ1 ÿ 2P** + **1,k2ÿ2 ÿ 2P}L2(zmax)**$^{-1}$**zÿ = 0.** **(23)**

Die Einschwingzeit kann wie folgt definiert werden:

$$\ddot{y}_{z1} = \frac{L2(0)}{2\ \min\{k1\ddot{y}1\ \ddot{y}\ 2P + 1, k2\ddot{y}2\ \ddot{y}\ 2P\}L2(zmax)}.$$

Somit ist E ÿ = a ÿ b, b aÿb $\frac{1+q(a\ddot{y}b)}{}^{2}$ **stellt einen in begrenzter Zeit stabilen Gleichgewichtspunkt des nichtlinearen Systems (9) dar, wie in Theorem 1 angegeben.**

5. Synchronisationsschema mit begrenzter Zeit

Das Ziel der zeitlich begrenzten Synchronisation in Reaktions-Diffusions-Systemen besteht darin, innerhalb einer festgelegten und begrenzten Zeitspanne ein koordiniertes Verhalten der Systemelemente zu erreichen . Dadurch wird sichergestellt, dass die Systeme innerhalb eines definierten Zeitrahmens synchronisiert werden, was **für verschiedene Anwendungen wie den Entwurf von Steuerungssystemen, die Mustergenerierung und die Synchronisation in komplexen Netzwerken** von entscheidender Bedeutung **ist .**

In dieser Studie untersuchen wir die Reaktion des Degn-Harrison-Reaktions-Diffusionssystems, das durch eine Reihe partieller Differentialgleichungen bestimmt wird, die nichtlineare Reaktionsterme und Diffusionsprozesse beinhalten. Das Verhalten des Systems wird wie folgt beschrieben:

$$\begin{aligned}
&\ddot{y}\,{}^{C}_{0}T\ddot{y}_{Z}\ \bar{E}1(r,z) = k1\ddot{y}\bar{E}1 + a\ \ddot{y}\ \bar{E}\ \ddot{y}\ \frac{\bar{E}1\bar{E}2}{1+q\bar{E}2\quad 1} + C1,1 && r\ \ddot{y}\ \ddot{y},z > 0,\\
&{}^{C}_{0}T\ddot{y}_{Z}\ \bar{E}2(r,z) = k2\ddot{y}\bar{E}2 + b\ \ddot{y}\ \frac{\bar{E}1\bar{E}}{2\ 1+q\bar{E}2\quad 1} + C2, && r\ \ddot{y}\ \ddot{y},z > 0,\\
&\bar{y}\bar{E}_1 = \ddot{y}\bar{E}_2 = 0, && r\ \ddot{y}\ \ddot{y}\ddot{y},z > 0,\ \bar{E}\\
&\bar{E}1(r,0) = \bar{E}1,0(r) > 0, \qquad 2(r,0) = \bar{E}2,0(r) > 0,\ r\ \ddot{y}\ \ddot{y}.
\end{aligned} \tag{24}$$

Die Synchronisationsdiskrepanzen in den Gleichungen (9)–(24) werden berücksichtigt.

$$e(r,z) = \begin{matrix} e1 \\ e2 \end{matrix} = \begin{matrix} \bar{E}1\ \ddot{y}\ E1 \\ \bar{E}2\ \ddot{y}\ E2 \end{matrix}, \tag{25}$$

In der nachfolgenden Diskussion werden wir die linearen Regler C1 und C2 bestimmen , **die die Fehlersystemlösung gegen Null treiben, wenn z sich z nähert** $\ddot{y}$

Definition 7 ([32,33]). Wenn es einen bestimmten Zeitparameter **z** gibt $\ddot{y}$ **> 0 ,** so dass

$$\lim_{z\ddot{y}z}\ \ddot{y}e1(z)\ddot{y} + \ddot{y}e2(z)\ddot{y} = 0, \tag{26}$$

Und

$$\ddot{y}e1(z)\ddot{y} + \ddot{y}e2(z)\ddot{y}\ \ddot{y}\ 0, \ddot{y}z\ \ddot{y}\ z\ \ddot{y}, \tag{27}$$

dann werden die abgeleiteten Antwortsysteme (9)–(24) in endlicher Zeit synchronisiert.

Theorem 4. Die Master-Slave-Systeme, bezeichnet durch die Gleichungen (9) und (24), erreichen stabile und synchronisierte Zustände innerhalb einer endlichen Dauer durch Ausnutzung eines zweidimensionalen linearen Kontrollgesetzes

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

und der Zeitpunkt der Synchronisierung wird geschätzt als

$$\ddot{y}_{z2} = \frac{\ddot{y}(\ddot{y}+1)}{2\ \min\{k1\ddot{y}1, k2\ddot{y}2\}}\ \ddot{y}^{\ddot{y}1}. \tag{29}$$

Machine Translated by Google

Beweis. Durch Integration der im Theorem beschriebenen Steuerung in das Fehlersystem erhalten wir folgende Dynamik:

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

Wir verwenden Ljapunows direkte Methode in Verbindung mit einer positiv definiten Ljapunow-Funktion.

$$L3(z) = 2\,\frac{1}{\dot{\psi}} \quad {}^{2\,2+ee}_{1\,2} \quad \text{Herr Dr.} \tag{31}$$

Unter Verwendung der Lemmas 1–3 erhalten wir:

$$\begin{aligned}
&{}_{0}^{C\dot{\psi}}D_{Z} \quad L3(z) = 2\,\frac{1}{\dot{\psi}} \quad {}_{z}^{C\dot{\psi}2}b_{e\,0\,1} \quad 1\ dr + \frac{}{} + 2\,\dot{\psi} \quad {}_{z}^{C\dot{\psi}2}b_{e\,0\,2} \quad Dr.\\
&\dot{\psi} \quad {}_{\dot{\psi}}^{\quad e10D} \quad {}_{z}^{\dot{\psi}}e1\ dr + {}_{\dot{\psi}}^{\quad e20D} \quad {}_{z}^{\dot{\psi}}e2\ dr\\
&= \quad {}_{\dot{\psi}}^{\quad} \quad e1\ k1\dot{\psi}e1 \dot{\psi} 2Pe1 \dot{\psi} \quad \frac{E^{-}1E^{-}}{2\,1+qE^{-}{}_{1}^{2}} \quad \frac{E1E2}{1+qE_{1}^{2}} \quad Dr.\\
&+ \quad {}_{\dot{\psi}}^{\quad} \quad e2\ k2\dot{\psi}e2 \dot{\psi} 2Pe2 \dot{\psi} \quad \frac{E^{-}1E^{-}}{2\,1+qE^{-}{}_{1}^{2}} \quad \frac{E1E2}{1+qE_{1}^{2}} \quad Dr.\\
&\dot{\psi}\ k1 \quad {}_{\dot{\psi}}^{\quad} \quad e1\dot{\psi}e1\ dr + k2 \quad {}_{\dot{\psi}}^{\quad} \quad e2\dot{\psi}e2\ dr \dot{\psi} 2P \quad {}_{1\,\dot{\psi}}^{2\ \text{und}} \quad dr \dot{\psi} 2P \quad {}_{2}^{2}\dot{\psi}^{dr\ e}\\
&+ \quad {}_{\dot{\psi}}^{\quad} \quad 1E^{-}2\ (|e1| + |\ \frac{E^{-}}{e2|)\ 1+qE^{-}{}_{1}^{2}} \quad \frac{E1E2}{1+qE_{1}^{2}} \quad Dr.\\
&\dot{\psi}\ \dot{\psi}k1 \quad {}_{\dot{\psi}}^{\quad} \quad |\dot{\psi}e1|^{2}\ dr \dot{\psi} k2 \quad {}_{\dot{\psi}}^{\quad} \quad |\dot{\psi}e2|^{2}\ dr \dot{\psi} 2P \quad {}_{\dot{\psi}}^{\quad} \quad {}^{2\,2+ee}_{1\,2} \quad Dr.\\
&+ P \quad {}_{\dot{\psi}}^{\quad} \quad (|e1| + |e2|)\ E^{-} \quad 1\ \dot{\psi}\ E1 + E^{-} \quad 2\ \dot{\psi}\ E2\ dr\\
&\dot{\psi}\ \dot{\psi}k1 \quad {}_{\dot{\psi}}^{\quad} \quad |\dot{\psi}e1|^{2}\ dr \dot{\psi} k2 \quad {}_{\dot{\psi}}^{\quad} \quad |\dot{\psi}e2|^{2}\ dr \dot{\psi} 2P \quad {}_{\dot{\psi}}^{\quad} \quad {}^{2\,2+ee}_{1\,2} \quad dr + 2P \quad {}_{\dot{\psi}}^{\quad} \quad |e1|^{2} + |e2|^{2} \quad Dr.\\
&\dot{\psi}\ \dot{\psi}k1\dot{\psi}1 \quad {}_{\dot{\psi}}^{\quad} \quad {}^{2}_{\text{und}\,1}\ dr \dot{\psi}\ k2\dot{\psi}2 \quad {}_{\dot{\psi}}^{\quad} \quad e^{2}_{2}{}^{dr}\\
&= \dot{\psi}2 \min\{k1\dot{\psi}1, k2\dot{\psi}2\}L3(z).
\end{aligned} \tag{32}$$

Wenn sich der Parameter ψ von links gegen 1 nähert, wird der ${}_{0}^{C}T\dot{\psi}_{z}\,L3(z)$ **konvergiert zu Ausdruck 0DzL3(z) [34]. Diese Konvergenz impliziert**

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

wobei ψ3,2 = 2 min{k1ψ1,k2ψ2} eine strikt positive Konstante ist. Folglich können wir ableiten

$$\int_{0}^{\dot{\psi}} \frac{1}{\quad} d\dot{\psi} = <\ \dot{\psi}, \ 2\ \min\{k1\dot{\psi}1, k2\dot{\psi}2\}\ \dot{\psi}3,2 \tag{34}$$

Mit Theorem 1 stellen wir fest, dass die Nulllösung des Fehlersystems (30) eine Stabilität des Gleichgewichtspunktes (e1, e2) = (0, 0) in endlicher Zeit anzeigt. **Darüber hinaus folgern wir** mit **Theorem** 2:

Machine Translated by Google

$$L3(z) \ddot{y} \mathbf{L3(0)E\ddot{y}\ddot{y}2\ \min\{k1\ddot{y}1,k2\ddot{y}2\}z} \quad \ddot{y} \quad \mathbf{,\ \ddot{y}z\ \ddot{y}\ [0,z} \quad \ddot{y} \mathbf{2\ ),} \tag{35}$$

mit der Einschwingzeit

$$\ddot{y} = \frac{\ddot{y}(\ddot{y}+1)}{\mathbf{2\ \min\{k1\ddot{y}1,k2\ddot{y}2\}}} \quad \ddot{y}1\,\ddot{y} \mathbf{,}$$

wenn z ÿ z $\ddot{y}$ **2** $= \frac{\ddot{y}(\ddot{y}+1)}{\mathbf{2}\ \min\{k1\ddot{y}1\ ,k2\ddot{y}2\}}$ $\ddot{y}1\,\ddot{y}$ **, können wir daraus schließen, dass**

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

Folglich erreichen die Master-Slave-Systeme, die durch die Gleichungen **(9) und (24) bezeichnet werden, stabile und synchronisierte Zustände innerhalb einer endlichen Dauer gemäß Definition 7.**

6. Numerische Beispiele mit Simulationen

In diesem Abschnitt präsentieren wir eine Reihe verschiedener Beispiele, um die Prinzipien der Stabilität und Synchronisierung in begrenzter Zeit innerhalb des Degn-Harrison-Systems zu veranschaulichen. Diese Beispiele untersuchen verschiedene Szenarien, darunter verschiedene Anfangsbedingungen, Parameterwerte und Steuerungsstrategien, und bieten Einblicke in das Verhalten des Systems. Durch detaillierte Analysen und numerische Simulationen möchten wir ein umfassendes Verständnis davon vermitteln, wie sich Stabilität und Synchronisierung in begrenzter Zeit in praktischen Kontexten manifestieren, und so Licht auf die Dynamik des Degn-Harrison-Systems werfen.

Die numerischen Simulationen in diesen Beispielen werden mit der Methode der finiten Differenzen durchgeführt , einem wichtigen Werkzeug zur Analyse von Degn-Harrison-Reaktions-Diffusionssystemen mit gebrochener Ordnung. Diese Methode diskretisiert partielle Differentialgleichungen in algebraische Gleichungen und ermöglicht so eine präzise numerische Approximatio Indem die Methode der finiten Differenzen die Simulation komplexer Phänomene, Stabilitätsanalysen und Parameteroptimierungen erleichtert, verbessert sie unser Verständnis chemischer und biologischer Systeme.

Beispiel 1. Wir definieren die Domäne **ÿ** = **[0, 25]** und den Parameter **z** im Bereich von **[0, 100].** Die Parameterwerte werden wie folgt gewählt:

Variable	Wert
k1	1
k2	1
A	0,78
B	0,01275
Q	0,75
P	0,5774
	104
ÿ1	104
ÿ2 ÿ	0,99
N	150

mit Anfangsbedingungen:

$$\mathbf{E1,0(r) = 0,5(1\ \ddot{y}\ \cos(5r)),}$$
$$\mathbf{E2,0(r) = 0,15(1\ \ddot{y}\ \sin(4r)).} \tag{37}$$

Die Bedingungen von Theorem 3 sind erfüllt:

$$\mathbf{|E2| < K = 0,3,\ P\ \ddot{y}\ \max} \quad \mathbf{5\ K,\ \frac{1}{4\ 2\ \ddot{y}\ q}} = \mathbf{0,5774,}$$

$$\mathbf{\min\{k1\ddot{y}1\ \ddot{y}\ 2P + 1,k2\ddot{y}2\ \ddot{y}\ 2P\} = 9,9988 \times 103\ .} \tag{38}$$

Machine Translated by Google

Durch Berechnung erhalten wir:

$$\begin{aligned} &L2(0) = \mathbf{16{,}8056,} \\ &\mathbf{L2(100)} = \mathbf{8{,}4449 \times 10ÿ6} \quad \text{'} \end{aligned} \tag{39}$$

Die Zeit der Stabilität des Gleichgewichtspunktes in begrenzter Zeit wird wie folgt geschätzt:

$$\overset{ÿ}{z}_1 = \frac{L2(0)}{\mathbf{1{,}k2ÿ2\ ÿ\ 2P\}L2(100)} = \mathbf{99{,}5134s,\ 2\ min\{k1ÿ1\ ÿ\ 2P} + \tag{40}$$

Wo

$$\mathbf{L2(99{,}5082)} = \mathbf{8{,}6830 \times 10ÿ6\ .} \tag{41}$$

Die in den Abbildungen 1 und 2 dargestellten Abbildungen zeigen die räumlich-zeitlichen Lösungen des Systems (9) mit homogenen Neumann-Randbedingungen. Nach Theorem 3 veranschaulichen diese Lösungen die Stabilität in begrenzter Zeit am Gleichgewichtspunkt **E ÿ** = **(0,7672, 0,0240).** Um diese Behauptung numerisch zu bestätigen, zeigt Abbildung 3 die räumlich-zeitlichen Lösungen des Systems neben den entsprechenden Fehlern, wobei der Schwerpunkt speziell auf dem eindimensionalen Raum liegt. Diese visuelle Darstellung veranschaulicht überzeugend, dass die Lyapunov-Funktion gegen Null konvergiert, wenn sich **z z** = **99,5134** s nähert (wie in Abbildung 4 dargestellt).

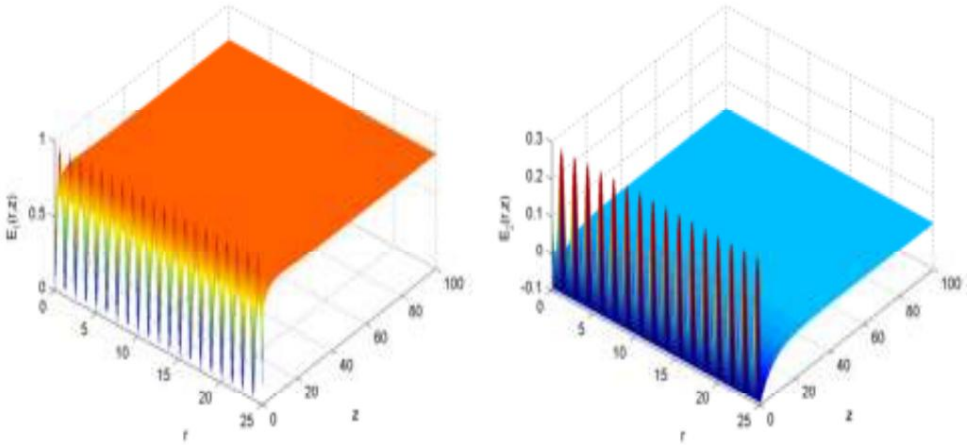


Abbildung 1. Dynamisches Verhalten des Systems (9): E1(r,z) und E2(r,z).

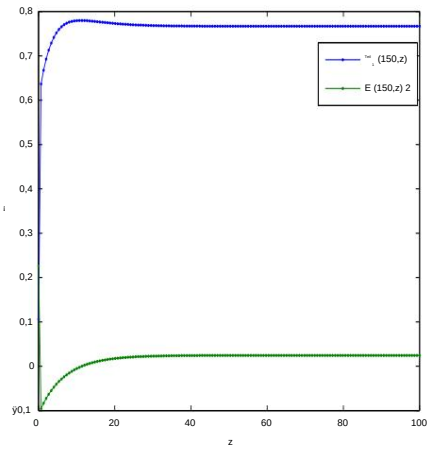


Abbildung 2. Lösungen des Systems (9): E1(150,z), E2(150,z).

Machine Translated by Google

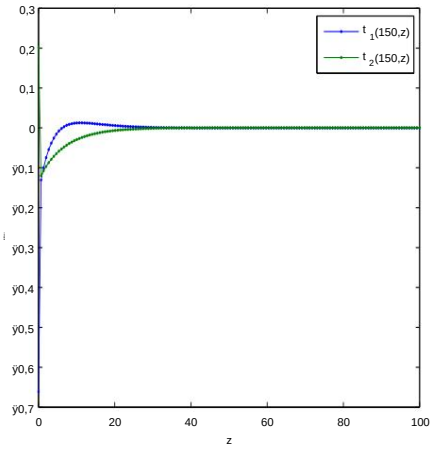


Abbildung 3. Lösungen des Fehlersystems (9): e1(150,z), e2(150,z).

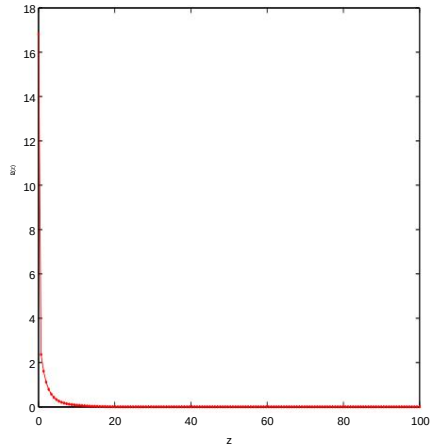


Abbildung 4. Schätzung der Ljapunow-Funktion L2(z) .

Beispiel 2. Die Parameter werden wie folgt angegeben:

Parameter	Wert
k1	**0,1885**
k2	**0,1885**
A	**3**
B	**1,25**
	1
q ÿ	**0,9**
P	**3.7**
ÿ1	**0,6**
ÿ2	**0,6**
N	**50**

mit dem Definitionsbereich **ÿ** = **[0, 10]** und **z ÿ [0,** 5]. Die Anfangsbedingungen für die Master–Slave-Systeme (9) und (24) werden wie folgt festgelegt:

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

Wir möchten zwei Controller formulieren, die als **C1** und **C2** bezeichnet werden und im Folgenden beschrieben werden:

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

Machine Translated by Google

haben wir L3(0) = **12,5** und

$$L3(z) \ddot{y} \mathbf{M(z)} = 12{,}5E0{,}9 \ddot{y}\mathbf{0{,}2262z}^{\mathbf{0,9}}, \ddot{y}z \ddot{y} [0,z_2), \quad (44)$$

Die Synchronisierungszeit wird wie folgt geschätzt:

$$z_2^{\ddot{y}} = \frac{\ddot{y}(\ddot{y}+1)}{2\ \mathbf{min\{k1\ddot{y}1,k2\ddot{y}2\}}}^{\ddot{y}1\,\ddot{y}} = \mathbf{4{,}9937\ s}, \quad (45)$$

Und

$$L3(5) \ddot{y} \mathbf{L3(4{,}9937)} = \mathbf{4{,}6605 \times 10\ddot{y}6}, \quad (46)$$

wobei **4,9937 ÿ z ÿ** 5. Wir können daraus schließen, dass

$$L3(z) \ddot{y} \mathbf{0.} \quad (47)$$

Die Abbildungen 5–7 zeigen die räumlich-zeitliche Dynamik der Systeme (9) und (24) und geben Einblicke in zwei- und eindimensionale Räume. Um numerische Beweise zu liefern, präsentieren wir die räumlich-zeitlichen Lösungen des Fehlersynchronisationssystems (30) in den Abbildungen 7 und 8. Diese Entwicklung zeigt deutlich, dass die Fehler gegen Null konvergieren, wenn **z** sich **z** = **4,9937** s nähert , und veranschaulicht damit das zeitlich begrenzte Verhalten des Systems. Darüber hinaus veranschaulicht Abbildung 9 diese zeitlich begrenzte Konvergenz innerhalb der angegebenen Dauer **z** = **4,9937** s. $z_2^{\ddot{y}}$

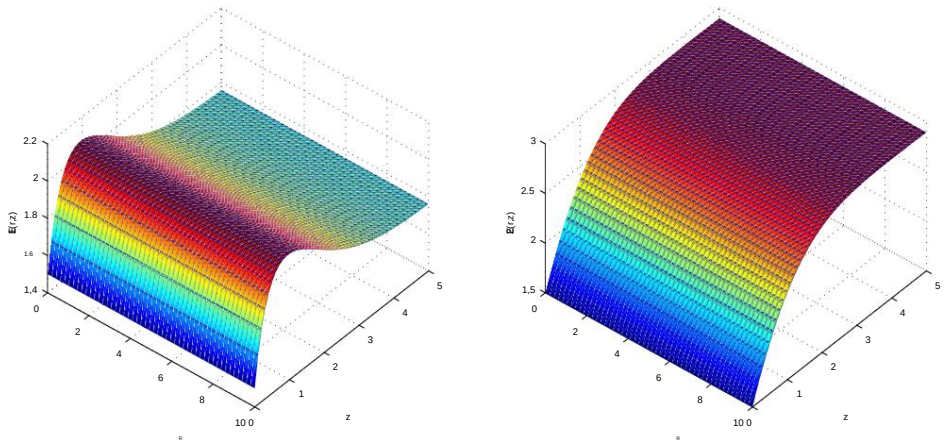


Abbildung 5. Dynamisches Verhalten des Systems (9): E1(r,z) und E2(r,z).

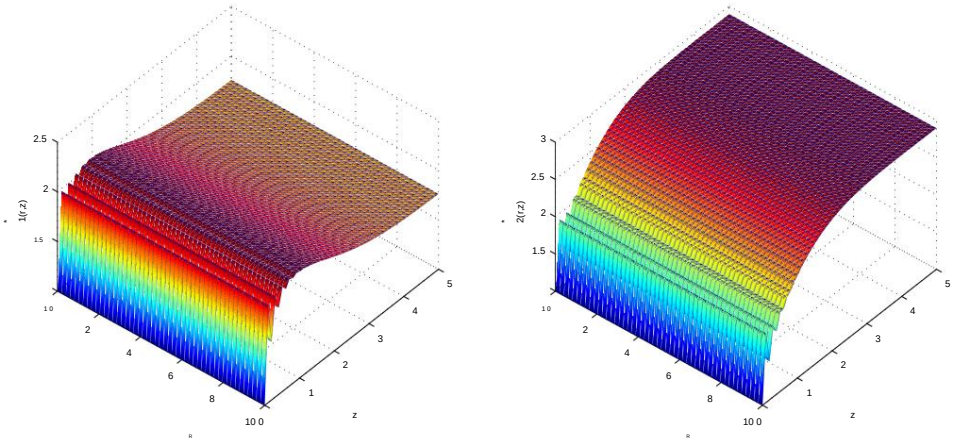


Abbildung 6. Dynamisches Verhalten des Systems (24): E¯1(r,z) und E¯2(r,z).

Machine Translated by Google

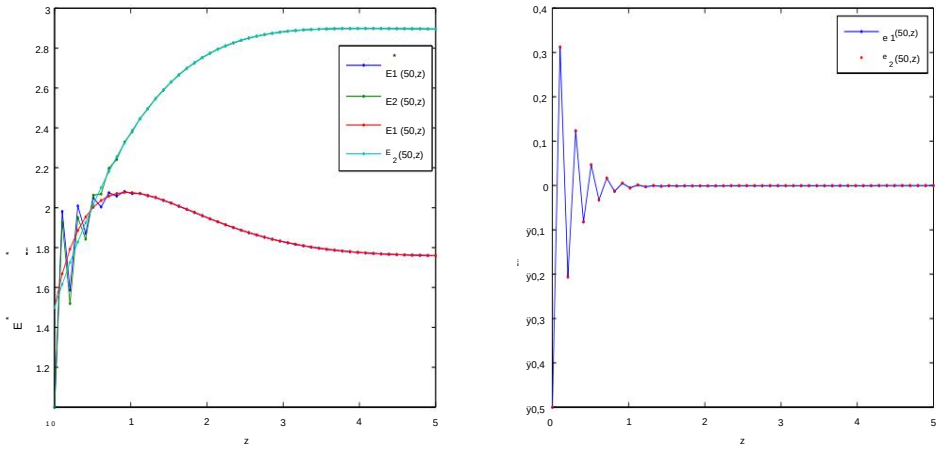


Abbildung 7. Lösungen der Master–Slave-Systeme (9), (24) und des Fehlersystems (30) bei r = 50.

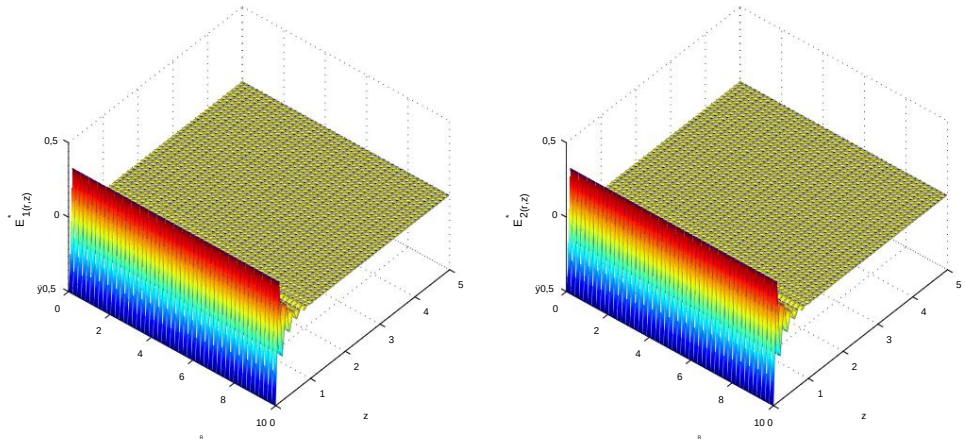


Abbildung 8. Dynamisches Verhalten des Fehlersystems (30): e1(r,z) und e2(r,z).

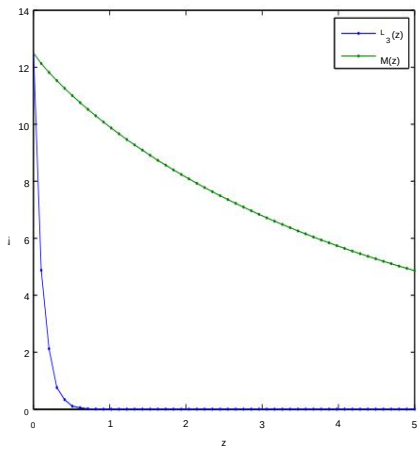


Abbildung 9. Schätzung der Ljapunow-Funktionen L3(z) **und M(z).**

7. Schlussfolgerungen

Diese Studie markiert den Beginn einer innovativen Erforschung der Degn-Harrison-Reaktions-Diffusionssysteme und führt neuartige Variationen ein, die neue Komplexitätsebenen innerhalb räumlich-zeitlicher Modelle aufdecken sollen. Unsere Forschung zielt darauf ab, Methoden zur Untersuchung sowohl der Stabilität in begrenzter Zeit als auch der Synchronisierung in begrenzter Zeit innerhalb dieser Modelle zu entwickeln und ein umfassendes Verständnis ihrer Dynamik zu ermöglichen, insbesondere im Kontext nichtlinearer Bakteri

Machine Translated by Google

Grundprinzipien der Lyapunov-Theorie, um robuste Rahmenbedingungen für die Analyse der Stabilität von Gleichgewichtspunkten und Synchronisationsphänomenen in begrenzter Zeit zu schaffen. Diese theoretischen Grundlagen dienen als Basis für unsere nachfolgenden experimentellen Bemühungen. Um die Wirksamkeit und Zuverlässigkeit unserer vorgeschlagenen Methoden empirisch zu bestätigen, führen wir umfangreiche Computerexperimente durch. Diese Experimente umfassen gründliche Simulationen von Degn-Harrison-Systemen mit gebrochener Ordnung, die darauf ausgelegt sind, die Dynamik und das Verhalten von Bakterienkolonien im Rahmen von Reaktions-Diffusions-Modellen zu erfassen.

In der nächsten Forschungsphase werden wir uns auf die Erweiterung und Verfeinerung unserer theoretischen Rahmenbedingungen konzentrieren, neue Anwendungen in biologischen Systemen jenseits von Bakterienkolonien erkunden und unsere Computermodelle verbessern, um mehr Effizienz und Genauigkeit zu erreichen. Wir planen, unsere Ergebnisse durch gemeinsame experimentelle Arbeit zu validieren und interdisziplinäre Zusammenarbeit zu fördern, um unterschiedliche Per

Darüber hinaus werden wir unsere Ergebnisse aktiv über verschiedene Kanäle verbreiten. Mit diesen Bemühungen wollen wir das Feld der Reaktions-Diffusionssysteme voranbringen und zu einem tieferen Verständnis komplexer räumlich-zeitlicher Phänomene beitragen. Unser Engagement, die Grenzen des Wissens in diesem dynamischen Forschungsbereich zu erweitern, verspricht in naher Zukunft spannende Entdeckungen und Innovationen.

Beiträge der Autoren: Konzeptualisierung, MAH; Formale Analyse, IB; Untersuchung, AA; Methodik , WGA; Ressourcen, AO und AH; Software, SM; Validierung, AO; Visualisierung, IB und MAH; Schreiben – Überprüfung und Bearbeitung, AH. Alle Autoren haben die veröffentlichte Version **des Manuskripts gelesen und stimmen ihr zu .**

Finanzierung: Diese Forschung erhielt keine externe Finanzierung.

Datenverfügbarkeitserklärung: Die in dieser Studie vorgestellten Originalbeiträge sind im Artikel enthalten. Weitere Anfragen können an den entsprechenden Autor gerichtet werden.

Interessenkonflikte: Die Autoren erklären, dass keine Interessenkonflikte bestehen.

Verweise

1. **Mesdoui, F.; Ouannas, A.; Shawagfeh, N.; Grassi, G.; Pham, VT Synchronisationsmethoden für die Degn-Harrison-Reaktion-Diffusionssysteme.** IEEE Access **2020, 8, 91829–91836. [CrossRef]**
2. **Ouannas, A.; Abdelli, M.; Odibat, Z.; Wang, X.; Pham, VT; Grassi, G.; Alsaedi, A. Synchronisationskontrolle bei Reaktionsdiffusion Systeme: Anwendung auf das Lengyel-Epstein-System.** Komplexität **2019,** 2019, **2832781. [CrossRef]**
3. **Ambrosio, B.; Aziz-Alaoui, MA Synchronisation und Steuerung gekoppelter Reaktions-Diffusionssysteme vom FitzHugh–Nagumo- Typ.** Comput. Math. Appl. **2012,** 64, **934–943. [CrossRef]**
4. **Turkyilmazoglu, M.; Alofi, AS Flüssigkeitswirbelbildung in einem wirbelnden Behälter unter Berücksichtigung der fraktionalen Zeitableitung von Caputo.** Fractal Fract. **2024, 8, 231. [CrossRef]**
5. **Ouannas, A.; Wang, X.; Pham, VT; Grassi, G.; Huynh, VV Synchronisationsergebnisse für eine Klasse von räumlich-zeitlichen partiellen Differentialsystemen mit gebrochener Ordnung basierend auf dem fraktionalen Lyapunov-Ansatz.** Bound. Value Probl. **2019,** 2019, **74. [CrossRef]**
6. **Wang, B.; Ouannas, A.; Karaca, Y.; Xia, WF; Jahanshahi, H.; Alkhateeb, AF; Nour, M. Ein hybrider Ansatz zur Synchronisierung zwischen zwei Reaktionsdiffusionssystemen ganzzahliger und gebrochener Ordnung, angewendet auf bestimmte chemische Modelle.** Fractals **2022,** 30, **2240145. [CrossRef]**
7. **Srivastava, M.; Ansari, SP; Agrawal, SK; Das, S.; Leung, AYT Anti-Synchronisation zwischen identischen und nicht identischen chaotischen Systemen mit gebrochener Ordnung unter Verwendung der aktiven Kontrollmethode.** Nonlinear Dyn. **2014,** 76, **905–914. [CrossRef]**
8. **Jahanshahi, H.; Sajjadi, SS; Bekiros, S.; Aly, AA Über die Entwicklung eines fraktional-hyperchaotischen Wirtschaftssystems variabler Ordnung mit einem nichtlinearen modellprädiktiven Regler.** Chaos Solitons Fractals **2021,** 144, **110698. [CrossRef]**
9. **Khennaoui, AA; Pham, VT; Thoai, VP; Ouannas, A.; Grassi, G.; Momani, S. Von der Lozi-Karte zur fraktionalen memristiven Lozi-Karte. 2023,** 232, 2385–2393 . **[CrossRef]**
10. **Khennaoui, AA; Ouannas, A.; Boulaaras, S.; Pham, VT; Taher Azar, A. Eine fraktionale Karte mit versteckten Attraktoren: Chaos und Kontrolle.** Eur. Phys. J. Spec. Top. **2020,** 229, **1083–1093. [CrossRef]**
11. **Ouannas, A.; Khennaoui, AA; Wang, X.; Pham, VT; Boulaaras, S.; Momani, S. Bifurkation und Chaos in der fraktionalen Form von Karte vom Typ Hénon-Lozi.** Eur. Physik. J. Spec. Spitze. **2020,** 229, **2261–2273. [CrossRef]**
12. **Wu, Y.; Huang, T. Zeitlich begrenzte Synchronisation chaotischer Systeme mit zeitabhängigen Verzögerungen und Parameterfehlanpassungen.** Nichtlineare Dyn. **2024,** 77, **729–736.**
13. **Hu, J.; Wu, X. Zeitlich begrenzte Synchronisierung chaotischer Systeme mit gebrochener Ordnung.** Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul. **2018,** 59, **440–452.**

Machine Translated by Google

14. **Hamadneh, T.; Hioual, A.; Saadeh, R.; Abdoon, MA; Almutairi, DK; Khalid, TA; Ouannas, A. Allgemeine Methoden zur Synchronisierung fraktionaler diskreter Reaktions-Diffusionssysteme, angewendet auf das Glykolysemodell.** Fractal Fract. **2023, 7, 828.** [CrossRef]
15. **Hamadneh, T.; Hioual, A.; Alsayyed, O.; Al-Khassawneh, YA; Al-Husban, A.; Ouannas, A. Das FitzHugh-Nagumo-Modell, beschrieben durch fraktionale Differenzgleichungen: Stabilität und numerische Simulation.** Axioms **2023,** 12, **806.** [CrossRef]
16. **Garvie, MR Finite-Differenzen-Schemata für Reaktions-Diffusionsgleichungen zur Modellierung von Räuber-Beute-Interaktionen in M ATLAB.** Bull. Math. Biol. **2007,** 69, **931–956.** [CrossRef]
17. **Houston, P.; Schwab, C.; Süli, E. Diskontinuierliche hp-Finite-Element-Methoden für Advektions-Diffusions-Reaktionsprobleme.** SIAM J. Numer. Anal. **2002,** 39, **2133–2163.** [CrossRef]
18. **Bueno-Orovio, A.; Kay, D.; Burrage, K. Fourier-Spektralmethoden für fraktionale Reaktions-Diffusionsgleichungen im Raum.** BIT-Nummer. Math. **2014,** 54, **937–954.** [CrossRef]
19. **Mesdoui, F.; Shawagfeh, N.; Ouannas, A. Globale Synchronisierung von N-Komponenten-Reaktionsdiffusionssystemen mit gebrochener und ganzzahliger Ordnung : Anwendung auf biochemische Modelle.** Math. Methods Appl. Sci. **2021,** 44, **1003–1012.** [CrossRef]
20. **Song, G.; Zhang, X.; Wang, Z.; Chen, Y.; Chen, P. Die asymptotische lokale Differenzenmethode der fraktionalen Wellengleichung und seine viskose seismische Wellenfeldsimulation.** Geophysics **2020,** 85, **T179–T189.** [CrossRef]
21. **Al-Husban, A.; Djenina, N.; Saadeh, R.; Ouannas, A.; Grassi, G. Eine neue inkommensurable COVID-19-Variante mit gebrochener Ordnung: Modellierung und dynamische Analyse.** Mathematics **2023,** 11, **555.** [CrossRef]
22. **Samko, SG; Kilbas, AA; Marichev, OI** Bruchintegrale und Ableitungen: Theorie und Anwendungen; **Gordon and Breach Science Publishers: Basel, Schweiz, 1993.**
23. **Feng, Z.; Xiang, Z. Stabilität nichtlinearer Systeme mit gebrochener Ordnung in begrenzter Zeit.** Chaos **2024,** 34, **023105.** [CrossRef] [PubMed]
24. **Ouannas, A.; Abdelmalek, S.; Bendoukha, S.** Koexistenz einiger Chaos-Synchronisierungstypen in Differentialgleichungen mit gebrochener Ordnung; **Texas State University, Fakultät für Mathematik: San Marcos, TX, USA, 2017 .**
25. **Aguila-Camacho, N.; Duarte-Mermoud, MA; Gallegos, JA Lyapunov-Funktionen für Systeme mit gebrochener Ordnung.** Commun. Nichtlinear Sci. Numer. Simul. **2014,** 19, **2951–2957.** [CrossRef]
26. **Yaagoub, Z.; Danane, J.; Hammouch, Z.; Allali, K. Mathematische Analyse eines SEIR-Epidemiemodells mit zwei Stämmen und gebrochener Ordnung.** Ergebnisse nichtlinearer Anal. **2024, 7, 156–175.**
27. **Jiang, J.; Li, H.; Zhao, K.; Cao, D.; Guirao, LG Stabilität in begrenzter Zeit und Gleitmodusregelung für unsichere variable fraktionale Ordnung nichtlinearer Systeme.** Adv. Differ. Gl. **2021,** 2021, **127.** [CrossRef]
28. **Fairén V.; Velarde, MG Zeitperiodische Schwingungen in einem Modell für den Atmungsprozess einer Bakterienkultur.** J. Math. Biol. **1979, 8, 147–157.** [CrossRef]
29. **Lisena, B. Einige globale Ergebnisse für das Degn-Harrison-System mit Diffusion.** Medit. J. Math. **2017,** 14, **91.** [CrossRef]
30. **Abu Falahah, I.; Hioual, A.; Omar Al-Qadri, M.; AL-Khassawneh, YA; Al-Husban, A.; Hamadneh, T.; Ouannas, A. Synchronisation tion fraktionaler partieller Differenzgleichungen mittels linearer Methoden.** Axiome **2023,** 12, **728.** [CrossRef]
31. **Pan, J.; Liu, X.; Zhong, S. Stabilitätskriterien für impulsive Reaktionsdiffusions-Cohen-Grossberg-Neuralnetze mit zeitabhängigen Verzögerungen.** Math. Comput. Model. **2010,** 51, **1037–1050.** [CrossRef]
32. **Wang, L.; Yang, X.; Liu, H.; Chen, X. Synchronisierung in endlicher Zeit von komplexwertigen verzögerten Genregulationsnetzwerken mit fraktionaler Ordnung .** Fractal Fract. **2023, 7, 347.** [CrossRef]
33. **Li, Y.; Yang, X.; Shi, L. Zeitlich begrenzte Synchronisation für kompetitive neuronale Netze mit gemischten Verzögerungen und nicht identischen Störungen.** Neurocomputing **2016,** 185, **242–253.** [CrossRef]
34. **Podlubny, I.** Fractional Differential Equations: Eine Einführung in fraktionale Ableitungen, fraktionale Differentialgleichungen, in Methoden der Ihre Lösung und einige ihrer Anwendungen; **Elsevier: Amsterdam, Niederlande, 1998.**

Haftungsausschluss/Anmerkung des Herausgebers: Die in allen Veröffentlichungen enthaltenen Aussagen, Meinungen und Daten sind ausschließlich die der einzelnen Autoren und Mitwirkenden und nicht die von MDPI und/oder den Herausgebern. MDPI und/oder die Herausgeber lehnen jegliche Verantwortung für Personen- oder Sachschäden ab, die aus den im Inhalt erwähnten Ideen, Methoden, Anweisungen oder Produkten resultieren.

Machine Translated by Google

Berechnung

MDPI

Artikel

Molekulardynamische Simulation des Schmelzens des DNA-Duplexes mit Silber-vermitteltem Cytosin-Cytosin-Basenpaar

Elena B. Gusarova und Natalya A. Kovaleva *

NN Semenov Föderales Forschungszentrum für chemische Physik, Russische Akademie der Wissenschaften, Kossygin-Straße 4, Moskau 119991,
Russland * Korrespondenz: natykov@gmail.com

Zusammenfassung: Metallvermittelte Basenpaare in DNA-Doppelhelix-Molekülen eröffnen aufgrund ihrer geringen Toxizität und Anwendbarkeit im Arzneimitteldesign breite Möglichkeiten für Biosensoren auf der Basis von DNA-Clustern mit Silber . Trotz intensiver experimenteller und rechnerischer Forschung sind die molekularen Mechanismen der Stabilisierung einer Doppelhelix durch silbervermittelte Basenpaare weitgehend unbekannt. Wir haben allatomige Moleküldynamik-Simulationen einer dodekamerischen DNA-Doppelhelix (Sequenz 5ÿ -TAGGTCAATACT- ÿ -3ÿATCCACTTATGA-5ÿ) mit entweder einer Cytosin-Cytosin- oder einer Cytosin-Ag+-Cytosin- Fehlpaarung im Zentrum des Duplexes durchgeführt. Wir haben den zuvor vorgeschlagenen Satz von Interaktionsparametern für ein Silberion im silbervermittelten Paar erweitert, um dessen Dissoziation zu ermöglichen. Mit diesem neuen Potenzial haben wir untersucht, wie die Zugabe eines Silberions eine DNA-Doppelhelix mit einer einzelnen Cytosin-Cytosin-Fehlpaarung stabilisieren könnte . Insbesondere haben wir herausgefunden, dass die Helix mit Cytosin-Ag+-Cytosin- Fehlpaarung eine höhere Schmelztemperatur hat als die Helix mit Cytosin-Cytosin-Fehlpaarung. Dieser stabilisierende Effekt des Silberions steht in qualitativer Übereinstimmung mit experimentellen Daten. Der zentrale Bereich des Duplexes mit Cytosin-Ag+-Cytosin- Fehlpaarung (anders als mit Cytosin-Cytosin-Fehlpaarung) ist stabil genug, um bei mäßigen Temperaturen während des Schmelzens Blasenbildung zu verhindern. Die Ergebnisse dieser Simulation können verwendet werden, um neuartige metallvermittelte DNA-Strukturen zu entwickeln.

Schlüsselwörter: Metall-Basenpaar; Silber-vermittelte DNA; Schmelztemperatur; Molekulardynamik

check for updates

Zitat: Gusarova, EB; Kovaleva, NA Molekulardynamische Simulation des Schmelzens des DNA-Duplexes mit silbervermitteltem Cytosin-Cytosin-Basenpaar. Computation **2024,** 12, **145. https://doi.org/10.3390/calculation12070145**

Wissenschaftlicher Redakteur: Claudio Amovilli

Empfangen: 2. Mai 2024
Überarbeitet: 4. Juli 2024
Akzeptiert: 10. Juli 2024
Veröffentlicht: 12. Juli 2024

Copyright: © 2024 bei den Autoren. Lizenznehmer MDPI, Basel, Schweiz.
Dieser Artikel ist ein Open Access-Artikel vertrieben unter den Bedingungen und Bedingungen der Creative Commons Namensnennungslizenz (CC BY) (https:// creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

1. Einleitung

Die DNA-Doppelhelix wird in der Nanotechnologie häufig für zahlreiche Anwendungen eingesetzt. Ein vielversprechendes Beispiel ist die umfangreiche Suche nach Alternativen für Wasserstoffbrücken (H- Brücken) zwischen komplementären Stickstoffbasen. Ein attraktiver Ansatz ist die Schaffung eines Basenpaars mit Metallkationen, die eine hohe Affinität zu Stickstoffbasen aufweisen. Dieser Ansatz ist vielversprechend für die Schaffung von DNA-basierten Nanomaterialien mit verbesserten thermischen, mechanischen und chemischen Eigenschaften sowie mit neuen Funktionalitäten [1–4]. Eine DNA-Doppelhelix, in der Nukleotidbasen durch ein Metallion anstelle von Wasserstoffbrücken in Watson- Crick-Basenpaaren gepaart sind, wird als metallisierte DNA (M-DNA) bezeichnet [5]. Solche Systeme sind aufgrund **ihrer potenziellen Verwendung als empfindliche und spezifische Metallsensoren und Biosensoren von Interesse [6,7]. In der Regel führt die Einbeziehung nichtkanonischer Basenpaare in homochirale oder heterochirale DNA zu einer Verringerung der Stabilität der Doppelhelix [8]. Eine solche Verringerung hängt in hohem Maße von der spezifischen Struktur der nichtkanonischen Basenpaare, ihrer Natur und der Reihenfolge ab, in der sie eingefügt werden. Im Jahr 2009 beschrieben Ono und Miyake [9] zwei Strukturen mit metallvermittelten Paaren, insbesondere Cytosin–Ag+–Cytosin (C:Ag:C). Ihre Forschung hat aufgrund der hohen Spezifität der Silberbindung [10,11] große Möglichkeiten für die DNA-Nanotechnologie, Nanoelektronik und DNA-Origami eröffnet. Silberionen haben aufgrund ihrer geringen Toxizität und Anwendbarkeit im Arzneimitteldesign** besondere Aufmerksamkeit auf sich gezogen **[12,13]. Infolgedessen wurden zahlreiche Studien über künstliche DNA mit nichtkanonischen Basenpaaren mit Silberionen** **In natürlicher DNA wurde die Silber-vermittelte Paarung in kanonischen Doppelhelices mit Basenpaar-Fehlpaarungen [9] und in Strängen ohne kanonische Paare [18–21] untersucht. Hohe cher**

Machine Translated by Google

und die thermische Stabilität des C:Ag:C-Basenpaars wurde nachgewiesen [22–26], und die Rolle des pH-Werts bei der Stabilität des C:Ag:C-Paares wurde untersucht [27]. Die Wirkung von Silber auf die Schmelztemperatur der DNA-Doppelhelix mit Cytosin-Cytosin-Einschlüssen (C:C) als komplementäres Paar wurde experimentell beobachtet [28,29]. Der Schmelzpunkt eines Oligonukleotids mit C:C-Fehlpaarung wird in Gegenwart von Silberionen in der Lösung erhöht.

Bisher wurden eine Reihe theoretischer Modelle der Basenpaarungsdynamik in DNA mit unterschiedlichen Detaillierungsgraden entwickelt. Diese Modelle stimulieren bedeutende Fortschritte auf dem Gebiet der DNA-Schmelze [30,31]. Die vorgeschlagenen Modelle reichen von der mesoskopischen Ebene (Modelle basierend auf dem Peyrard-Bishop-Modell (PB) [32,33]) bis zum grobkörnigen Modell (CG) mit mehreren Perlen pro Nukleotid [34]. Mesoskopische Modelle wie das PB-Modell und seine Variationen verwenden eine Reihe effektiver Potentiale, um die wichtigsten Wechselwirkungen in der DNA-Doppelhelix zu beschreiben, nämlich die Wasserstoffbrücken und Stapelwechselwirkungen [35–38]. Mithilfe der mesoskopischen Modelle wurde der Einfluss einfacher, doppelter und dreifacher Fehlpaarungen auf die Duplexstabilität untersucht. Es wurde festgestellt, dass viele Kombinationen mehrerer Fehlpaarungen überraschend stabil sind [39]. Schmelzpunkte von Sequenzen mit metallvermittelten C:C- und Thymin-Thymin-Paaren wurden berechnet [40]. Die Verwendung eines CG-Modells, in dem nur einwertige und zweiwertige Ionen berücksichtigt werden, ermöglicht es, experimentelle Schmelztemperaturen für Oligonukleotide zu reproduzieren [41]. In vielen mesoskopischen und CG-Modellen werden das effektive nichtlineare Potential, das Lennard-Jones-Potential [42–44] oder das Morse-Potential [45–47] verwendet, um Wasserstoffl

Das Schmelzen von DNA wurde auch mittels All-Atom-Molekküldynamik (MD) -Simulation untersucht [48–50]. Die Anzahl von All-Atom-MD-Simulationsstudien von DNA mit Metall-vermittelten Paaren ist jedoch sehr begrenzt. Der kürzestmögliche Ag+ -vermittelte Cytosin-Homobase-Duplex, ein Tetramer, das aus Ag+ -Brücken zwischen zwei DNA-Strängen gebildet wird, wurde bereits untersucht [16]. Die Gruppe um Lopez-Acevedo berichtete über eine Studie von Ag+ -gepaarten Cytosin-Homobase-DNA-Strängen unter Verwendung einer Kombination aus Quanten- und klassischen MD-Berechnungen [51]. Sie zeigten, dass eine parallele Doppelhelix eine hohe Stabilität aufweist, während sich eine antiparallele Doppelhelix aufdreht und ihre Helixstruktur verliert. In einer parallelen Doppelhelix sind Cytosine in einer transoiden Konformation gepaart, während sie in einer antiparallelen Doppelhelix eine cisoide Konformation aufweisen (siehe Abbildung 1a,b). Die Bindung im C:Ag:C-Paar in der cisoiden Konformation ist schwächer als in der transoiden Konformation, da zwischen dem Sauerstoff eines Cytosins und der Aminogruppe des komplementären Cytosins eine zusätzliche Wasserstoffbrücke gebildet wird [51–53]. Der in den Arbeiten von Lopez-Acevedo et al. [51] entwickelte Ansatz wurde erfolgreich in der MD-Simulation der silbervermittelten Basenpaarung in parallelsträngiger DNA verwendet [29]. Die MD-Simulation der Zerstörung des C:Ag:C-Paares ist jedoch bislang eine Herausforderung. Die Potentiale werden üblicherweise verwendet, um die Bindung eines Silberions mit dem Stickstoff von Cytosin als kovalente Bindung zu beschreiben. Die MD-Beschreibung einer kovalenten Bindung basiert auf einem harmonischen Potential, das keine Möglichkeit zur Bindungsbrechung bietet. Deshalb muss ein anderes Potential verwendet werden, um die Zerstörung des C:Ag:C-Paares zu beschreiben. Eine Möglichkeit ist die Verwendung des Morsepotentials, das die Effekte der Bindungsbrechung und die Existenz ungebundener Zustände explizit einschließt.

In diesem Artikel schlagen wir vor, das Morsepotential zu verwenden, um die Bindung eines Silberions mit Cytosin in Analogie zu einer Wasserstoffbrücke in einigen mesoskopischen Modellen zu beschreiben. Wir haben eine antiparallele doppelsträngige DNA-Helix mit C:Ag:C-Fehlpaarung simuliert. Wir haben Parameter des Morsepotentials angepasst, die den durch Silber vermittelten Prozess des Schmelzens ein Wir haben Schmelzkurven und geschätzte Schmelztemperaturen erhalten. Wir sind überzeugt, dass Schmelztemperaturstudien von M-DNA unser Wissen über die Eigenschaften der DNA-Doppelhelix im Zusammenhang mit metallvermittelten Basenpaaren sicherlich erweitern werden.

Machine Translated by Google

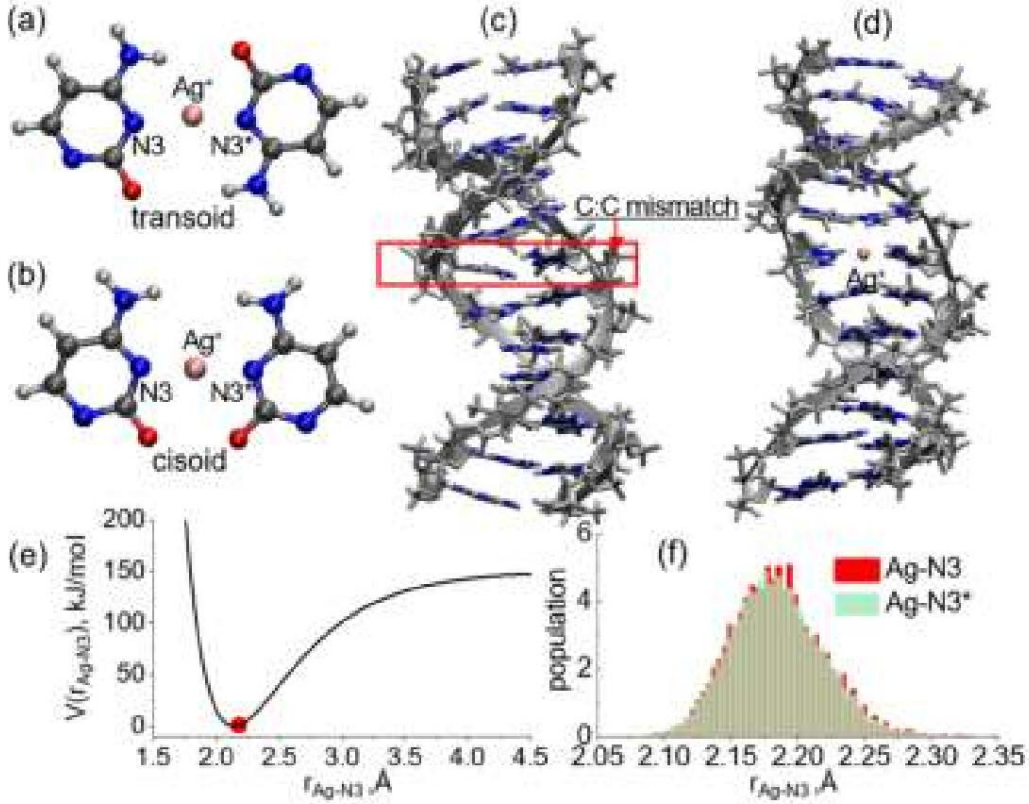


Abbildung 1. Strukturvariationen für das C:Ag:C-Basenpaar: (a) transoide und (b) cisoide Konformationen.
das N3-Atom in der komplementären Base. DNA-Doppelhelix: (c) mit reiner C:C-Fehlpaarung
ns ist und (d) mit C:Ag:C, das während der klassischen MD gebildet wurde. Eine Momentaufnahme der Doppelhelix bei t = 100 ns
(e) Die angepasste Morsepotentialkurve. Der rote Punkt entspricht dem Gleichgewichtswert
MD-Simulation bei einer Temperatur von 300 K. (f) Das Histogramm (Population in Prozent)
Abstand zwischen Silberion und Cytosinstickstoff rAg-N3 bei einer Temperatur von 300 K. Das Histogramm war
2,35. erstellt unter Verwendung von 75 Bins zwischen 2,05 und 2,35.

zu beschreiben [2]. Materialien und Methoden

Ion mit Cytosin in Analogie zu einer Wasserstoffbrücke in einigen mesoskopischen Modellen.

Wir haben eine doppelsträngige DNA-Helix (12 Basenpaare) mit der Sequenz 5ÿ -TAGGTCAATACT-
simulierten eine antiparallele doppelsträngige DNA-Helix mit C:Ag:C-Fehlpaarung. Wir
3haben ÿ -ATCCACTTATGA-5ÿ mit einer Fehlpaarung der Komplementarität in der sechsten Position
Parameter des Morsepotentials, das den Prozess des Schmelzens eines vermittelten Paares
reproduziert, wurden berücksichtigt. Die Ausgangsstruktur wurde mit dem Avogadro-Programm [54] erze
durch Silber. Wir haben Schmelzkurven erhalten und die Schmelztemperaturen abgeschätzt. Wir glauben ,
dass die DNA-Doppelhelix zunächst in eine kubische Box gelegt wurde, so dass der Mindestabstand
dass Schmelztemperaturstudien von M-DNA sicherlich unser Wissen über den Abstand zwischen der Helix
und den Kanten der Box über 1 nm erweitern werden. Dann wurden Wassermoleküle
Eigenschaften der DNA-Doppelhelix, die mit metallvermittelten Basenpaaren zusammenhängen.
dem System hinzugefügt. Wir verwendeten das TIP3P-Wassermodell. Um die Ladung des
System wurden 22 Na+ Ionen in die Berechnungszelle gegeben. Die Berechnungen wurden durchgeführt
2. Materialien und Methoden
in einer periodischen Zelle unter Verwendung stochastischer Dynamik als Thermostat. Bewegungsgleichungen wurden
Leap-Frog-Version des Verlet-Algorithmus. Der Integrationsschritt war
Doppelsträngige DNA-Helix (12 Basenpaare) mit der Sequenz 5ÿ TAGGTCAATACT- integriert mit einer
3ÿ 3ÿ ATCCACTTATGA-5ÿ mit einer Fehlpaarung der Komplementarität in der sechsten Position, als 2 fs.
Die konstante Temperatur wurde mit einem stochastischen Thermostat aufrechterhalten, und konstant
C:C wurde berücksichtigt. Die Ausgangsstruktur wurde mit dem Avogadro-Programm [54] erzeugt. Der Druck
wurde mit einem Parrinello-Rahman-Barostaten mit einer Zeitkonstante von 2 ps aufrechterhalten.
mit Wasserstoffatomen mithilfe des LINCS-Algorithmus eingeschränkt wurden. Der Cutoff
Zunächst wurde die DNA-Doppelhelix in eine kubische Box gelegt, so dass die minimalen Bindungen
Der Abstand zwischen der Helix und den Kanten der Box überschritt 1 nm. Dann wurden dem System
Die Radien für Coulomb- und Van-der-Waals-Wechselwirkungen wurden mit 15 Å angenommen. PME-Methode
Wassermoleküle hinzugefügt. Wir verwendeten das TIP3P-Wassermodell. Zur Neutralisierung der Ladung
wurden Coulomb-Wechselwirkungen unter periodischen Randbedingungen in MD-Simulationen unter Verwendung der Gromacs
Zur Verwendung.
Zur Durchführung der Berechnungen wurde das Softwarepaket 2023.1 [55]
in einer periodischen Zelle unter Verwendung stochastischer Dynamik als Thermostat. Bewegungsgleichungen
integriert mit einer Leap-Frog-Version des Verlet-Algorithmus. Der Integrationsschritt betrug 2 fs. [56]
zwischen Cytosin und einem Silberion wurden der Literatur entnommen, wobei einige
Modifikationen wie folgt. Partielle Ladungen von Atomen auf Cytosin, die mit Silberionen interagieren
Der Druck wurde mit einem Parrinello-Rahman-Barostaten mit einer Zeitkonstante von 2 ps aufrechterhalten.
Eine ungefähre Wasserstoffgeometrie wurde mit [56] LINCS-Algorithmus eingeschränkt. Das 12-6 Lennard-Jones (LJ)-Modell w
für Coulomb- und Van-der-Waals-Wechselwirkungen wurden 15 Å angenommen. Für Van-der-Waals-
Wechselwirkungen wurde die PME-Methode verwendet. Die Werte der nicht gebundenen Wechselwirkungsparameter fü

Machine Translated by Google

Das LJ-Potential für Ag+ (ÿ **= 2,731 Å und** ÿ **= 0,16316922 kJ/mol) und die Partialladung eines Silberions (qAg = 0,38272) wurden aus [57] übernommen,** die zuvor für **die Silber-vermittelte Basenpaarung in doppelsträngiger DNA in** [29,51] **validiert wurden .**

Um die Bindungsdissoziation des Silberions vom N3-Atom des Cytosins zu simulieren, wählten wir das Morsepotential. Das Morsepotential schließt explizit bindungsbrechende Effekte wie die Existenz ungebundener Zustände ein:

$$V(r) = De(1 - e^{-\ddot{y}(r-re)})^2, \quad (1)$$

wobei r **der Abstand zwischen N3- und Ag-Atomen,** re **der Gleichgewichtsbindungsabstand,** De **die Tiefe des Topfes und** ÿ **die „Breite“ des Potenzials ist. Der Gleichgewichtsbindungsabstand re** = **2,14 Å ist aus quantenmechanischen Berechnungen bekannt und wurde erfolgreich in MD-Simulationen sowohl transoider als auch cisoider Paare C:Ag:C verwendet [29,51]. Die Parameter des Morsepotenzials** ÿ **und** De **wurden als Ergebnis eines unten beschriebenen Optimierungsverfahrens erhalten.**

Das Optimierungsverfahren der Morsepotentialparameter bestand aus zwei Schritten. Zuerst haben wir den Wert des Parameters ÿ bestimmt. Die Idee besteht darin, die Geometrie des C:Ag:C-Paares beizubehalten, die aus quantenmechanischen Berechnungen [51] bestimmt wurde, insbesondere indem der Gleichgewichtswert des Winkels N3-Ag+ -N3* an einen mit der DFT-Methode ermittelten Wert angepasst wird. Um dieses Verfahren durchzuführen, haben wir den Parameter De **= 200 kJ/mol festgelegt, was die Energie der Wasserstoffbrücke übersteigt. Ein so großer** De -Wert **ist erforderlich, um eine spontane Dissoziation des C:Ag:C-Paares bei thermischen Schwingungen zu verhindern. Der Anfangswert des Parameters** ÿ wurde so gewählt, dass die „Breite“ des Morsepotentials der „Breite“ des **harmonischen Potentials aus [51] ähnelt .**

Die Autoren von Ref. [51] führten harmonische Bindungspotentiale sowie Winkel- und Diederpotentiale ein, um den Winkel N3-Ag+ -N3* nahe an den quantenchemischen Werten zu halten. Wir haben anstelle dieser das Morsepotential verwendet und mussten daher die „Breite“ des Potentialtopfs optimieren.

Wir wählten einen Wertebereich für den Parameter ÿ. Für jeden Wert ÿ führten wir eine MD-Simulation bei einer Temperatur von 300 K mit einer Länge von 10 ns durch und ermittelten den Gleichgewichtswert des Valenzwinkels N3-Ag+ -N3*. Es stellte sich heraus, dass ÿ **= 2,0** Åÿ1 den **quantenchemischen Werten am nächsten kommt [51].**

Der nächste Schritt war die Optimierung des Parameters De . Der Parameter De **ist mit der Dissoziationsenergie verbunden. Wir führten eine Reihe von MD-Simulationen durch, bei denen das System wie oben beschrieben erhitzt wurde. Wir reduzierten den Parameter** De **für jede Simulation. Wir berechneten die Schmelzkurven bei jedem Wert des Parameters** De . **Der optimierte Wert ist** De **= 150 kJ/mol.**
Ein weiterer Abfall ging mit dem Schmelzen der Doppelhelix mit dem Silberion bei den gleichen Temperaturen einher wie ohne Silberion. Abbildung 1e zeigt die angepasste Kurve des Morsepotentials mit optimierten Parametern.

Wir haben zwei Arten von MD-Simulationen einer DNA-Doppelhelix durchgeführt: Gleichgewichtsdynamik bei 300 K und Schmelzsimulation. Beide Simulationen begannen mit einer Relaxationsphase, gefolgt von einem Produktionslauf. Die Relaxationsphase bestand aus Energieminimierung mithilfe der konjugierten Gradientenmethode und MD-Simulationen unter Bedingungen konstanten Volumens (NVT-Ensembles) und konstanten Drucks (NPT-Ensembles) bei einem konstanten Druck von 1,0 Bar und einer Temperatur von 300 K für 10 ns. Nach der Relaxation wurde die Dynamik des Systems für 100 ns bei einer Temperatur von 300 K berechnet. Die Schmelzsimulation begann mit der Konfiguration des Systems, die der Gleichgewichtsdynamik bei 300 K entnommen wurde. Das System wurde alle 20 ns in Temperaturschritten von 10 K erhitzt. Die MD-Simulationen wurden bei Temperaturen zwischen 300 K und 460 K durchgeführt.

Basierend auf den erhaltenen MD-Trajektorien wurden die Wasserstoffbrücken (H-Bindungen) berechnet. Bei der Erkennung von H-Brücken wurde das bekannte geometrische Kriterium verwendet: Eine H-Brücke zwischen Basenpaaren besteht, wenn der Abstand zwischen zwei elektronegativen Atomen weniger als 3,5 Å beträgt und der H-Brückenwinkel kleiner als 30° ist [58].

Machine Translated by Google

3. Ergebnisse

3.1. Dynamik und Stabilität der DNA-Doppelhelix mit C:C- oder C:Ag:C-Fehlpaarung

Da wir ein neues Potential anbieten, untersuchten wir die Stabilität der Dodekamer-Doppelhelix in Gegenwart eines Silberions. Daher wurde nach Abschluss des Äquilibrierungsprozesses eine MD-Simulation bei konstanter Temperatur (300 K) und Druck (NPT) für 100 ns durchgeführt , von denen die letzten 50 ns für die Analyse verwendet wurden. Das ursprüngliche Potential wurde verwendet, um die Wechselwirkung des Silberions mit Cytosinatomen zu beschreiben. Diese Änderungen wirken sich nicht auf andere Wechselwirkungsparameter aus und sollten die Struktur der Doppelhelix außerhalb der C:C-Paarfehlpaarung nicht beeinflussen. Die Doppelhelix in Gegenwart des Silberions bei 300 K war stabil und hatte eine durchschnittliche Anzahl von Wasserstoffbrücken, die sogar größer war als in der Simulation mit einer C:C-Fehlpaarung in Abwesenheit eines Silberions. Die Anwesenheit von Silberionen in einem System mit einer C:C-Fehlpaarung führt zu einer Erhöhung der Stabilität der Doppelhelix. Abbildung 1c,d zeigt typische Schnapps

Abbildung 1f zeigt ein Histogramm des rAg-N3- Abstands zwischen dem Silberion und dem Cytosinstickstoff . Man kann erkennen, dass der Gleichgewichtsabstand der MD-Simulation rAg-N3 = 2,18 ± 0,003 Å in enger Nachbarschaft um den Gleichgewichtsabstand zwischen dem Silberion und dem Cytosinstickstoff streut, was mit den Literaturdaten übereinstimmt [51]. Wir verglichen diesen Gleichgewichtsabstand auch mit dem potenziellen Minimum (Abbildung 1e). Der Gleichgewichtswert liegt nahe am potenziellen Minimum. Die Verschiebung ist auf die Anwesenheit anderer **hochgeladener Cytosinatome in unmittelbarer Nähe der Stickstoff-Silber-Bindung zurückzuführen .**

Die zunehmende Stabilität des C:C-Paares in Gegenwart des Silberions lässt sich gut durch den rN3-N3- Abstand zwischen den N3-Stickstoffatomen der Cytosine im silbervermittelten Paar charakterisieren. Abbildung 2a zeigt den rN3-N3- Abstand. Der durchschnittliche Abstand zwischen den N3-Atomen der Cytosine in Abwesenheit von Silberionen bei einer Temperatur von 300 K beträgt rN3-N3 = 3,97 ± 0,27 Å. In Gegenwart des Silberions beträgt der N3-N3-Abstand rN3-N3 = 4,31 ± 0,07 Å, was höher ist als im C:C-Paar, aber das C:Ag:C-Paar ist stabiler , wie die Standardabweichung vom Durchschnitt zeigt. In diesem Fall beobachteten wir große Deformationen des C:C-Paares und die vorübergehende Bildung einer Wasserstoffbrücke zwischen der NH2-Gruppe eines Cytosins und dem N3-Atom eines anderen Cytosins. Eine solche Wasserstoffbrücke erwies sich jedoch als instabil.

Wir haben auch die lokalen Basenpaarparameter der DNA-Doppelhelix in Abwesenheit und Anwesenheit des Silberions berechnet. Die lokalen Basenpaarparameter für das C:C-Paar unterscheiden sich im Vergleich zu benachbarten Paaren aufgrund der Abwesenheit eines Silberions erhebl Lokale Basenpaarparameter wie Öffnung, Scherung und Dehnung erwiesen sich als am auffälligsten (siehe Abbildung 3a–c).

In Gegenwart des Silberions ist das Profil der Scher- und Dehnungsparameter entlang der Helix nahezu flach (siehe Abbildung 3d,e). Dies deutet auf eine höhere Stabilität des silbervermittelten C:C-Paares hin. Der nicht typische Öffnungswert ist ein Hinweis auf das C:C-Paar mit der kisoiden Konformation und spiegelt die besonderen Merkmale dieses nichtkanonischen Paares

Die Struktur des durch Silber vermittelten Cytosinpaars in der transoiden und der cisoiden Konformation kann unterschiedlich sein, wie in [51] mit der DFT-Methode gezeigt wurde. In unserem Fall liegt das C:C-Paar in der cisoiden Konformation vor, wie bei antiparallelen Helices. Die anfängliche cisoide Konformation wandelt sich während der Simulation nicht in eine transoide um. Die zwischen dem Silberion und den Cytosinen in der Koordinationsbindung gebildeten Winkel sind in Tabelle 1 aufgeführt. Es ist eine leichte Verschiebung der Gleichgewichtswinkel zu beobachten, die auf eine Verschiebung des Silberions **in Richtung der Cytosin-Sauerstoffe hindeutet .**

Machine Translated by Google

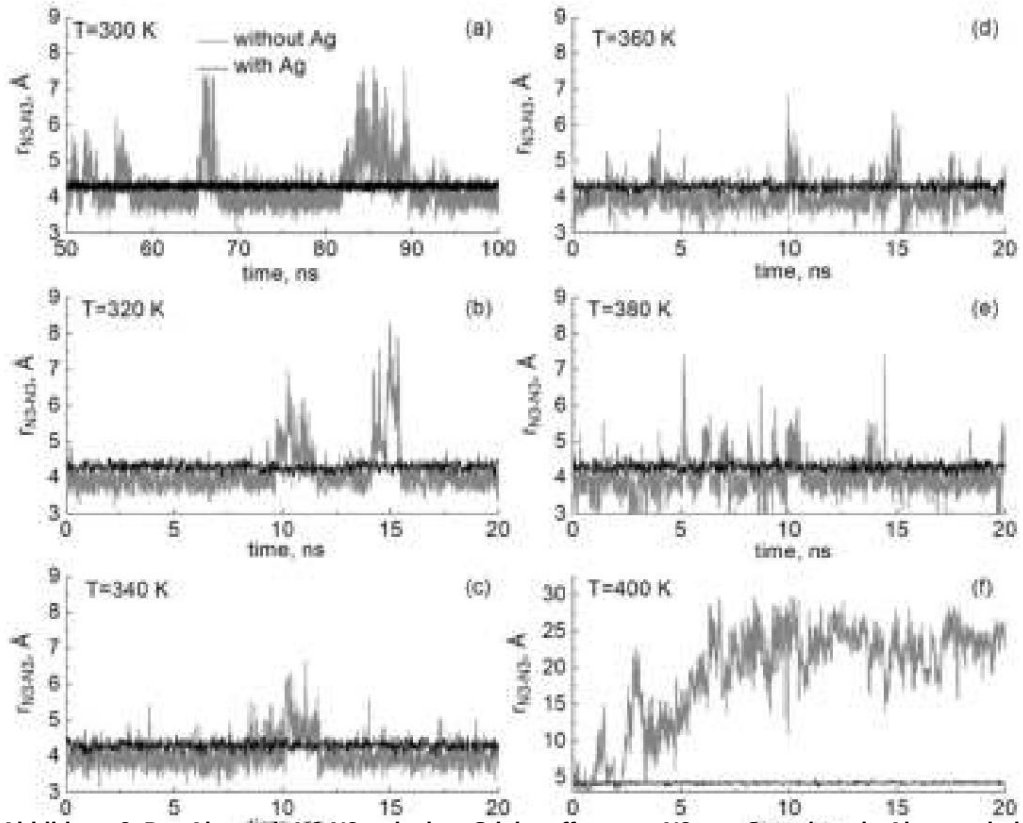


Abbildung 2. Der Abstand rN3-N3 zwischen Stickstoffatomen N3 von Cytosinen in Abwesenheit eines Silbe

(dicke graue Linie) und in Gegenwart des Silberions (dünne schwarze Linie) spiegelt die Stabilität des C wider: Abbildung

2 Der Abstand rN3-N3 zwischen Stickstoffatomen N3 von Cytosinen in Abwesenheit eines Silberions Abbildung
und C:Ag:C-Paare: (a) Ein 50 ns-Intervall am Ende des analysierten Zeitintervalls für die Temperatur (dicke
grau (dicke graue Linie) und in Gegenwart des Silberions (dünne schwarze Linie) spiegelt die Stabilität des
unter C:Ag:C-Paare: (a) Ein Intervall von 50 ns am Ende des analysierten Zeitintervalls für die Tempe
300 K. (b–f) Ein Zeitintervall von 20 ns für die Temperaturen 320 K (b), 340 K (c), 360 K (d), 380 K (e), 40
K (f).

Temperatur C:Ag:C-Paare: (a) Ein Intervall von 50 ns am Ende des analysierten Zeitintervalls für die Tempe

300 K. (b–f) Ein Zeitintervall von 20 ns für die Temperaturen 320 K (b), 340 K (c), 360 K (d), 380 K (e), 400 (b–f) Ein

Zeitintervall von 20 ns für die Temperaturen 320 K (b), 340 K (c), 360 K (d), 380 K (e), 400 K (f).

K (f).

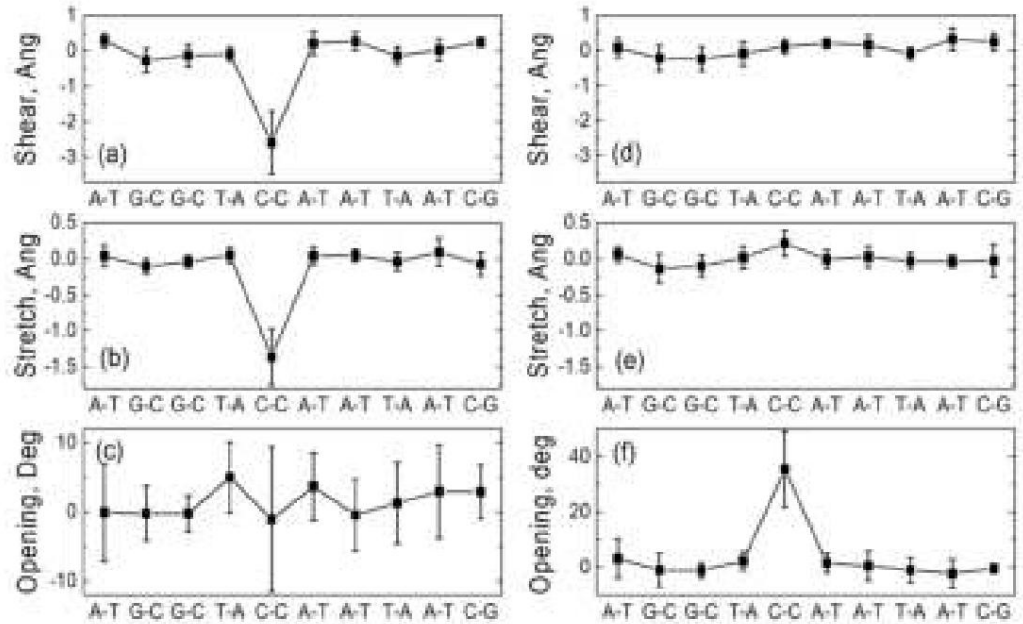


Abbildung 3. Lokale Basenpaarparameter: Scherung, Dehnung und Öffnung für den Fall der Abwesenheit (a–c)

Abbildung 3. Lokale Basenpaarparameter: Scherung, Dehnung und Öffnung für den Fall der Abwesenheit (a–c) und Anw
Anwesenheit (d–f) des Silberions.

und Abbildung 3. Lokale Basenpaarparameter: Scherung, Dehnung und Öffnung im Falle der Abwesenheit (a–c) und

Vorhandensein (d–f) des Silberions.

In Gegenwart des Silberions ist das Profil der Scher- und Dehnungsparameter entlang der Helix nahezu flach (siehe Abbildung 3d,e). Dies deutet auf eine höhere

Stabilität der silbervermittelten in Gegenwart des Silberions ist das Profil der Scher- und

Dehnungsparameter entlang der Helix nahezu flach (siehe Abbildung 3d,e). Dies deutet auf eine h

Machine Translated by Google

1. Es ist eine leichte Verschiebung der Gleichgewichtswinkel zu beobachten, die auf eine Verschiebung des Silberions in Richtung der Cytosin-Sauerstoffe hinweist.

Tabelle 1. Winkel, die durch die Koordinationsbindung zwischen dem Silberion und dem Stickstoffatom N3 von Cytosin gebildet werden. Es wurden die Standardatomnotationen für Nukleotidbasen verwendet.

Winkeltabelle 1. Winkel, die durch die Koordinationsbindung zwischen dem Silberion und dem Stickstoffatom N3 gebildet Cytosin. Es wurden Standardatomnotationen für Nukleotidbasen verwendet.

Winkel	ÿ, (Grad)
N3-Ag+ -N3*	163 ± 8
Ag+ -N3-C2	103 ± 7
Ag+-N3-C4	138 ± 7
N3-Ag+ -N3*	163 ± 8
Ag+ -N3-C2	103 ± 7
N3-C4-N3*	139 ± 7

3.2. Schmelzen der DNA-Doppelhelix mit entweder C:C oder C:Ag:C Fehlpaarung Ag+

haben eine MD-Simulation der DNA-Erhitzung im Bereich von 300 bis 400 K mit 3.2. Schmelzen der DNA-

Doppelhelix mit entweder C:C oder C:Ag:C Fehlpaarung durchgeführt

mit einem Temperaturschritt von 10 K. Mit zunehmender Temperatur schwankt der C:C-Fehlpaarungsabstand stark, was häufig

mit der Öffnung eines C:C-Paares einhergeht. Abbildung Wir haben eine MD-Simulation der DNA-Erhitzung im Bereich

zeigt das rN3-N3 für einige Temperaturen im Bereich von 300 bis 400 K. Bei einer Temperatur von 0 schwankt es stark,

mit einem Temperaturschritt von 10 K. Mit zunehmender Temperatur wird der C:C-Fehlpaarungsabstand

Bei 400 K ist das C:G-Paar bereits vollständig zerstört (Abbildung 2f). In Gegenwart von th

zeigt sich das rN3-N3 für einige Temperaturen im Bereich von 300 bis 400 K. Bei einer Tempe

Silberionen bei einer Temperatur von 400 K ist das C:Ag:C-Paar stabil. Bei der Zerstörung dieses

Paares bei 400 K ist das C:C-Paar bereits vollständig zerstört (Abbildung 2f). In Gegenwart des

fällt mit dem Schmelzen der Doppelhelix bei 410 K zusammen. Silberionen

bei einer Temperatur von 400 K ist das C:Ag:C-Paar stabil. Die Zerstörung dieses Paares

Die maximale Anzahl an Wasserstoffbrücken in den komplementären Basenpaaren fällt mit dem Schmelzen der

Doppelhelix bei 410 K zusammen.

Die betrachtete Sequenz ist 25. Im Verlauf der MD-Simulation ist die maximale Anzahl von Wasserstoffbrücken in den

komplementären Basenpaaren in der

bekannte Sequenz, die in Betracht gezogen wird, ist 25. Im Verlauf der MD-Simulation wird jedoch eine

Eine geringere Anzahl von Wasserstoffpaaren wird als Folge des Aufreißens von Basenpaaren beobachtet, eine

Prozess in MD-Simulationen. Wenn eine DNA-Doppelhelix mit einem C:C-Paar ohne Silber

C:C-Paar. Ohne eine stabile Verbindung zwischen diesen Cytosinen bildet die Doppelhelix das C:C-Paar. Ohne eine

stabile Verbindung zwischen diesen Cytosinen bildet die Doppelhelix das C:C-Paar.

Blase, und in diesem Fall bilden sich drei schmelzende Hotspots: zwei terminale Paare und das C: eine Blase, und in

diesem Fall bilden sich drei schmelzende Hotspots: zwei terminale Paare und das C:C

Fehlpaarung. Mit dem Silberion zwischen zwei Cytosinen beobachten wir eine stabilere Doppelfehlpaarung . Mit dem

Silberion zwischen zwei Cytosinen beobachten wir eine stabilere Doppelfehlpaarung

Helix, und das Schmelzen erfolgt nur von den terminalen Basenpaaren. Die Schmelzkurven der Helix, und das Schmelzen

erfolgt nur von den terminalen Basenpaaren. Die Schmelzkurven der DNA

DNA-Doppelhelixen in Gegenwart und Abwesenheit eines Silberions sind in Abbildung 4 dargestellt.

I Doppelhelixen in Gegenwart und Abwesenheit eines Silberions sind in Abbildung 4 dargestellt. Sie k

Man kann sehen, dass in Gegenwart des Silberions die Schmelzkurve in Richtung verschoben wird. Man kann sehen,

dass in Gegenwart des Silberions die Schmelzkurve in Richtung verschoben wird.

höheren Temperaturen, wie sie auch in Experimenten [26] und [28] beobachtet wurden.

höheren Temperaturen, wie sie auch in Experimenten [26] und [28] beobachtet wurden.

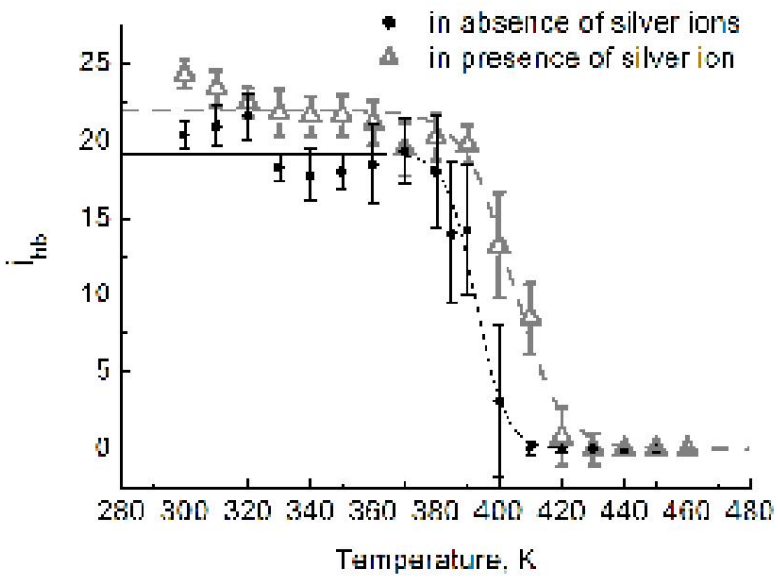


Abbildung 4. Die Anwesenheit des Silberions verschiebt die Schmelzkurve zu höheren Temperaturen. Temperaturabhängigkeit der Anzahl der Wasserstoffbrücken ihb ohne (Kreise) und mit (Dreiecke) Silberionen werden präsentiert.

Tabelle 2 zeigt die Schmelztemperaturen der DNA-Doppelhelix in Abwesenheit und Anwesenheit des Silberions. Wie bei MD-Simulationen üblich, erhalten wir die höhere absolute Werte der Schmelztemperaturen in beiden Fällen (aufgrund der Überhitzung, siehe Diskussion); Wir sind jedoch an dem relativen Effekt interessiert – der Verschiebung der Schmelztemperatur durch die

Machine Translated by Google

Anwesenheit von Silberionen. Diese Verschiebung beträgt in unserem Fall 12 K, was nahe am experimentellen Wert von 7,5 K liegt. Wenn die DNA schmilzt, zerfällt das Metallpaar und das Silberion wird in die Lösung freigesetzt. Das Metallpaar C:Ag:C ist thermisch stabiler als die Wasserstoffbrücken komplementärer Basen, aber in diesem Fall hat es ein Silber-vermitteltes Basenpaar, das ebenfalls einer thermischen Zerstörung unterliegt, wie im Experiment beobachtet wurde [28].

Tabelle 2. Die Schmelztemperaturen für die Doppelhelix in Abwesenheit und Anwesenheit des Silberions im Vergleich mit experimentellen Daten. Die untere Reihe zeigt die Verschiebung der Schmelztemperatur aufgrund der Anwesenheit von Silberionen.

Silberionen	Tm- Experiment [1], K	Tm MD, K
Abwesenheit	299,5	392
Gegenwart	307	404
Temperaturverschiebung ÿTm	7.5	12

[1] Die experimentellen Ergebnisse wurden aus [28] für die gleiche Sequenz übernommen, die in dieser Arbeit untersucht wurde.

4. Diskussion

Wir betrachteten diese Sequenz als robustes Objekt für eine mögliche Validierung, da ihr experimentell ermittelter Schmelzpunkt sowohl in Abwesenheit als auch in Anwesenheit von Silberionen gut be

Wir haben uns für die standardmäßige antiparallele Doppelhelix entschieden, da der MD-Ansatz für solche Objekte gut validiert ist.

Durch die Einführung von Bindungspotentialen zur Beschreibung der Koordinationsbindung zwischen dem Silberion und Cytosin konnten wir die Dynamik des koordinierten Bindungsbruchs direkt modellieren, was zuvor bei der Behandlung dieser Bindungen als kovalent unmöglich war. Das Hauptmerkmal unseres Potentials im Vergleich zu früheren Arbeiten ist, dass die Struktur des C:Ag:C-Paares nicht in der Nähe der Gleichgewichtsposition fixiert ist, sondern in der Nähe dieser Position erheblich schwanken kann, bis hin zur Zerstörung des Paares bei steigender Temperatur. Unsere Berechnungen zeigen, dass die Struktur des Paares der frühen Arbeit entspricht [51].

Die Diskrepanzen bei den absoluten Werten der Schmelztemperaturen zwischen Experimenten [28] und MD-Simulationen sind üblich und werden der Methodik zugeschrieben, die zur Simulation der Nanoproben verwendet wird [59]. In MD-Simulationen wird der Schmelzpunkt durch „langsames“ Erhitzen bestimmt; daher ist die Temperaturänderungsrate im Vergleich zu einem echten Experiment sehr hoch und kann den experimentellen Wert um mehrere Größenordnungen überschreiten. Da der Übergang nicht augenblicklich erfolgt, sondern eine (auf experimenteller Ebene) kleine Zeit benötigt, wird eine Verschiebung beobachtet. Dieser Effekt kann durch die Verwendung von Monte-Carlo-Simulationen anstelle von Molekulardynamik korrigiert werden, was jedoch aufwändigere Berechnungen erfordert. Darüber hinaus wird die Diskrepanz bei der Schmelztemperatur durch die Größe der Simulationszelle und die verwendeten Thermostate beeinflusst. In der Molekulardynamik haben wir es mit einer kleinen Zelle im Nanometerbereich zu tun. In diesem Fall erfolgt die Temperaturänderung augenblicklich im gesamten Volumen. Im Experiment ist die gemessene Zelle makroskopisch und die Temperaturänderungen in ihrem Inneren auf molekularer Ebene erfolgen ungleichmäßig. Daher glauben wir, dass die Diskrepanz zwischen den Schmelztemperaturen im realen Experiment und unseren Ergebnissen kein Nachteil ist. Wir haben eine qualitative Übereinstimmung der Schmelztemperaturverschiebung in Gegenwart eines Silberions im Vergleich zu dem Fall erhalten, in dem kein Silberion vorhanden ist. In diesem Fall beob

5. Schlussfolgerungen

Wir haben das Morsepotential für die silbervermittelte Basenpaarbindung vorgeschlagen und verifiziert , das die Zerstörung der Koordinationsbindung zwischen Cytosin und einem Silberion beschreiben kann . Die verifizierten Potentialparameter ermöglichten es uns, den Prozess des Schmelzens der DNA-Doppelhelix mit einem silbervermittelten Paar und der Zerstörung der Koordinationsbindung zwischen dem Silberion und der Cytosinbase bei steigender Temperatur zu reproduzieren. Die Ergebnisse der Simulationen stehen in guter Übereinstimmung mit experimentellen Daten zur Verschiebung der Schmelztemperatur der DNA-Doppelhelix mit einer C:C-Fehlpaarung in Abwesenheit und Anwesenheit eines Silberions . Da die B-Form-Doppelhelix ein grundlegender Baustein nicht nur im genetischen Code von

Machine Translated by Google

In lebenden Organismen, aber auch in der DNA-Nanotechnologie können metallvermittelte Doppelhelices für die Selbstassemblierung dynamischer DNA-Nanomaschinen verwendet werden. Unsere Ergebnisse eröffnen neue Möglichkeiten für die Entwicklung neuer metallvermittelter 3D-DNA-Materialien mit erhöhter Beständigkeit gegen thermischen, chemischen und möglicherweise enzymatischen Abbau aufgrund der zusätzlichen Stabilität, die durch silbervermittelte Basenpaare gewährleistet wird.

Beiträge der Autoren: Konzeptualisierung, NAK; Methodik, NAK; Validierung, EBG und NAK; Untersuchung, NAK; Schreiben – Vorbereitung des Originalentwurfs, NAK; Schreiben – Überprüfung und Bearbeitung, NAK; Visualisierung, EBG; Überwachung, NAK. Alle Autoren haben die **veröffentlichte Version des Manuskripts gelesen und stimmen ihr zu .**

Finanzierung: Diese Forschung wurde durch das Programm für Grundlagenforschung der Russischen Akademie der Wissenschaften (Projekt Nr. FFZE-2022-0009) unterstützt.

Datenverfügbarkeitserklärung: Die Daten sind im Artikel enthalten.

Danksagungen: Die Berechnungen wurden im Gemeinsamen Supercomputerzentrum der **Russischen Akademie der Wissenschaften durchgeführt .**

Interessenkonflikte: Die Autoren erklären, dass keine Interessenkonflikte bestehen.

Verweise

1. **Yang, H.; Metera, KL; Sleiman, HF Mit Metallkomplexen modifizierte DNA: Anwendungen bei der Konstruktion von höherwertigen Metall-DNA- Nanostrukturen.** Coord. Chem. Rev. **2010,** 254, **2403–2415. [CrossRef]**
2. **Park, KS; Park, HG Technologische Anwendungen, die sich aus den Wechselwirkungen von DNA-Basen mit Metallionen ergeben.** Curr. Opin. Biotechnol. **2014,** 28, **17–24. [CrossRef] [PubMed]**
3. **Scharf, P.; Müller, J. Nukleinsäuren mit metallvermittelten Basenpaaren und ihre Anwendungen.** ChemPlusChem **2013,** 78, **20–34. [Querverweis]**
4. **Swasey, SM; Gwinn, EG Silbervermittelte Basenpaarungen: Auf dem Weg zu dynamischen DNA-Nanostrukturen mit verbesserter chemischer und Thermische Stabilität.** New J. Phys. **2016,** 18, **045008. [CrossRef]**
5. **Albarqouni, Y.; Ali, GA; Hairul, ARM; Chong, KF Auf dem Weg der DNA-Metallisierung: Prinzip, Methoden und aktuelle Anwendungen.** Chem. Adv. Mater. **2020, 5, 1–14.**
6. **Chatterjee, S.; Lou, XY; Liang, F.; Yang, YW Oberflächenfunktionalisierte Gold- und Silbernanopartikel zur kolorimetrischen und fluoreszierenden Erkennung von Metallionen und Biomolekülen.** Coord. Chem. Rev. **2022,** 459, **214461. [CrossRef]**
7. **Ibrahim, N.; Jamaluddin, ND; Tan, LL; Mohd Yusof, NY Eine Übersicht über die Entwicklung eines Biosensors auf Basis von Gold- und Silbernanopartikeln als Nachweisstrategie für neu auftretende und pathogene RNA-Viren.** Sensors **2021,** 21, **5114. [CrossRef]**
8. **Funai, T.; Adachi, N.; Aotani, M.; Wada, SI; Urata, H. Auswirkungen von Metallionen auf die thermische Stabilität von DNA-Duplexen mit homo- und heterochiralen fehlgepaarten Basenpaaren: Vergleich von internen und terminalen Substitutionen.** Nukleoside Nukleotide Nukleinsäuren 2020 , 39, **310–321. [CrossRef] [PubMed]**
9. **Ono, A.; Cao, S.; Togashi, H.; Tashiro, M.; Fujimoto, T.; Machinami, T.; Oda, S.; Miyake, Y.; Okamoto, I.; Tanaka, Y. Spezifische Wechselwirkungen zwischen Silber(i)-Ionen und** Cytosin-Cytosin- **Paaren in DNA-Duplexen.** Chem. Commun. **2008,** 39, **4825–4827. [Querverweis]**
10. **Chai, Y.; Guo, X.; Leonard, P.; Seela, F. Heterochirale DNA mit komplementären Strängen mit ÿ-d- und ÿ-d-Konfigurationen: Wasserstoffbrücken- und silbervermittelte Basenpaare mit Einfluss von 7-Deazapurinen, die Purine ersetzen.** Chem. Eur. J. **2020,** 26, **13973–13989. [CrossRef]**
11. **Jash, B.; Müller, J. Metallvermittelte Basenpaare: Von der Charakterisierung zur Anwendung.** Chem.–Eur. J. **2017,** 23, **17166–17178. [CrossRef] [PubMed]**
12. **Sun, Q.; Xie, X.; Song, Y.; Sun, L. Eine Übersicht über silbervermittelte DNA-Basenpaare: Methodik und Anwendung.** Biomater. Res. **2022,** 26, **9. [CrossRef] [PubMed]**
13. **Raju, SK; Karunakaran, A.; Kumar, S.; Sekar, P.; Murugesan, M.; Karthikeyan, M. Silberkomplexe als Antikrebsmittel: A Perspektivüberblick.** Ger. J. Pharm. Biomater. **2022, 1, 6–28. [CrossRef]**
14. **Sinha, I.; Fonseca Guerra, C.; Müller, J. Ein hochstabilisierendes Silber(I)-vermitteltes Basenpaar in parallelsträngiger DNA.** Angew. Chem. 2015 , 54, **3603–3606. [CrossRef] [PubMed]**
15. **Johannsen, S.; Megger, N.; Böhme, D.; Sigel, RKO; Müller, J. Lösungsstruktur einer DNA-Doppelhelix mit aufeinanderfolgenden Metallvermittelte Basenpaare.** Nat. Chem. **2010, 2, 229–234. [CrossRef]**
16. **Mandal, S.; Hepp, A.; Müller, J. Beispiellose dinukleare Silber(i)-vermittelte Basenpaarung unter Einbeziehung der DNA-Läsion 1,N6-Ethenoadenin.** Dalton Trans. **2015,** 44, **3540–3543. [CrossRef] [PubMed]**
17. **Polonius, F.-A.; Müller, J. Ein künstliches Basenpaar, vermittelt durch Wasserstoffbrücken und Metallionenbindung.** Angew. Chem. Int. Ed. **2007,** 46, **5602–5604. [CrossRef]**

Machine Translated by Google

18. Swasey, SM; Leal, LE; Lopez-Acevedo, O.; Pavlovich, J.; Gwinn, EG Silber(I) als DNA-Kleber: Ag+ -vermittelte Guaninpaarung Aufgedeckt durch Entfernen der Watson-Crick-Einschränkungen. Sci. Rep. **2015, 5, 10163.** [CrossRef] [PubMed]

19. Berdakin, M.; Taccone, MI; Pino, GA; Sánchez, CG DNA-geschützte Silberemitter: Ladungsabhängiges Schalten von Fluoreszenz reszenz. Phys. Chem. Chem. Phys. **2017,** 19, **5721–5726.** [CrossRef]

20. Megger, DA; Müller, J. Silber(I)-vermittelte Cytosin-Selbstpaarung ist gegenüber Hoogsteen-Basenpaarungen mit dem künstlichen Nukleobase 1,3-Dideaza-6-Nitropurin. Nukleoside Nukleotide Nukleinsäuren **2010,** 29, **27–38.** [CrossRef]

21. Ramazanov, RR; Sych, TS; Reveguk, ZV; Maksimov, DA; Vdovichev, AA; Kononov, AI Ag-DNA-Emitter: Metall-Nanostab oder supramolekularer Komplex? J. Phys. Chem. Lett. **2016, 7, 3560–3566.** [CrossRef] [PubMed]

22. Tanaka, Y.; Kondo, J.; Sychrovský, V.; Sebera, J.; Dairaku, T.; Saneyoshi, H.; Urata, H.; Torigoe, H.; Ono, A. Strukturen, physikochemischen Eigenschaften und Anwendungen von T–Hg II–T, C–Ag I–C und anderen Metallo-Basenpaaren. Chem. Commun. **2015,** [Querverweis] [PubMed]

23. Mistry, L.; El-Zubir, O.; Dura, G.; Clegg, W.; Waddell, PG; Pope, T.; Hofer, WA; Wright, NG; Horrocks, BR; Houlton, A. Untersuchung der Eigenschaften von „Metallo-DNA“ mit einem Ag (i)-vermittelten supramolekularen Duplex. Chem. Sci. **2019,** 10, **3186–3195.** [Querverweis] [PubMed]

24. Marzilli, LG; Kistenmacher, TJ; Rossi, M. Eine Erweiterung der Rolle von O (2) von Cytosinresten bei der Bindung von Metallionen. Synthese und Struktur eines ungewöhnlichen polymeren Silber(I)-Komplexes von 1-Methylcytosin. J. Am. Chem. Soc. **1977,** 99, **2797–2798.** [Querverweis] [PubMed]

25. Nakagawa, O.; Aoyama, H.; Fujii, A.; Kishimoto, Y.; Obika, S. Kristallographische Struktur neuartiger Typen AgI-vermittelter Basenpaare in nichtkanonischem DNA-Duplex mit 2'-O, 4'-C-Methylen-Brücken. Nukleinsäuren. Chem. Eur. J. **2021,** [Querverweis] [PubMed]

26. Hossain, MN; Ahmad, S.; Kraatz, H.-B. Konsekutiver Einbau von Silber(I)-Ionen in Oligonukleotide mit Cytosin-Cytosin-Fehlpaarungen. ChemPlusChem **2021,** 86, **224–231.** [CrossRef]

27. Bhai, S.; Ganguly, B. Rolle des pH-Werts bei der Stabilität von Cytosin-Cytosin-Fehlpaarungen und kanonischen AT- und GC-Basenpaaren vermittelt durch Silberionen: Eine DFT-Studie. Struct. Chem. **2022,** 33, **35–47.** [CrossRef]

28. Zhang, A.; Budow-Busse, S.; Leonard, P.; Seela, F. Anomere und enantiomere 2'-Desoxycytidine: Basenpaarstabilität in Abwesenheit und Anwesenheit von Silberionen. Chem.–Eur. J. **2021,** 27, **10574–10577.** [CrossRef] [PubMed]

29. Schönrath, I.; Tsvetkov, VB; Zatsepin, TS; Aralov, AV; Müller, J. Silber (I)-vermittelte Basenpaarung in parallelsträngiger DNA unter Beteiligung des lumineszierenden Cytosinanalogons 1, 3-Diaza-2-oxophenoxazin. J. Biol. Inorg. Chem. **2019,** 24, **693–702.** [CrossRef]

30. Manghi, M.; Destainville, N. Physik der Basenpaarungsdynamik in DNA. Phys. Rep. **2016,** 631, **1–41.** [CrossRef]

31. Singh, A.; Maity, A.; Singh, N. Struktur und Dynamik von dsDNA in zellähnlichen Umgebungen. Entropy **2022,** 24, **1587.** [CrossRef] [PubMed]

32. Peyrard, M.; Bishop, AR Statistische Mechanik eines nichtlinearen Modells zur DNA-Denaturierung. Phys. Rev. Lett. **1989,** 62, **2755–2758.** [Querverweis] [PubMed]

33. Singh, A.; Singh, N. Einfluss der Salzkonzentration auf die Stabilität heterogener DNA. Phys. A **2015,** 419, **328–334.** [CrossRef]

34. Knotts, TA; Rathore, N.; Schwartz, DC; De Pablo, JJ Ein grobkörniges Modell für DNA. J. Chem. Phys. **2007,** 126, **084901.** [CrossRef] [PubMed]

35. Rodrigues Leal, M.; Weber, G. Scharfe DNA-Denaturierung in einem helikoidalen mesoskopischen Modell. Chem. Phys. Lett. **2020,** 755, **137781.** [Querverweis]

36. Zoli, M. Basenpaarschwankungen in helikalen Modellen für Nukleinsäuren. J. Chem. Phys. **2021,** 154, **194102.** [CrossRef] [PubMed]

37. Valle-Orero, J.; Wildes, AR; Theodorakopoulos, N.; Cuesta-López, S.; Garten, JL; Danilkin, S.; Peyrard, M. Thermische Denaturierung von A-DNA. New J. Phys. **2014,** 16, **113017.** [CrossRef]

38. Singh, A.; Singh, N. Ziehen kurzer DNA-Moleküle mit Defekten an verschiedenen Stellen. Phys. Rev. E **2015,** 92, **032703.** [CrossRef] [PubMed]

39. Oliveira, LM; Long, AS; Brown, T.; Fox, KR; Weber, G. Schmelztemperaturmessung und mesoskopische Auswertung von einfache, doppelte und dreifache DNA-Fehlpaarungen. Chem. Sci. **2020,** 11, **8273–8287.** [CrossRef]

40. Silva, LG; Weber, G. Mesoskopisches Modell bestätigt starke, durch Metalle vermittelte Basenpaarbindung für T–Hg2+–T und schwächere für C–Ag+–C. Chem. Phys. Lett. **2022,** 803, **139847.** [CrossRef]

41. Freeman, GS; Hinckley, DM; de Pablo, JJ Ein grobkörniges Drei-Stellen-pro-Nukleotid-Modell für DNA mit expliziten Ionen. J. Chem. 2011 , 135, **165104.** [CrossRef]

42. Florescu, A.; Joyeux, M. Thermische und mechanische Denaturierungseigenschaften eines DNA-Modells mit drei Stellen pro Nukleotid. J. Chem. Phys. **2011,** 135, **085105.** [CrossRef] [PubMed]

43. Sayar, M.; Av¸saroglu, B.; Kabakçıoglu, A. Twist-Writhe-Partitionierung in einem grobkörnigen DNA-Minikreismodell. Chem. Phys. Rev. E **2010,** 81, **041916.** [CrossRef] [PubMed]

44. Sambriski, EJ; Ortiz, V.; de Pablo, JJ Sequenzeffekte beim Schmelzen und Renaturieren kurzer DNA-Oligonukleotide: Struktur und mechanistische Abläufe. J. Phys. Condens. Matter **2009,** 21, **034105.** [CrossRef]

45. Zhang, F.; Collins, MA Modellsimulationen der DNA-Dynamik. Phys. Rev. E **1995,** 52, **4217–4224.** [CrossRef]

46. Drukker, K.; Wu, G.; Schatz, GC Modellsimulationen der DNA-Denaturierungsdynamik. J. Chem. Phys. **2001,** 114, **579–590.** [CrossRef]

47. Ouldridge, TE; Louis, AA; Doye, JPK Strukturelle, mechanische und thermodynamische Eigenschaften eines grobkörnigen DNA-Modells. J. Chem. Phys. **2011,** 134, **085101.** [CrossRef]

Machine Translated by Google

48. Wong, KY; Pettitt, BM Der Weg des Schmelzens oligomerer DNA, untersucht durch molekulardynamische Simulationen. Biophys. J. **2008,** 95, **5618–5626. [CrossRef] [PubMed]**

49. Lomzov, AA; Vorobjev, YN; Pyshnyi, DV Auswertung der Gibbs-Freienergieänderungen und Schmelztemperaturen von DNA/DNA-Duplexen unter Verwendung der Hybridisierungsenthalpie, berechnet durch molekulardynamische Simulation. J. Phys. Chem. B **2015,** 119, **15** **[Querverweis]**

50. Kundu, S.; Mukherjee, S.; Bhattacharyya, D. Schmelzen der polymeren DNA-Doppelhelix bei erhöhter Temperatur: Ein molekulardynamischer Ansatz. J. Mol. Model. **2017,** 23, **1–10. [CrossRef]**

51. Chen, X.; Karpenko, A.; Lopez-Acevedo, O. Silbervermittelte Doppelhelix: Strukturparameter für einen robusten DNA-Baustein. ACS Omega **2017, 2, 7343–7348. [CrossRef] [PubMed]**

52. Mistry, L.; Waddell, PG; Wright, NG; Horrocks, BR; Houlton, A. Transoide und cisoide Konformationen in silbervermittelten Cytosin-Basenpaaren: Wasserstoffbrücken diktieren argentophile Wechselwirkungen im Festkörper. Inorg. Chem. **2019,** 58, **13346–1335** **[PubMed]**

53. Espinosa Leal, LA; Karpenko, A.; Swasey, S.; Gwinn, EG; Rojas-Cervellera, V.; Rovira, C.; Lopez-Acevedo, O. Die Rolle von Wasserstoffbrücken bei der Stabilisierung von silbervermittelten Cytosintetrameren. J. Phys. Chem. Lett. **2015, 6, 4061–4066. [Cros** **[PubMed]**

54. Hanwell, MD; Curtis, DE; Lonie, DC; Vandermeersch, T.; Zurek, E.; Hutchison, GR Avogadro: Eine fortgeschrittene Semantik Chemischer Editor, Visualisierungs- und Analyseplattform. J. Cheminform. **2012, 4, 4–17. [CrossRef] [PubMed]**

55. Van Der Spoel, D.; Lindahl, E.; Hess, B.; Groenhof, G.; Mark, AE; Berendsen, HJ GROMACS: Schnell, flexibel und kostenlos. J. Comput. Chem. **2005,** 26, **1701–1718. [CrossRef] [PubMed]**

56. Ivani, I.; Dans, PD; Noy, A.; Pérez, A.; Faustino, I.; Krankenhaus, A.; Walther, J.; Andrio, P.; Goñi, R.; Balaceanu, A.; et al. Parmbsc1: A verfeinertes Kraftfeld für DNA-Simulationen. Nat. Methods **2015,** 13, **55. [CrossRef]**

57. Li, P.; Song, LF; Merz, KM Systematische Parametrisierung einwertiger Ionen unter Verwendung des ungebundenen Modells. J. Chem. Theorie 2015 , 11, **1645–1657. [CrossRef]**

58. Filho, ED; Ruggiero, JR H-Bindungssimulation in DNA unter Verwendung eines harmonischen Oszillator-Isospektralpotentials. Phys. Rev. E Stat. Phys. Plasmas Fluids Relat. Interdiscip. Top. **1997,** 56, **4486–4488. [CrossRef]**

59. Zou, Y.; Xiang, S.; Dai, C. Untersuchung der Effizienz und Genauigkeit von Methoden zur Berechnung der Schmelztemperatur durch molekulardynamische Simulation. Comput. Mater. Sci. **2020,** 171, **109156. [CrossRef]**

Haftungsausschluss/Anmerkung des Herausgebers: Die in allen Veröffentlichungen enthaltenen Aussagen, Meinungen und Daten sind ausschließlich die der einzelnen Autoren und Mitwirkenden und nicht die von MDPI und/oder den Herausgebern. MDPI und/oder die Herausgeber lehnen jegliche Verantwortung für Personen- oder Sachschäden ab, die aus den im Inhalt erwähnten Ideen, Methoden, Anweisungen oder Produkten resultiere

Machine Translated by Google

Berechnung

MDPI

Artikel

Natürliche Konvektion Flüssigkeitsströmung und Wärmeübertragung in einem Talförmige Höhle

Sidhartha Bhowmick [1], Laxmi Rani Roy [1], Feng Xu [2] und Suvash C. Saha 3,*

[1] Fakultät für Mathematik, Jagannath University, Dhaka 1100, Bangladesch; dr.sidhartha@math.jnu.ac.bd (SB); lrroy.jnu@gmail.com (LRR)
[2] Fakultät für Bauingenieurwesen, Jiaotong-Universität Peking, Peking 100044, China; fxu@bjtu.edu.cn
3 Fakultät für Maschinenbau und Mechatronik, University of Technology Sydney, Sydney, NSW 2007, Australien
* Korrespondenz: suvash.saha@uts.edu.au

Zusammenfassung: Das Phänomen der natürlichen Konvektion ist aufgrund **seines weiten Vorkommens in der Natur und in der Industrie Gegenstand erheblichen Forschungsinteresses .** Diese Studie konzentriert sich auf die Untersuchung natürlicher Konvektionsphänomene in dreieckigen Umfassungen und legt besonderen Wert auf eine talförmige **Konfiguration. Unsere Forschung analysiert umfassend instationäre, dimensionslose, zeitabhängige Konvektion, die aus natürlichem Flüssigkeitsfluss in einem talförmigen Hohlraum resultiert, in dem die schrägen Wände als heiße Oberflächen dienen und die obere Wand als kalte Oberfläche fungiert. Wir untersuchen instationäre natürliche Konvektionsflüsse in diesem Hohlraum und verwenden Luft als Betriebsflüssigkeit, wobei wir einen Bereich von Rayleigh- Zahlen von Ra = 100 bis 108** berücksichtigen . **Zusätzlich werden verschiedene dimensionslose Zeiten ÿ im Bereich von 0 bis** 5000 bei einer festen Prandtl-Zahl (Pr = 0,71) und einem festen Längen-/ Durchmesserverhältnis (A **= 0,5) untersucht . Unter Verwendung eines zweidimensionalen Rahmens für die numerische Analyse konzentriert sich unsere Studie auf die Ermittlung instabiler Strömungsmechanismen, die durch verschiedene dimensionslose Zeiten gekennzeichnet sind, darunter symmetrische, asymmetrische und instationäre Strömungsmuster. Die numerischen Ergebnisse zeigen, dass natürliche Konvektionsströmungen im symmetrischen Zustand bei Rayleigh-Werten zwischen 100 und 7 × 103** stabil bleiben . **Eine asymmetrische Strömung tritt auf , wenn Ra 7 × 103** überschreitet . **Unter asymmetrischen Bedingungen erreicht die Strömung ein instationäres Stadium, bevor sie sich im vollständig ausgebildeten Stadium für 7 × 103 < Ra < 107** stabilisiert . **Diese Studie zeigt, dass periodische instationäre Strömungen während des Übergangsstadiums in chaotische Situationen übergehen, bevor sie im entwickelten Stadium in ein periodisches Verhalten übergehen, doch die chaotische Strömung bleibt im instationären Bereich mit höheren Rayleigh-Zahlen vorherrschend. Darüber hinaus präsenti**

Schlüsselwörter: instationäre Strömung; natürliche Konvektion; talförmige Höhle; Bifurkationen; Wärmeübertragung

check for updates

Zitat: Bhowmick, S.; Roy, LR; Xu, F.; Saha, SC Natürliche Konvektion Fluidströmung und Wärmeübertragung in einem Talförmige Höhle. Computation **2024,** 12, **146. https://doi.org/ 10.3390/ computation12070146**

Wissenschaftliche Herausgeber: Ali Cemal Benim, Abdulmajeed A. Mohamad, Sang-Ho Suh, Rachid Bennacer, Paweÿ Oclon und Jan Taler

Erhalten: 4. Juni 2024
Überarbeitet: 11. Juli 2024
Akzeptiert: 12. Juli 2024
Veröffentlicht: 14. Juli 2024

Copyright: © 2024 bei den Autoren. Lizenznehmer MDPI, Basel, Schweiz.

Dieser Artikel ist ein Open Access-Artikel vertrieben unter den Bedingungen und Bedingungen der Creative Commons Namensnennungslizenz (CC BY) (https:// creativecommons.org/licenses/by/ 4.0/).

1. Einleitung

Das Studium der natürlichen Konvektion in geschlossenen Räumen hat aufgrund seiner breiten Anwendbarkeit in verschiedenen Disziplinen beträchtliche Aufmerksamkeit bei Wissenschaftlern auf sich gezoge **Forscher haben verschiedene Arten von Umschließungen mit unterschiedlichen Randbedingungen als Versuchsaufbauten verwendet, um die natürliche Konvektion zu untersuchen, mit dem Ziel, unser Verständnis von Wärmeübertragungsmechanismen und Fluiddynamik zu vertiefen. Dieses Interesse rührt von der Vielzahl von Anwendungen her, bei denen natürliche Konvektionsphänomene eine wesentliche Rolle spielen, und erstreckt sich über Bereiche wie Geophysik, Gebäudeisolierung, Management geothermischer Reservoirs und industrielle Trennprozesse . Die Komplexität der Erdoberfläche, die durch unregelmäßige Geometrien gekennzeichnet ist, die stark von geneigtem Gelände beeinflusst werden, stellt jedoch traditionelle geometrische Konfigurationen vor Herausforderungen. Trotz der Prävalenz unregelmäßiger Formen sowohl in natürlichen als auch in industriellen Umgebungen bleibt die natürliche Konvektion aufgrund ihrer Bedeutung für das Verständnis des Strömungsverhaltens von Flüssigkeiten ein Gegenstand laufender Forschung. Während sich ein Großteil der Forschung auf die natürliche Konvektion in herkömmlichen quadratischen oder rechteckigen Umschließungen aufgrund ihrer Einfachheit** konzer

Machine Translated by Google

Bedeutung, da es wesentlich zu unserem Verständnis von Phänomenen wie der Rayleigh-Bénard-Konvektion beiträgt **[5,6]. Kürzlich konzentrierten sich Cui et al. [7] auf die Untersuchung von gemischter Konvektion und Wärmeübertragung in einem bogenförmigen Hohlraum mit inneren Wärmequellen unter den Bedingungen von Erwärmung von unten und Kühlung der oberen Wand. Chuhan et al. [8] untersuchten das thermische Verhalten einer Potenzfunktionsflüssigkeit in einem plusförmigen Hohlraum infolge natürlicher Konvektion und berücksichtigten dabei die Darcy-Zahl und die Magnetohydrodynamik. Sarangi et al. [9] erforschten den durch Strahlung und anhaltend laminare natürliche Konvektion verursachten Wärmeverlust in einem Solarkocher-Hohlraum mit rechteckiger**

Die Verbesserung unseres Verständnisses natürlicher Konvektionsströmungen ist von größter Bedeutung für die Verbesserung der Vorhersage von Wärmeübertragung und die Ermöglichung von Strömungskontrollmechanismen. Forscher, die sich für dieses Phänomen interessieren, können detaillierte Erklärungen für durch Auftrieb induzierte natürliche Konvektionsströmungen untersuchen **[10]. Natürliche Konvektion in der Nähe einer thermischen Grenze wird häufig als Strömung neben einer thermisch gut leitenden unendlichen oder halbunendlichen flachen Platte idealisiert, was zur Bildung von Rayleigh-Bénard- Konvektion führt. Studien von Manneville und Bodenschatz et al. [11,12] bieten umfassende Einblicke in die Erkenntnisse zur Rayleigh-Bénard- Instabilität , während Sparrow und Husar [13] sich auf die Erforschung der Rayleigh-Bénard- Konvektion auf geneigten flachen Platten konzentrieren. Die Untersuchung von Hohlräumen mit vertikalen und horizontalen Temperaturgradienten offenbart zwei unterschiedliche Szenarien natürlicher oder freier Konvektionsströmung. Während die natürliche Konvektion aufgrund ihrer Einfachheit vorwiegend in rechteckigen oder quadratischen Hohlräumen untersucht wird,** bietet **Batchelors [14] Forschung ein bedeutendes Verständnis der natürlichen Konvektionsströme in unterschiedlich beheizten Hohlräumen und betont insbesondere den Einfluss der Leitung auf die Wärmeübertragung, vor allem bei niedrigen Rayleigh-Zahlen. Wenn die Rayleigh-Zahl einen Schwellenwert überschreitet, steuert die Konvektion die Strömungsdynamik. Frühere Studien untersuchten vor allem stabile natürliche Konvektionsströme [15–17]. Das faszinierende Phänomen der Baroklinität, das** durch die thermisch vertikale Wand hervorgerufen wird, löst **unter symmetrischen Bedingungen durch viskose Scherung spontane Konvektionsströme im** inneren Hohlraum aus **[18]. Bei niedrigeren Rayleigh -Zahlen bleibt die thermische Grenzschicht proximal der Wand stabil, während konvektive Instabilität mit zunehmenden Rayleigh-Zahlen diskrete Wanderwellen hervorruft [18]. Neuere Studien befassten sich eingehend mit der Dynamik und dem vorübergehenden Charakter vorübergehender natürlicher Konvektionsströme und bauten auf früheren Untersuchungen auf [19,20]. Diese Erkenntnisse tragen zu unserem Verständnis des komplexen Zusammenspiels zwischen thermischen Gradienten und Fluiddynamik in geschlossenen Räumen bei und geben Aufschluss über die Übergangsverhaltensweisen, die natürlichen Konvektionsphänomenen innewohnen . Neuere Forschungen deuten auf das Auftreten von durch Baroklinität induzierten spontanen Konvektionsströmen und turbulenter Rayleigh-Bénard- Konvektion** hin **[21]. Rahaman et al. [22,23] erforschen**

Natürliche Konvektionsströmungen in Hohlräumen mit geneigten Wänden haben aufgrund ihrer Häufigkeit und einfachen Beobachtung beträchtliche Aufmerksamkeit auf sich gezogen **[24]. Insbesondere Untersuchungen der natürlichen Konvektionsströmungen in dreieckigen Hohlräumen haben gezeigt, dass** diese die Rayleigh-Bénard- **Konvektion erheblich verstärken ,** wie in früheren **Studien** dokumentiert **[5,6]. Umfangreiche Forschungen untersuchen die Eigenschaften und Wärmeübertragungsmechanismen natürlicher Konvektionsströmungen in dachbodenförmigen Hohlräumen, die durch Temperaturgradienten zwischen der Bodenfläche und den geneigten Rändern** gekennzeichnet sind **[25–31]. Insbesondere Studien von Asan und Namli [25,26] und Salman [27] haben die Instabilität und Aufzweigungen natürlicher Konvektionsströmungslösungen in dreieckigen Hohlräumen untersucht und empirische Beweise für den starken Einfluss des Längenverhältnisses und der Rayleigh-Zahl auf sowohl die Temperatur- als auch die Strömungsfelder zutage gefördert. Analytische Ergebnisse zeigen, dass mit zunehmenden Rayleigh-Zahlen die Längenverhält Poulikakos und Bejan [29] untersuchten die Wärmeübertragung und die natürlichen Konvektionsströme in Dachgeschossen bei Nacht oder im Winter, stellten Skalierungsbeziehungen her und diskutierten über die Dynamik der natürlichen Konvektionsströme [30]. Flack [31] erläuterte die Wärmetransportdynamik mithilfe der Nusselt-Zahl-Rayleigh-Zahl-Beziehung , während Holtzman et al. [32] den Übergang von symmetrischen zu asymmetrischen Wärmeübertragungsströmen beobachteten.**

Machine Translated by Google

Strömungsmuster mit zunehmenden Grashof-Zahlen, wobei eine Pitchfork-Bifurkation anhand experimenteller Daten identifiziert wurde. Darüber hinaus lieferten Lei et al. [33] Beweise für die Existenz vorübergehender natürlicher Konvektionsströmungen in Dachbodenhohlräumen, was unser Verständnis dieses komplexen Phänomens weiter vertiefte.

Die Entwicklung der Strömung unter plötzlicher Erwärmung und Abkühlung durchläuft drei verschiedene Phasen: Frühphase, Übergangsphase und stationäre oder quasi-stationäre Phase [33]. Es wurde beobachtet, dass niedrigere Rayleigh-Zahlen zu einer Erwärmung über die gesamte Strömungszone führen und nicht zu einer Spaltung der thermischen Grenzschicht, wobei die Schichttrennung mit zunehmenden Rayleigh-Zahlen auftritt. Insbesondere bei Szenarien mit schneller Abkühlung übersteigt die Dicke der thermischen Grenzschicht den vertikalen Abstand von der Mitte der geneigten Oberfläche zum horizontalen Boden, insbesondere bei niedrigeren Rayleigh-Zahlen. Die thermische Grenzschicht stabilisiert sich vor der Hohlraumkühlung mit zunehmenden Rayleigh-Zahlen, wobei die Flüssigkeit die geneigte Oberfläche passiert und die Bodenspitze berührt, bevor sie ins Innere gelangt. Die Wärmeübertragung im Dachgeschoss wurde unter thermischen Reizen von Saha et al. [34–38] untersucht. Darüber hinaus haben Forscher das Verhalten und die Wärmeübertragungsdynamik natürlicher Konvektionsströmungen in keilförmigen Hohlräumen untersucht, die als Modelle für verschiedene Flachwasserkörper mit geneigten Bodenflächen dienen, wie z. B. Seitenarme von Stauseen und Meeresküsten. Wie von Lei und Patterson [39–41] beschrieben, durchläuft die Konvektionsströmung in Keilen drei Stadien vom isothermen zum stationären Zustand. Mao et al. [42–44] argumentierten, dass die horizontale Lage des Keils die primäre Wärmeübertragungsart und den Strömungsstatus für verschiedene Rayleigh-Zahlen bestimmt, wobei in der flachen Uferzone unterschiedliche Strömungsregime beobachtet wurden. Bednarz et al. [45] untersuchten natürliche Konvektionsströmungen in reservoirförmigen Hohlräumen und beobachteten die Bildung von zwei Heizgrenzschichten: Zufluss am Boden und instabilen Rückfluss unter Wasser bei verschiedenen Grashof-Werten. Das Verständnis der natürlichen Konvektionsströmungen in V-förmigen Hohlräumen ist angesichts ihrer Häufigkeit in natürlichen und industriellen Systemen von entscheidender Bedeutung [46–57]. Kenjeres [58] quantifizierte die Wärmeübertragung und die turbulenten natürlichen Konvektionsströme in V-förmigen Hohl

Das Strömungsmuster und die Wärmeübertragungsmengen wurden in früheren Studien [30,31] sorgfältig gemessen. Trotz der durchgeführten detaillierten Untersuchungen können natürliche Konvektionsströme innerhalb eines Dachbodens oder einer keilförmigen dreieckigen Höhle die Strömungsdynamik in einer V-förmigen Höhle im Zeitverlauf möglicherweise nicht genau darstellen. Angesichts ihres natürlichen Vorkommens wurden natürliche Konvektionsströme innerhalb V-förmiger dreieckiger Umschließungen mit entgegengesetzten Randbedingungen als einer gründlichen Untersuchung würdig erachtet. Bhowmick et al. [60–62] untersuchten den Übergang von symmetrischer stationärer Strömung zu asymmetrischer instationärer Strömung in einer V-förmigen dreieckigen Umschließung, in der die Erwärmung von unten und die Abkühlung von oben erfolgte. Es wurde beobachtet, dass verschiedene Flüssigkeiten unterschiedliche Bewegungsverhalten aufweisen. Obwohl der Übergang von regelmäßiger zu chaotischer Strömung in der von unten beheizten talförmigen Höhle beobachtet wurde, bleiben die Mechanismen, die die instationäre Strömung in solchen Höhlen verursachen, unklar. Nach bestem Wissen der Autoren hat keine Studie die instationären Strömungsstrukturen untersucht, die zu verschiedenen Zeiten in der talförmigen Höhle vorhanden waren . Darüber hinaus besteht Bedarf an weiteren quantitativen Analys

Diese Literaturübersicht unterstreicht die Bedeutung der Untersuchung instationärer natürlicher Konvektion in V-förmigen Hohlräumen für Luft und liefert wertvolle Einblicke in die Strömungsmuster, Übergangsprozesse und Wärmeübertragungsphänomene in solchen Systemen. Ein umfassendes Verständnis der komplexen Physik, die instationäre Strömungsmechanismen in V-förmigen Hohlräumen steuert, ist jedoch weiterhin unerlässlich. Die Analyse der vorhandenen Literatur zeigt einen Mangel an Studien, die sich auf die Charakterisierung instationärer Strömungsstrukturen zu verschiedenen nichtdimensionalen Zeiten in V-förmigen Hohlräumen konzentrieren. Um diese Lücke zu schließen, zielt die vorliegende Studie darauf ab, instationäre Strömung in einem talförmigen Hohlraum durch zweidimensionale numerische Simulationen zu untersuchen, wobei Luft mit Rayleigh-Zahlen zwischen 100 und 108, einer Prandtl-Zahl von 0,71 und einem Seitenverhältnis von 0,5 berücksichtigt wird. Die Auswirkungen verschiedener Ra- und ÿ- Werte auf die Strömungsstruktur, die Wärmeübertragung und die vorübergehenden Strömungseigenschaften im vollständig geformten Stadium des talförmigen Hohlraums werd

Machine Translated by Google

ff

indem wir unser Verständnis davon verbessern, wie sich Fluideigenschaften auf das Fließverhalten und ff- Übergangsprozesse auswirken. Die Entwicklung von Fließmechanismen und Veränderungen innerhalb der Kavität werden anhand der Temperatur- und Geschwindigkeitsunterschiede im Zeitverlauf aufgeklärt. Solche ffi Erkenntnisse sind entscheidend für die Verbesserung der Energieeffizienz von technischen Anwendungen und die Optimierung des Designs von thermischen Systemen wie Wärmetauschern und Kühlsystemen. Folglich ist diese Studie bereit, einen neuartigen Beitrag zu diesem ff Bereich zu leisten und klare und wertvolle Schlussfolgerungen zu liefern, die Spezialisten zugutekommen, die sich mit der Modellierung und dem Experimentieren mit Strömungen über komplexe Geometrien beschäftigen.

2. Numerische Modellformulierungen

Das Hauptziel dieser Studie ist die Analyse der Eigenschaften natürlicher Konvektionsströme in einem dreieckigen Hohlraum mit talförmiger Konfiguration. Hierzu wird ein zweidimensionaler numerischer Simulationsansatz verwendet. Das physikalische Modell und die entsprechenden Randbedingungen sind in Abbildung 1 visuell dargestellt. Um die Singularität an der Verbindung zwischen der oberen und der geneigten Wand zu beheben, wird eine strategische Anpassung vorgenommen, indem eine entsprechende Menge Material von beiden oberen Ecken entfernt wird. Genauer gesagt werden 4 % der Länge in Form winziger Punkte sorgfältig extrahiert.

Es ist zu beachten, dass diese geringfügige Anpassung keinen erkennbaren Einfluss auf die Mechanik des Flüssigkeitsflusses und der Wärmeübertragung hat, wie aus früheren Studien hervorgeht [18,20–24,29–31].

Die Abmessungen des Hohlraums sind wie folgt definiert: Die horizontale Länge beträgt 2L **und die Höhe H, wobei** L **=** 2H **und das Verhältnis** A **=** H/L **= 0,5 ist. Zum Zeitpunkt** T **= T0** hat **die Flüssigkeit im Hohlraum zunächst eine gleichmäßige Temperatur und ist nicht in Bewegung. Bei einer gegebenen Temperatur von** Tc **= T0** ÿ **ÿT/2 bzw.** Th **= T0 + ÿT/2 unterliegen die oberen und geneigten Wände augenblicklichen Abkühlungs- und Erwärmungsprozessen. Unter allen gegebenen Umständen sind alle Grenzen bewegungslos.**

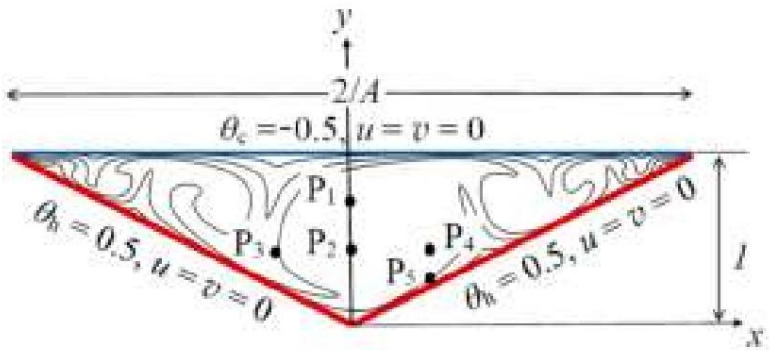


Abbildung 1. Physikalische Domänen- und dimensionslose Randbedingungen mit den Berechnungspunkten P1 (0, 0,825), P2 (0, 0,46), P3 (ÿ0,5, 0,5), P4 (0,5, 0,5) und P5 (0,5, 0,255), die in den folgenden Abbildungen angewendet werden .

In **dieser Studie werden zweidimensionale natürliche Konvektionsströmungen innerhalb eines talförmigen Raumes untersucht. Die zugrunde liegenden Gleichungen dieser Untersuchung werden im Folgenden dargestellt, wobei die Boussinesq-Näherung als vereinfachende Annahme verwendet wird [62].**

$$\frac{\partial U}{\partial X} + \frac{\partial V}{\partial Y} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial U}{\partial t} + U\frac{\partial U}{\partial X} + V\frac{\partial U}{\partial Y} = -\frac{\partial P}{\partial X} + \frac{\partial^2 U}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial Y^2}, \quad (2)$$

$$\frac{\partial V}{\partial t} + U\frac{\partial V}{\partial X} + V\frac{\partial V}{\partial Y} = -\frac{\partial P}{\partial Y} + \frac{\partial^2 V}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial Y^2} + g\beta(T - T0), \quad (3)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + U\frac{\partial T}{\partial X} + V\frac{\partial T}{\partial Y} = \frac{\partial^2 T}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial Y^2}. \quad (4)$$

Machine Translated by Google

U **und** V **stellen in den Gleichungen jeweils die horizontalen und vertikalen Durchflussraten dar . Für ein zweidimensionales Koordinatensystem gilt:** • P **ist der**

Druck; • *ÿ* **ist die Dichte;** t
ist die Zeit;
•
• T **ist die Temperatur zum Zeitpunkt T0, wobei T0 =** (Tc **+** Th)**/2, des flüssigen Mediums im dreieckiger Hohlraum ist isothermisch stationär.**

Die verwendeten dimensionslosen Variablen sind die folgenden:

$$x = \frac{X}{H},\ y = \frac{Y}{H},\ u = \frac{\ddot{A}H}{1\ \ddot{y}Ra^{2}},\ v = \frac{VH}{\ddot{y}Ra^{2}},\ p = \frac{PH2}{\ddot{y}\ddot{y}2Ra},\ \ddot{y} = \frac{T\ \ddot{y}\ T\ddot{y}}{Th\ \ddot{y}\ Tc},\ \ddot{y} = \frac{t\ddot{y}Ra2}{H2.} \quad (5)$$

In den oben genannten Gleichungen stellen die Variablen v, x, y, p, ÿ und *ÿ* **die normalisierten Gegenstücke von U, V, X, Y, P, t bzw. T dar. Die drei maßgeblichen Variablen, das Längenverhältnis (A), die Prandtl-Zahl (Pr) und die Rayleigh-Zahl (Ra), haben einen Einfluss auf die natürlichen Konvektionsströmungen des Gehäuses (siehe [6] für weitere Einzelheiten), die am besten wie folgt beschrieben werden:**

$$A = \frac{H}{M},\ \mathbf{Pr} = \frac{\ddot{y}}{\ddot{y}},\ \mathbf{Ra} = \frac{g\ddot{y}(Th\ \ddot{y}\ Tc)H3}{\ddot{y}\ddot{y}}. \quad (6)$$

Die obigen dimensionslosen Variablen werden addiert, und dann werden die Gleichungen (1)–(4) (für weitere Informationen finden sich unter [61]):

$$\ddot{y}u\ \ddot{y}v = \mathbf{0} + \ddot{y}x\ \ddot{y}y, \quad (7)$$

$$\ddot{y}u\ \ddot{y}u\ \ddot{y}u + u + v\ \ddot{y}\ddot{y} \quad \ddot{y}x\ \ddot{y}y \quad \ddot{y}p + \frac{\mathbf{Pr}}{\mathbf{Ra}^{\frac{1}{2}}}\ \frac{\ddot{y}\ 2u\ \ddot{y}\ 2u +}{\ddot{y}x\ \mathbf{2}\ \ddot{y}y^{\mathbf{2}}}, \quad (8)$$

$$\ddot{y}v\ \ddot{y}v\ \ddot{y}v + u + v\ \ddot{y}\ddot{y}\ \ddot{y}x \quad \ddot{y}y \quad \frac{\ddot{y}p}{\ddot{y}y} + \frac{\mathbf{Pr}}{\mathbf{Ra}^{\frac{1}{2}}}\ \frac{\ddot{y}\ 2v}{\ddot{y}x\ \mathbf{2}} + \frac{\ddot{y}\ 2v}{\ddot{y}y^{\mathbf{2}}} + \mathbf{Pr}\ddot{y}, \quad (9)$$

$$\ddot{y}\ddot{y}\ \ddot{y}\ddot{y}\ \ddot{y}\ddot{y} + u + v\ \ddot{y}\ddot{y} \quad \ddot{y}x\ \ddot{y}y \quad = \frac{\mathbf{Pr}}{\mathbf{Ra}^{\frac{1}{2}}}\ \frac{\ddot{y}\ 2\ddot{y}x22\ddot{y}y\ddot{y} +}{\mathbf{2}}. \quad (10)$$

In der vorliegenden Studie wurde ein Navier-Stokes-Lösungstool mit finitem Volumen [62], Fluent 15.0 in ANSYS, verwendet, um die natürliche Konvektion in einem talförmigen Hohlraum zu modellieren. Die Prinzipien der Massenerhaltung, Impulserhaltung und Energieerhaltung bilden die Grundlage des Rechenmodells, das zur Simulation instationärer natürlicher Konvektionsströmungen in einem Lufthohlraum verwendet wird. Die Kontinuitätsgleichung, die Navier-Stokes-Gleichungen und die Energiegleichungen wurden alle mit Finite-Volumen-Methoden gelöst, nachdem die entsprechenden numerischen Techniken angewendet wurden. Das nicht-uniforme 2D-Netzsystem wurde mithilfe der kommerziellen Software ICEM 15.0 erstellt und die numerischen Ergebnisse wurden **mithilfe des Nachbearbeitungsprogramms TECPLOT 360 grafisch dargestellt .**

Die maßgebenden Gleichungen (7)–(10) werden mit Hilfe einer Finite-Volumen-Technik unter Verwendung der SIMPLE-Methode gelöst, die in Referenz [63] und Saha [64] ausführlich erläutert Das numerische Verfahren für die SIMPLE-Methode ist in Abbildung 2 dargestellt.

Machine Translated by Google

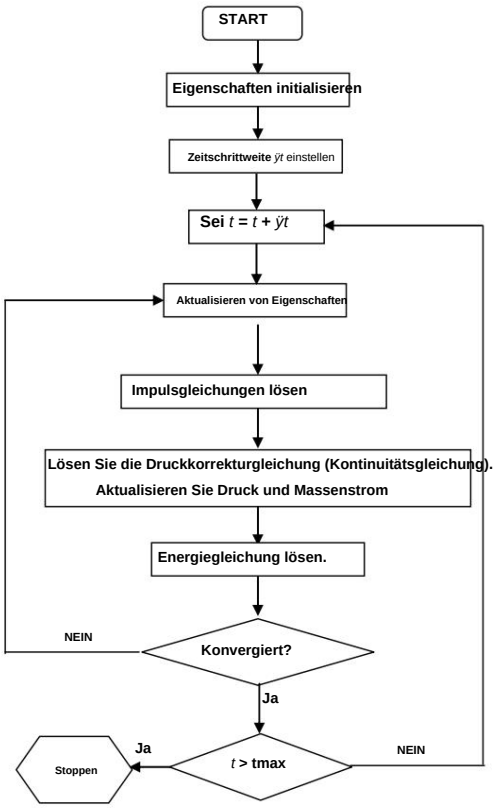


Abbildung 2. Flussdiagramm der SIMPLE-Methode für vorübergehenden Fluss.

3. Netzabhängigkeitstest

Die Maschen- und Zeitschrittabhängigkeit der größten Rayleighzahl (Ra = 108) für die

In der vorliegenden Untersuchung wurden **die Prandtl-Zahl (Pr = 0,71) und das Aspektverhältnis** (A **= 0,5) untersucht. Im Test wurden drei symmetrische, nicht einheitliche Maschen verwendet, mit den Abmessungen 600 × 100, 800 × 150 und 1200 × 200. Diese Maschen wurden so entworfen, dass sie feinere Gitter haben an den Rändern und gröbere Gitter in der inneren Zone. Das 800 × 150-Netz wurde eine 3%ige Ausdehnung, die von einer minimalen Breite von 0,00025 in der Nähe der Wand bis zu einer maximalen Breite von 0,02 im Inneren. Abbildung 3 zeigt die Zeitreihe der Nusselt-Zahl bei die rechte Wand der Höhle. Die Daten wurden mit verschiedenen Netzen und Zeitschritten gewonnen für eine Rayleighzahl von 108. Die aus den verschiedenen Maschen erhaltenen Nusseltzahlen und die Zeitschritte zeigen Einheitlichkeit während der Anfangsphase, zusammen mit einer gewissen Divergenz während der Reifephase. Darüber hinaus enthält Tabelle 1 eine Berechnung und Liste der durchschnittlichen Nusselt-Zahlen im voll entwickelten Stadium. Basierend auf der durchgeführten Analyse hat es Es wurde festgestellt, dass die Unterschiede in den Ergebnissen, die bei den verschiedenen Maschen beobachtet wurden, Zeitschritte liegen innerhalb der akzeptablen Grenze von 2%. Unter Berücksichtigung dieser Bei der numerischen Simulation dieser Studie wurde eine Maschengröße von 800 × 150 und ein Zeitschritt von 0,0025 verwendet.**

Tabelle 1. Nusselt-Zahlen (Nu) für verschiedene Gitter und Zeitschritte.

Mesh und Zeitschritt	Durchschnittliche Nu	Unterschied
600 × 100 und ÿÿ = 0,0025 800 × 150 und ÿÿ = 0,00125 800 × 150 und ÿÿ = 0,0025 1200 × 200 und ÿÿ = 0,0025	121,63	1,94 %
	122,47	1,27 %
	124,04	-
	122,95	0,87 %

Machine Translated by Google

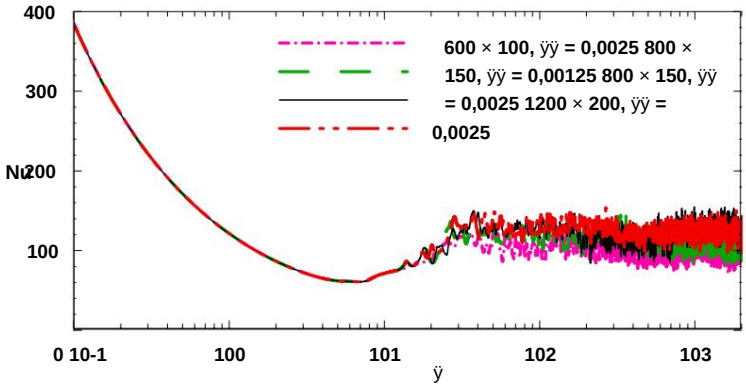


Abbildung 3. Nusselt-Zahlen-Zeitreihe an der rechts geneigten Wand im talförmigen Hohlraum für Ra = 108 mit bestimmten Gittern und Zeitschritten.

4. Validierung

Abbildung 4 vergleicht das von Holtzman et al. [32] **durchgeführte Laborexperiment *ÿÿ* mit den aktuellen numerischen Ergebnissen zur zusätzlichen Bestätigung. Im Gegensatz zum dreieckigen Hohlraum *ÿÿ* in dieser Studie ist es vertikal invertiert die Rayleigh-Zahlen wurden anstelle der entsprechenden Grashof-Zahlen verwendet. Im Vergleich zu den experimentellen Ergebnissen in *ÿÿ* Abbildung 4b für die Rayleigh-Zahlen Ra = 3,5 × 103 , Abbildung 4d für Ra = 7 × 103 und Abbildung 4f für Ra × 104 sind die numerischen Ergebnisse, die den symmetrischen Flussfür Ra = 7 × 103 in Abbildung 4a und den asymmetrischen Fluss für Ra = 1,2 × 104 und Ra = 105 in Abbildung 4c,e darstellen, korrekt. Wie von Xu et al. angegeben [18] und Patterson und Armfield [20], das Vorhandensein von Inkonsistenzen zwischen numerischen Ra-Werten und experimentellen Ra-Ergebnissen führt zu einem bemerkenswerten Widerspruch: Wenn die numerischen Ergebnisse und die experimentellen Ergebnisse korrekt sind, beträgt die experimentelle Rayleigh-Zahl ungefähr das 1,5- bis 2,5-fache der numerischen Rayleigh- Zahl. Die in dieser Forschung verwendeten numerischen Methoden können verwendet werden, um einen Übergangsfluss in einem dreieckigen Hohlraum darzustellen , da die experimentellen und rechnerischen Ergebnisse identisch sind.**

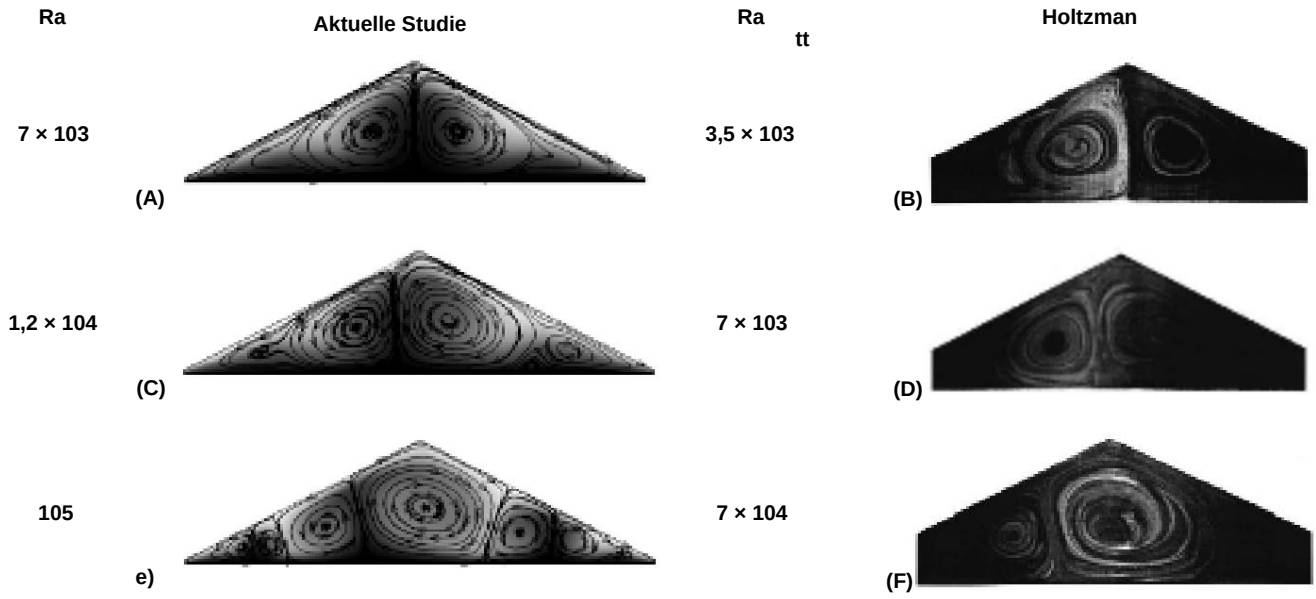


Abbildung 4. Vergleich der experimentellen Ergebnisse von Holtzman (b,d,f) [32] für verschiedene Rayleighzahlen mit der aktuellen Studie (a,c,e).

5. Numerische Ergebnisse und Diskussion

Der folgende Abschnitt erläutert die Hauptmerkmale der Flüssigkeitsströmungen in einem V-förmigen Hohlraum, wobei die Strömung durch W

Machine Translated by Google

geneigten Wänden und durch Kühlung von der oberen Wand abgeleitet. Die Analyse konzentriert sich auf einen Bereich von Rayleigh-Zahlen, der von Ra = , eine Prandtl-Zahl, Pr = 0,71, und eine 100 bis 108 (Seitenverhältnis, A = 0,5) reicht. Um **das Phänomen des Strömungswachstums umfassend zu untersuchen, werden verschiedene dimensionslose Zeiten berücksichtigt .** In dieser Arbeit wurde eine 2D-numerische Simulation **durchgeführt. Den numerischen Simulationen zufolge kann die Strömungsentwicklung für diese Rayleigh-Zahlen in verschiedenen Zeiten von** ÿ = 0 bis 5000 in symmetrische Strömung, **asymmetrische Strömung und instationäre Strömung unterteilt werden .**

Zur Erstellung der Simulationsergebnisse verwendeten wir einen Hochleistungsrechner mit 64 Prozessoren, mit dem wir bei dimensionsloser Zeit (ÿ = 5000 und Zeitschrittweite ÿÿ **= 0,0025)** 15 Tage für einen kleinen Ra = 105 **und 20 Tage für einen großen Ra = 108** benötigten.

5.1. Symmetrische

Strömung **Es wurde festgestellt, dass für Ra = 100, 101 und 102, Die Entwicklung des Übergangsflusses im dimensionslosen Zeitverlauf wies keine zunehmende oder abnehmende Wolke auf, was darauf hinweist, dass der Fluss bei diesen Rayleigh-Zahlen aufgrund des vorherrschenden Einflusses der Leitungsdominanz ein anhaltendes Maß an Stabilität aufwies. In dieser Studie , sind die Ergebnisse für Ra = 100, 101 und 102 bei ÿ = 0, 0,1, 0,5, 1 und 2000 in Abbildung 5 enthalten. Anfangs, bei ÿ = 0, ist die Temperatur konstant und zu diesem Zeitpunkt gibt es keinen Flüssigkeitsfluss im Hohlraum. Flüssigkeitsströme entwickeln sich, wenn die geneigten Wände pl In Abbildung 5 ändert sich die Temperatur bei einem kleinen Ra = 100 und 101 bei ÿ = 0,1 schnell und wird symmetrisch, aber bei Ra = 102** wird sie bei ÿ = 0,5 **symmetrisch und diese symmetrische Tendenz wird von ÿ = 0,5 bis 2000 beobachtet. Bei allen Ra- und ÿ -Werten enthält der Hohlraum ein Paar symmetrischer Zellen. Konvektive Ströme weisen relativ geringe Größen auf, wobei die Zellen eine vorherrschende Leitungsdominanz aufweisen, die für Stab**

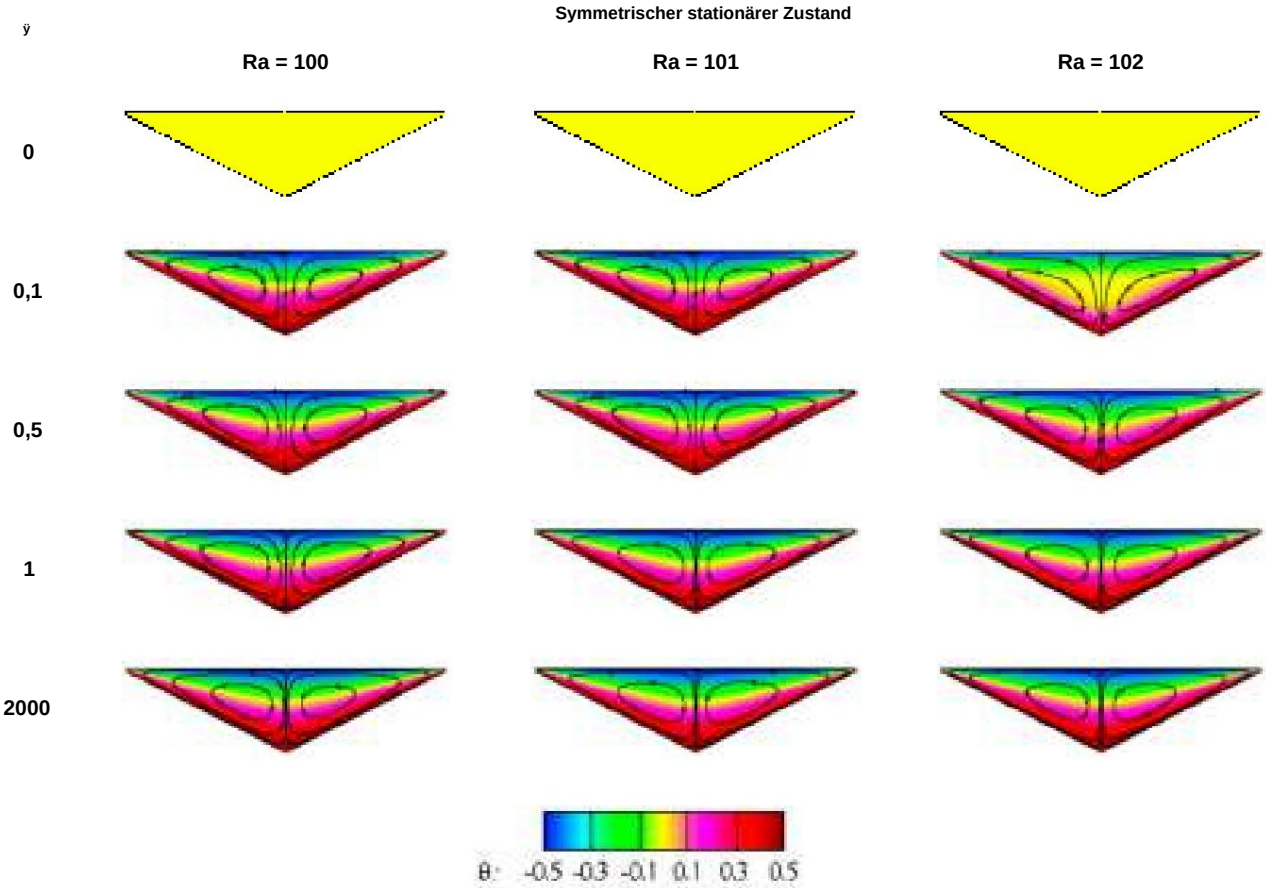


Abbildung 5. Stromlinien und Isothermen bei verschiedenen dimensionslosen Zeitintervallen, ÿ, und unterschiedlichen kleinen Rayleigh-Zahlen, Ra, für den symmetrischen stationären Zustand.

ff

ÿ

Machine Translated by Google

5.2. Asymmetrische

Strömung **Die Strömung bei verschiedenen Rayleighzahlen von Ra = 103 , 7 × 103 und 2 × 104** sind in **Abbildung 6 auf Basis der Zeit mit den angezeigten Stromlinien und Isothermen dargestellt .** Anfangs, bei ÿ **= 0, ist die Temperatur konstant und es bewegt sich keine Flüssigkeit im Hohlraum. Flüssigkeitsströme beginnen, wenn die schrägen Wände plötzlich erhitzt und die obere Wand plötzlich abgekühlt werden. In Abbildung 6 ändert sich die Temperatur für Ra = 103 und 7 × 103 bei** ÿ **= 0,1 allmählich und wird symmetrisch, während sie für Ra = 2 × 104 bei** ÿ **= 1 symmetrisch wird. Im Anfangsstadium , wenn** ÿ **= 1, sind die stationären Strömungen für alle Rayleigh-Zahlen symmetrisch. Der Hohlraum hat zwei symmetrische Zellen. Da die Zellen eine Leitungsdominanz aufweisen, die sie ewig stabil hält, sind die konvektiven Strömungen wirklich extrem gering. Die Baroklinität nahe den schrägen Wänden erzeugt viskose Scherung, die im grundlegenden symmetrischen Zustand natürliche Konvektionsströmungen induziert , doch mit der Zeit wird** die Strömung bei Ra = 7 × **103 und 2** × **104 allmählich asymmetrisch. Wie die Abbildung zeigt, nimmt im anfänglichen Übergangsstadium bei** ÿ **= 1 die Konvektion bei Ra = 7** × **103 und 2** × **104 zu, obwohl sie nicht stark genug ist, um die symmetrische Strömungsstruktur zu stören (siehe Abbildung 7), während die Konvektion bei Ra = 103 statisch bleibt. Obwohl bei Ra = 103 und Ra = 7** × **103** nur zwei Zellen vorhanden sind, treten bei Ra = 2 × **104 bei** ÿ = 10 **vier Zellen in der Kavität auf . Das bedeutet, abgesehen vom symmetrischen Bruch verursacht die Rayleigh-Zahl eine Zunahme der Zellenzahl in der Kavität. Es ist zu beachten , dass je nach den anfänglichen Störungen jede der beiden Zellen größer sein und in den Hohlraum vordringen kann. Die Konvektion von Ra = 103 ist in allen nachfolgenden Zeitstufen, etwa bei** ÿ **= 100, 1000, 2000 und 4000, konstant und schwach, aber die Konvektion bei Ra = 7** × **103** wird bei ÿ = 100, 1000, 2000 und 4000 **langsam stärker , obwohl sie nicht ausreicht, um den symmetrischen Zustand aufzubrechen. Andererseits** wächst **die Konvektion** bei Ra = 2 × **104 so stark an, dass sie die symmetrische Struktur aufbricht und mehr als zwei neue Zellen erzeugt ,** was bei ÿ = 100 **deutlich wird , und die Strömung wird asymmetrisch (in Abbildung 7). Bei Ra = 2** × **104** sind **bei** ÿ = 100 und 1000 **sechs Zellen** vorhanden . **Abhängig von den anfänglichen Störungen wird eine der beiden Zellen bei** ÿ = 1000 größer und dominiert die andere Zelle im Hohlraum und **bewegt sich in Richtung des Hohlraumzentrums. Bei** ÿ **= 2000 verringert sich die Anzahl der Zellen auf fünf, und dieser Trend bleibt bis** ÿ **= 4000 bestehen. Bei genauer Betrachtung ist es offensichtlich, dass die asymmetrische Strömung im weiteren Entwicklungsstadium einen Gleichgewichtszustand erreicht hat, der gemeinhin als stationäre Situation bezeichnet wird. Der Übergang von einem symmetrischen zu einem asymmetrischen Zustand, der im Bereich von Ra = 7** × **103 bis Ra = 2** × **104** auftritt , **kann als überkritische Pitchfork-Bifurkation verstanden werden. Diese Umwandlung wird durch das Einsetzen der Rayleigh-Bénard-Instabilität verursacht . Man erkennt, dass die Zellen stärker zirkulieren und das Strömungsmuster kontinuierlich asymmetrisch wird.**

Abbildung 7 zeigt die Zeitreihe von Temperatur und Geschwindigkeit für , Ra = 7 × 103 , Ra = 103 und Ra = 2 × 104 an verschiedenen Punkten P1, P2 und P5. Die Flüssigkeit in der talförmigen Höhle zeigt anfangs isothermes und stationäres Verhalten. Die Abkühlung und Erwärmung der oberen Wand und der schrägen Wände erfolgen gleichzeitig, wobei eine dimensionslose Temperatur als ÿc **für die obere Wand und** ÿh **für die schrägen Wände bezeichnet wird. Abbildung 7a zeigt, dass** zwischen den Punkten **P1 und P2 kein Temperaturunterschied besteht , und dass die Temperatur** am Punkt **P5 im Frühstadium bei einem kleinen Ra = 103 anders ist . Im Laufe der Zeit steigt und fällt die Temperatur an den drei verschiedenen Punkten der Übergangsphase . Schließlich gibt es im vollständig entwickelten Stadium keine Temperaturschwankungen mehr, und dann wird die Strömung stabil. Um die Strömungsstabilität genauer zu gestalten, haben wir hier dimensionslose Zeiten von 0 bis 5000 verwendet. In Abbildung 7d ist die Geschwindigkeit anfangs null;** mit zunehmender Zeit bleibt die Geschwindigkeit an den Punkten **P1 und P2 gleich ; und an Punkt P5 nimmt die Geschwindigkeit zu und wird schließlich konstant. Ähnliche Konsequenzen sind in Abbildung 7b,e zu sehen. Die Abbildungen zeigen deutlich, dass sich der Fluss innerhalb des Hohlraum In Abbildung 7c nimmt die Temperatur nun plötzlich ab, steigt dann während der Übergangsphase** an den Punkten **P1 und P2** an und stabilisiert sich schließlich im vollständig entwickelten **Am Punkt P5 gibt es keine Änderungen aufgrund seiner Position. Die Geschwindigkeit (Abbildung 7f)**

Machine Translated by Google

plötzlich deutlich überschießt und dann im vollständig ausgebildeten Stadium konstant wird, und
es zeigt an, dass die Strömung bei Ra = 2 × **104 in einen asymmetrischen stationären Zustand übergeht .**

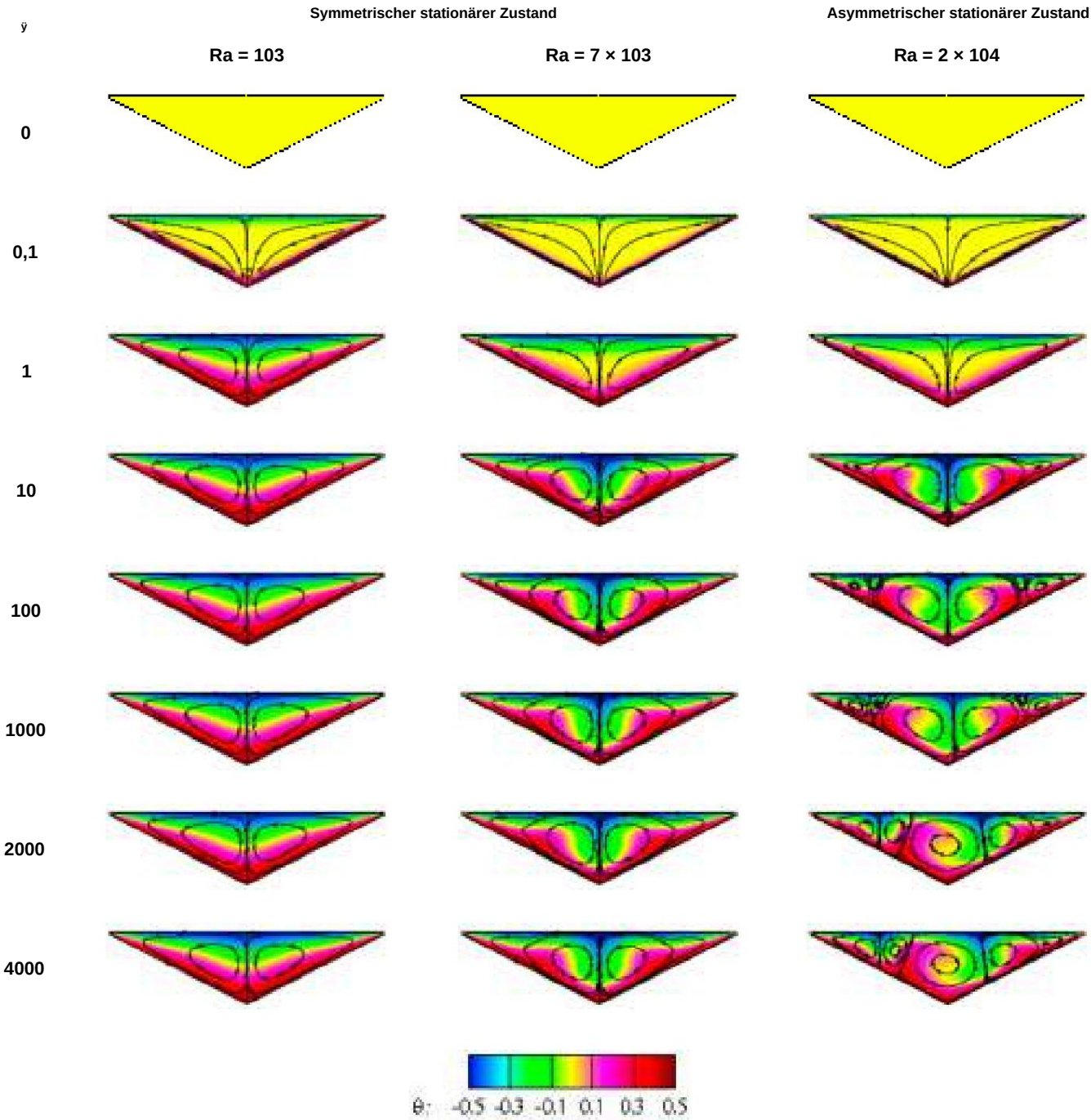


Abbildung 6. Stromlinien und Isothermen in verschiedenen dimensionslosen Zeitintervallen für den stationären Zustand
Rayleigh-Zahlen, Ra = 103 Ra = 7 × 103 und Ra = 2 × 104 .

Machine Translated by Google

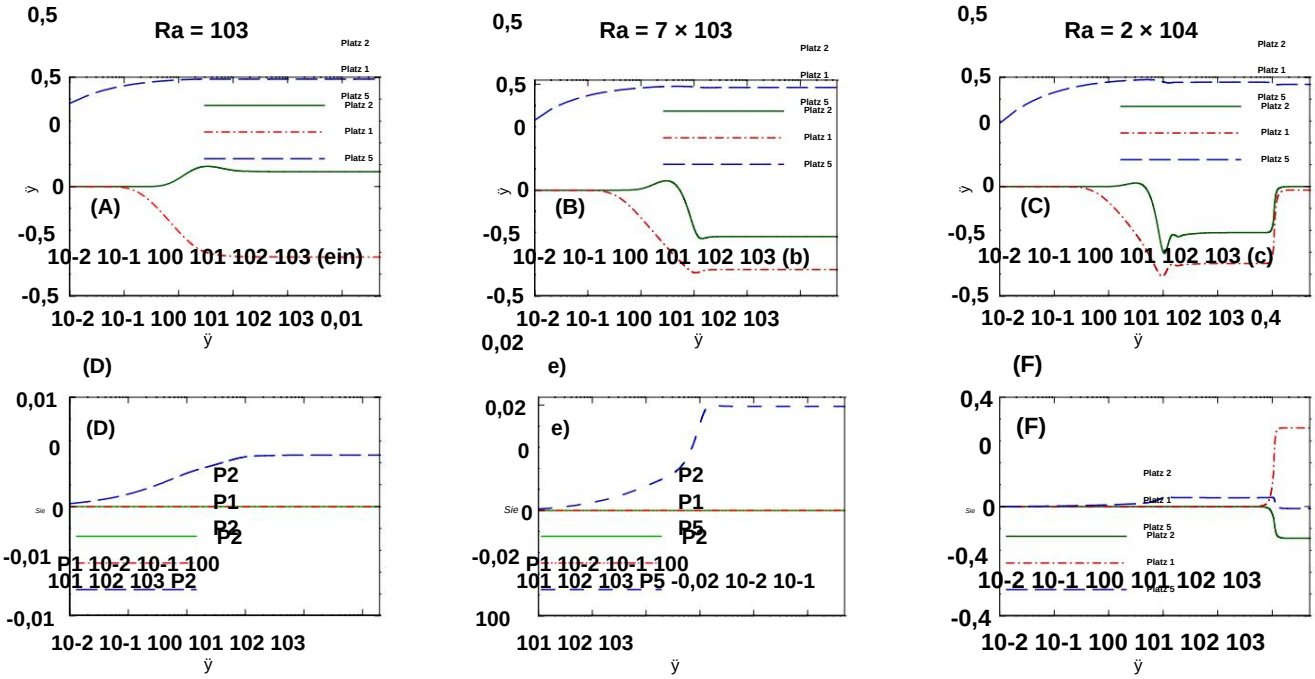


Abbildung 7. Zeitreihen der Temperatur und Geschwindigkeit an drei verschiedenen Punkten, P1 (0, 0,825), P2 (0, 0,46) und P5 (0,5, 0,255), für (a,d), , für (b,e), wenn Ra = 7 × 103 und für (c,f), wenn wenn Ra = 103 Ra = 2 × 104 .

5.2.1. Pitchfork-Bifurkation

Abbildung 8 veranschaulicht die Isothermen und Stromlinien, die einer Rayleigh-Zahl von Ra = 104 entsprechen . **Abbildung 8a demonstriert das anhaltende Vorhandensein einer klaren Symmetrie in der Strömung bei Ra = 7 × 103. Bei Ra = 104 und Ra =, 1,3 × 104 zeigt die Strömung Asymmetrie, wie in Abbildung 8b,c dargestellt. Es ist zu beachten, dass, abhängig von den anfänglichen Störungen, jede der beiden Zellen größer werden und sich in Richtung des Hohlraums bewegen kann. Wenn die Rayleigh-Zahl einen Wert von Ra = 1,3 × 104** erreicht , **wie in Abbildung 8c dargestellt, entsteht eine zusätzliche Zelle im oberen rechten Bereich des Hohlraums (abhängig von den anfänglichen Störungen) und eine solche asymmetrische Strömungskonfiguration wird deutlicher, wenn der Wert der Rayleigh-Zahl zunimmt. Das bedeutet, dass abgesehen vom symmetrischen Bruch die Rayleigh-Zahl für die wachsende Anzahl von Zellen innerhalb des Hohlraums verantwortlich ist. Abbildung 8b beispielsweise weist vier Zellen für Ra = 104** auf , **während Abbildung 8c fünf Zellen für Ra = 1,3 × 104 Ra = 104,** aufweist . **Der Übergang, der bei der Umwandlung eines symmetrischen in einen asymmetrischen Zustand beobachtet wird, kann als überkritische Pitchfork-Bifurkation charakterisiert werden, die auftritt, wenn die Rayleigh-Bénard- Instabilität beginnt.**

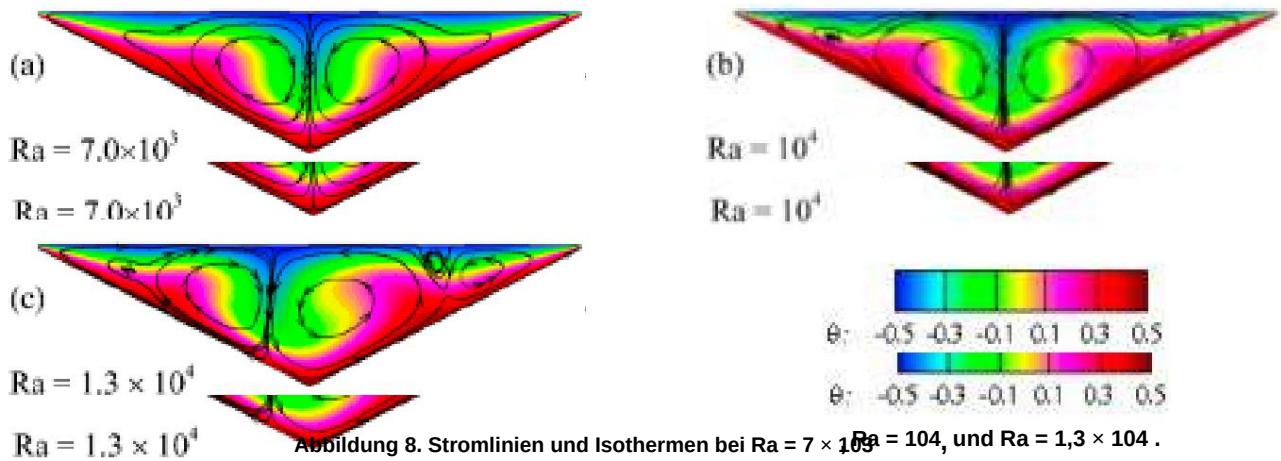


Abbildung 8. Stromlinien und Isothermen bei Ra = 7 × 103 Ra = 104, und Ra = 1,3 × 104 .

Machine Translated by Google

Tabelle 2 zeigt die x-Geschwindigkeit am Punkt P2 (0, 0,46) für verschiedene Rayleighzahlen (Ra = 101 bis 106), um den Übergang von einem symmetrischen zu einem asymmetrischen Zustand zu verstehen während der voll entwickelten Phase (ÿ **= 2000) der Pitchfork-Bifurkation. Für Ra-Werte kleiner als oder gleich 7,5 × 103 Aufgrund der Symmetrie der Strömung ist die** x-Geschwindigkeit nahezu Null. Sobald die Rayleigh-Zahl 7,6 × **103 erreicht oder überschreitet Die Polarität der Zelle verschiebt sich zum Positiven wenn die x-Geschwindigkeit zunimmt und negativ, wenn die x-Geschwindigkeit abnimmt.**

Tabelle 2. Geschwindigkeiten in x-Richtung für verschiedene Rayleighzahlen am Punkt P2 (0, 0,46).

Rayleigh-Zahl 101	Geschwindigkeit
102	0
103	0
7,5	0
× 103 7,6	0
× 103 104	±9,47 × 10ÿ5
1,2	±0,00669
× 104 1,5	±0,0557
× 104 105	±0,09
106	±0,096
	±0,0993

Im Anfangsstadium bei ÿ **= 0 ist die Temperatur konstant, wie in Abbildung 9** dargestellt. **Die Abbildung zeigt, dass die Ströme im Frühstadium bei** ÿ **= 1** symmetrisch und kontinuierlich sind **für Ra = 5 × 104, Ra = 105 und Ra = 106 . Die Pitchfork-Bifurkation bewirkt, dass der Fluss intensivieren sich mit der Zeit und werden schließlich asymmetrisch. Die Grafiken zeigen die asymmetrische Stromlinien und Isothermen bei Rayleighzahlen Ra = 5 × 104, Ra = 105 und Ra = 106 bei der Übergangsstadien** (ÿ **= 100 und 800). Es ist zweifellos interessant, dass die Strömung oszilliert für eine beträchtliche Zeit mit einer höheren Rayleigh-Zahl. In dieser Abbildung für alle Ra Werte, die Strömungen in der talförmigen Höhle sind asymmetrisch und stetig mit dem Vorbeiziehen von Zeit. Für einen höheren Ra = 106** Die Strömung wird bei ÿ = 800 **asymmetrisch und stabil , während Bei Ra = 5 × 104 und Ra = 105 dauert es länger, bis der asymmetrische stationäre Zustand erreicht ist.**

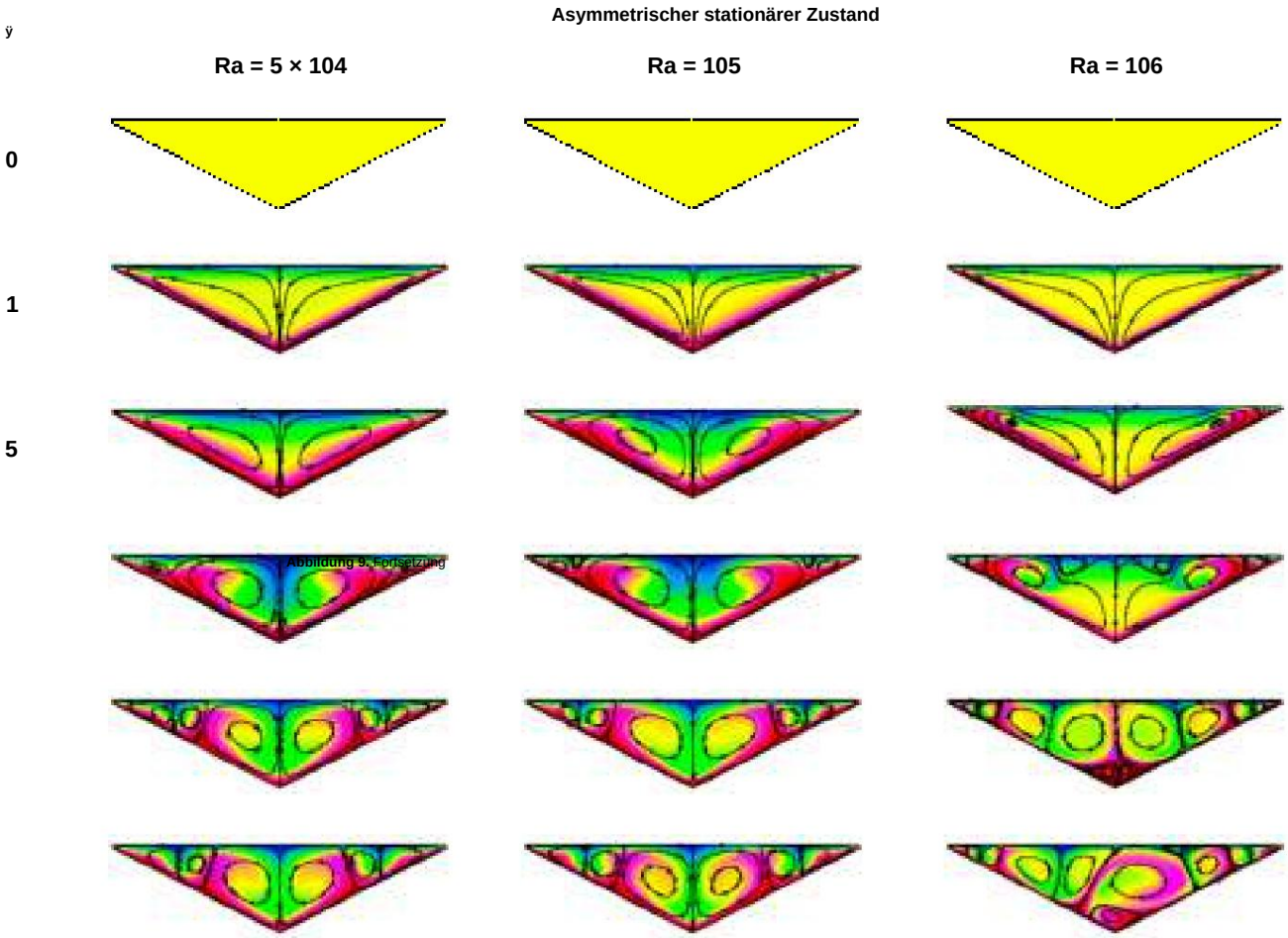


Abbildung 9. Fortsetzung

Machine Translated by Google

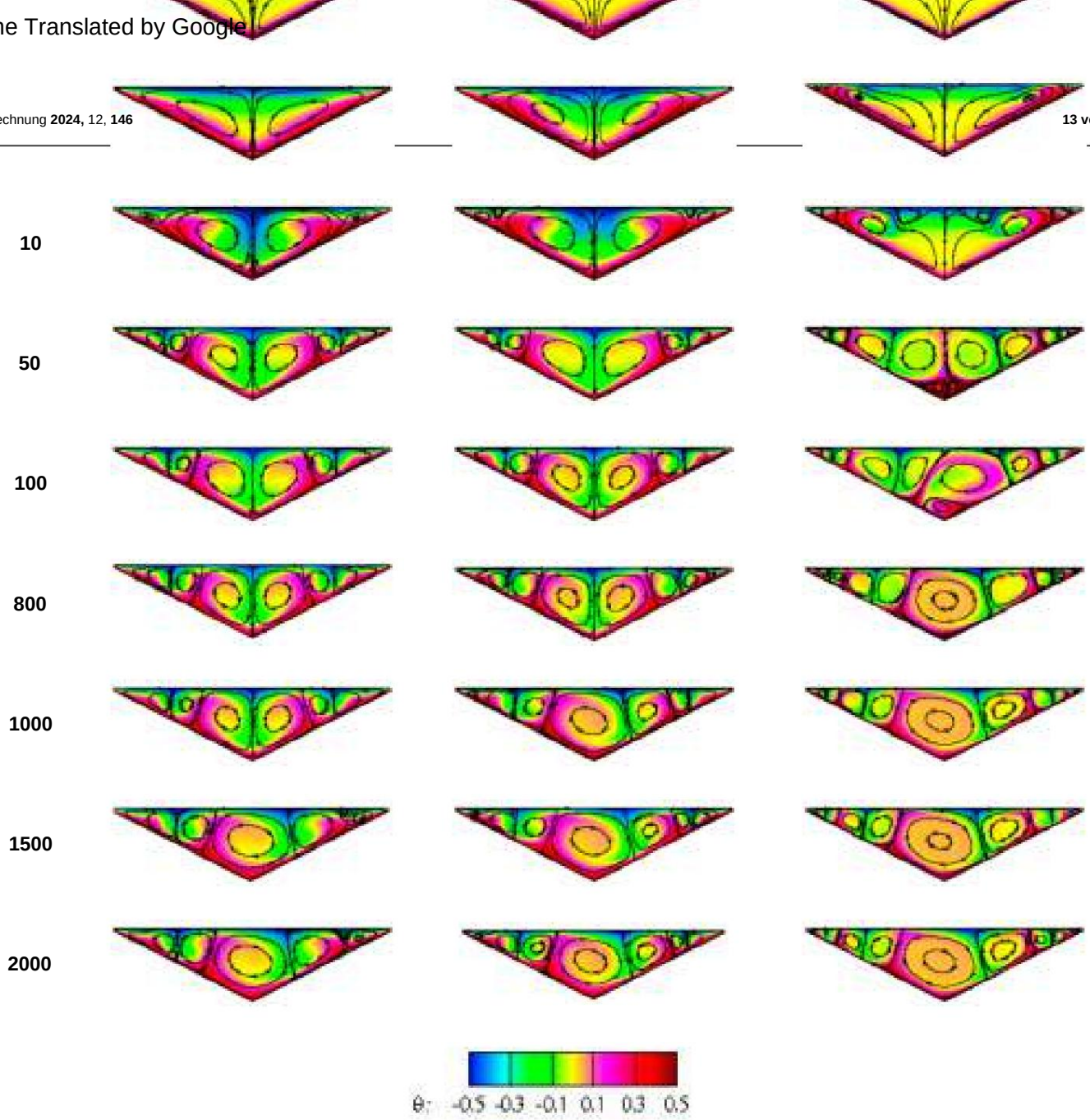


Abbildung 9. Stromlinien und Isothermen in verschiedenen dimensionslosen Zeitintervallen für Ra = 5 × 104 Ra = 105 und Ra = 106 .

Offensichtlich beeinflussen Temperatur und Geschwindigkeit mit der Zeit den Fluss im Hohlraum, wie wurde in Abbildung 10 für mehr Präzision bei einer Reihe von Rayleigh-Zahlen und verschiedenen Punkte. Abbildung 10a,b zeigt, dass die Temperaturen an den Punkten **P1 zunächst gleichmäßig sind und P2, aber Punkt P5 befindet sich in der Nähe der beheizten Wand (siehe Abbildung 1), was dazu führt, dass er sich erwärmt schneller als die anderen Punkte im Frühstadium. Mit der Zeit steigt die Temperatur in der Übergangsphase fällt zunächst ab, steigt dann an und erreicht schließlich seinen konstanten Punkt im voll entwickelten Stadium, wenn es keine Temperaturschwankungen mehr gibt. Außerdem Aus Abbildung 10d,e ist klar ersichtlich, dass die Geschwindigkeit mit der Zeit zunimmt. Geschwindigkeitsüberschreitungen in der Übergangsphase, bevor sie in der voll entwickelten Phase stabil werden. Stadium. Abbildung 10c zeigt, dass die Temperatur im Übergangsstadium ansteigt und stabil im voll entwickelten Stadium. Im Gegensatz dazu schwankt die Geschwindigkeit in Abbildung 10f während Übergangszeit, bevor sie in der letzten Phase konstant wird. Die vorangegangene Zahlen und Analysen zeigen, dass in einem asymmetrischen Zustand die Strömung instabil wird in der Übergangsphase und dann stabil in den voll entwickelten Stadien.**

Machine Translated by Google

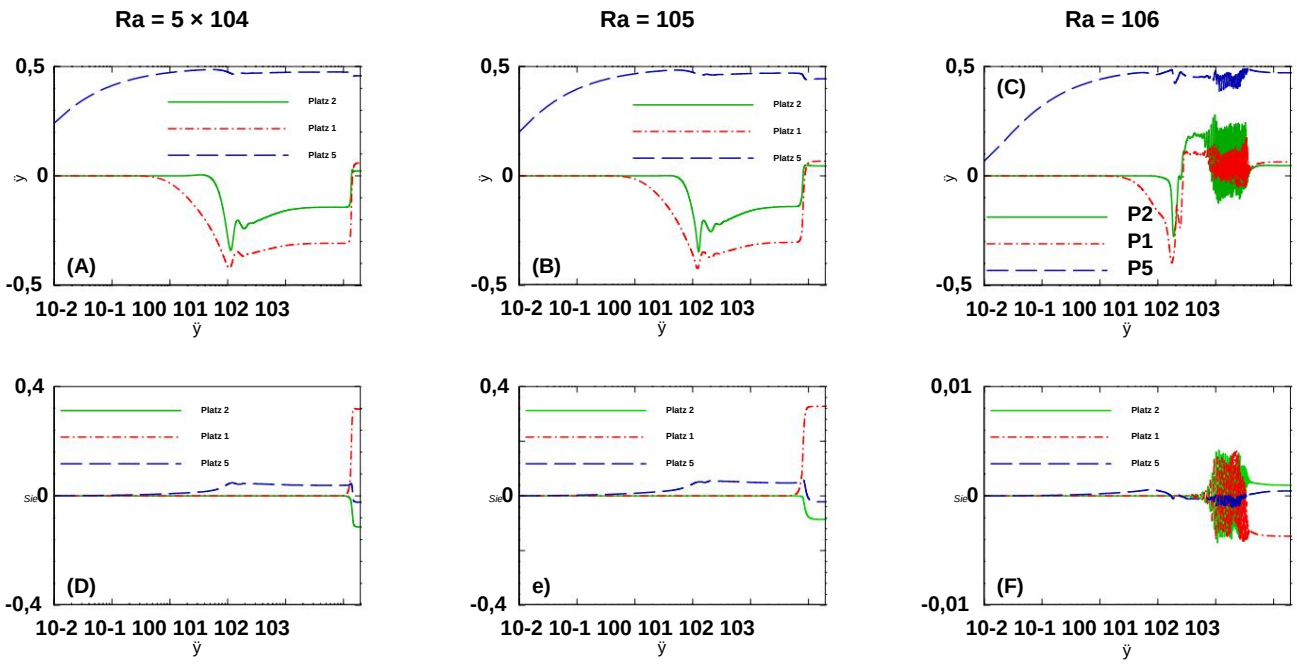


Abbildung 10. Zeitreihen der Temperatur und Geschwindigkeit an drei verschiedenen Punkten, P1 (0, 0,825), P2 (0, 0,46) und P5 (0,5, 0,255), für (a,d), wenn Ra , für (b,e), wenn Ra = 105, und für (c,f), wenn = 5 × 104 Ra = 106 .

5.2.2. Andere Verzweigungen

Bei höheren Rayleigh-Zahlen sind die asymmetrischen Isothermen und Stromlinien **in Abbildung 11 dargestellt . Es ist offensichtlich, dass bei steigender Rayleigh-Zahl mehrere Arten weiterer Verzweigungen auftreten, die zu einer Zunahme der Zellenzahl führen, wie in Abbildung 11** zu sehen ist. **In Abbildung 11a befinden sich zwei Zellen im Hohlraum. Mit steigender Rayleigh-Zahl sehen wir in Abbildung 11b , dass die Zellenzahl vier wird; in Abbildung 11c beträgt die Zellenzahl fünf. Beispielsweise steigt die Zellenzahl von sechs bei einer Rayleigh-Zahl von 5 × 104 in Abbildung 11d auf über sechs, wie in Tabelle 3 gezeigt. Abbildung 11 zeigt, dass sich bei steigender Rayleigh-Zahl mehr neue kleine Zellen auf der linken oder rechten Seite des Hohlraums entwickeln. Eine einzelne große Zelle bleibt jedoch konstant in der Mitte des Hohlraums bestehen. Dies deutet darauf hin, dass die Strömungskonfiguration innerhalb des Hohlraums für einen asymmetrischen stationären Zustand bei steigender Rayleigh-Zahl zunehmend kom**

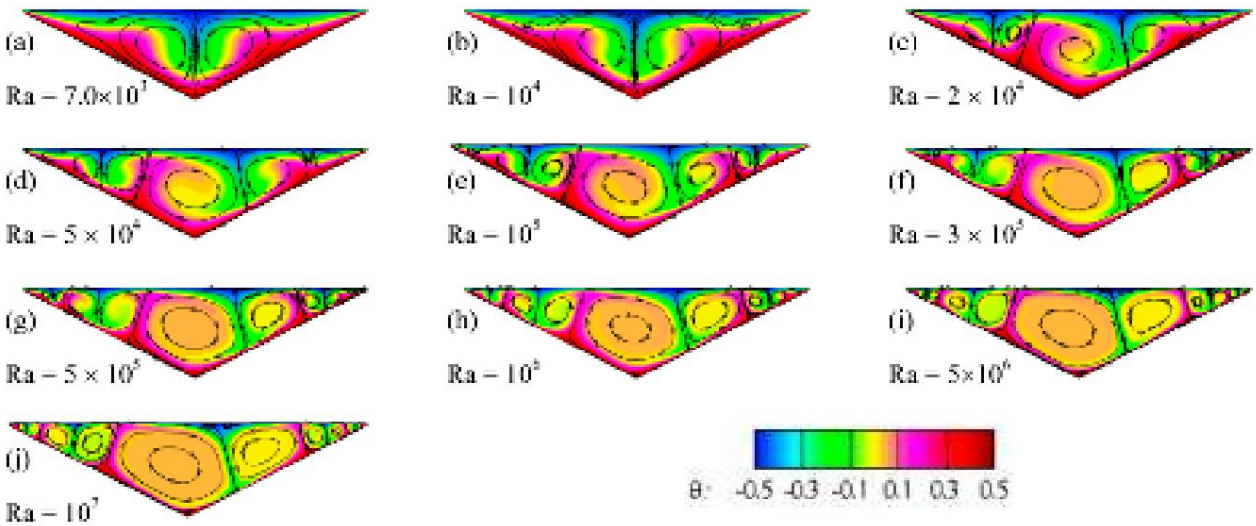


Abbildung 11. Stromlinien und Isothermen für verschiedene Rayleigh-Zahlen im vollständig entwickelten Stadium.

Machine Translated by Google

Tabelle 3. Anzahl der Zellen mit entsprechenden Rayleigh-Zahlen.

Rayleigh-Zahl 7 ×	Anzahl der Zellen
103 104	2
2	4
× 104 5	5
× 104	6
	7
105 3 ×	9
105 5 ×	10
	11
105 106	13
5 × 106 107	15

Tabelle 3 zeigt, dass die Rayleigh-Zahl und die Anzahl der Zellen miteinander verknüpft sind. Die Rayleigh-Zahl stieg von 7 × 103 auf 107, als die Anzahl der Bifurkationen von zwei auf fünfzehn Zellen anstieg. Für Ra-Werte zwischen 104 und 107 ist klar, dass es eine nahezu lineare Verbindung zwischen der Anzahl der Zellen und dem Ra gibt.

5.3. Instationäre Strömung

Eine asymmetrische Strömungsstruktur entsteht infolge einer Pitchfork-Bifurkation , die in den späteren Stadien der Übergangsperiode auftritt. Wie bereits erwähnt, erfährt die numerische Simulation schon früh eine Pitchfork-Bifurkation. Abbildung 12 zeigt die Stromlinien und Isothermen für Ra = 107 und Ra = 108, um die Strömung bei höheren Rayleigh-Zahlen für verschiedene Zeiten besser untersuchen zu können. In Abbildung 12 ist die Temperatur **anfänglich bei ÿ = 0 für alle Ra-Werte konstant. Die Abbildung zeigt, dass die Flüssigkeiten bei ÿ = 1 für alle Rayleigh-Zahlen symmetrisch sind, aber mit der Zeit, wenn ÿ = 5 ist, werden sie asymmetrisch und bilden zwei zusätzliche kleine Zellen in der Kavität an den oberen rechten und linken Ecken. Mit zunehmender Zellzahl weisen alle Ra-Werte bei ÿ = 10 in Abbildung 12 dasselbe Strömungsmuster auf. Bei ÿ = 50 und Ra = 107 erscheint eine winzige Zelle oben in der Mitte der beiden größten Zellen im Hohlraum, aber bei Ra = 5 × 107 und Ra = 108 und ÿ = 50 reißt die stationäre Strömung und wird instationär. In Abbildung 11** ist die Strömung bei Ra = 5 × **107 und Ra = 108 und** ÿ = 50 **stärker gewunden , obwohl sie immer noch konstant ist, und die größte Zelle hat einige kleinere Zellen oben rechts und links. Das deutet darauf hin, dass zwischen Ra = 107 und 5 × 107** eine **Hopf-Bifurkation vorliegt** (Einzelheiten **zur Bifurkation** finden Sie in **[19]).** Bei Ra = 107 bleibt **der asymmetrische** stationäre Zustand in allen nachfolgenden Übergangsstadien, entwickelten Übergangsstadien und **voll entwickelten Stadien bei ÿ = 100, 1000, 1500 bzw. 2000 ähnlich . Die beobachteten Trends bleiben sowohl während der entwickelten Übergangsphase (ÿ = 1000 und 1500) als auch während der vollständig entwickelten Phase (ÿ = 2000) für zwei verschiedene Rayleigh-Zahlen, nämlich Ra = 5 × 107 und Ra = 108,** konsistent . **Aber wenn ÿ steigt, wie in Abbildung 12 für Ra = 108 bei ÿ = 2000 gezeigt, wachsen beide Zellen in der Mitte der beiden größten Zellen. Die größte zentrale Zelle zeigt eine Bewegung von rechts nach links. Der instationäre Fluss wird aufgrund seiner mangelnden Stabilität immer komplexer .**

Ra = 5 × 107

Im Lauf der Zeit wurde die Temperaturreihe verfolgt und spektral analysiert, um die instationäre Strömung bei höheren Rayleigh-Zahlen zu verstehen. Abbildung 13 zeigt die Temperaturschwankungen im Zeitverlauf und die Leistungsspektren in Abhängigkeit von verschiedenen Ra -Werten. Abbildung 13a demonstriert eine stationäre Strömung während des vollständig entwickelten Stadiums für Ra = 107, während Abbildung 13b eine periodische Strömung für Ra = 5 × 107 zeigt . **Zusätzlich zeigt Abbildung 13c die in Abbildung 13b befindliche Temperaturleistungsspektrendichte .** Die **Grundfrequenz der periodischen Strömung** mit harmonischen Modi beträgt fp **= 0,397. Die periodische Strömung ändert sich, wenn die Rayleigh-Zahl steigt. Dies deutet auf das Auftreten einer weiteren Bifurkation hin, bei der sich eine periodische Lösung in eine andere verwandelt. Wenn die Rayleigh-Zahl weiter steigt, wird die instabile Strömung chaotisch, wie in Abbildung 13d zu sehen ist, die das vollständig entwickelte Stadium für Ra = 108** zeigt . **Gemäß Abbildung 13e verschwindet die eindeutige Frequenz mit harmonisc**

Machine Translated by Google

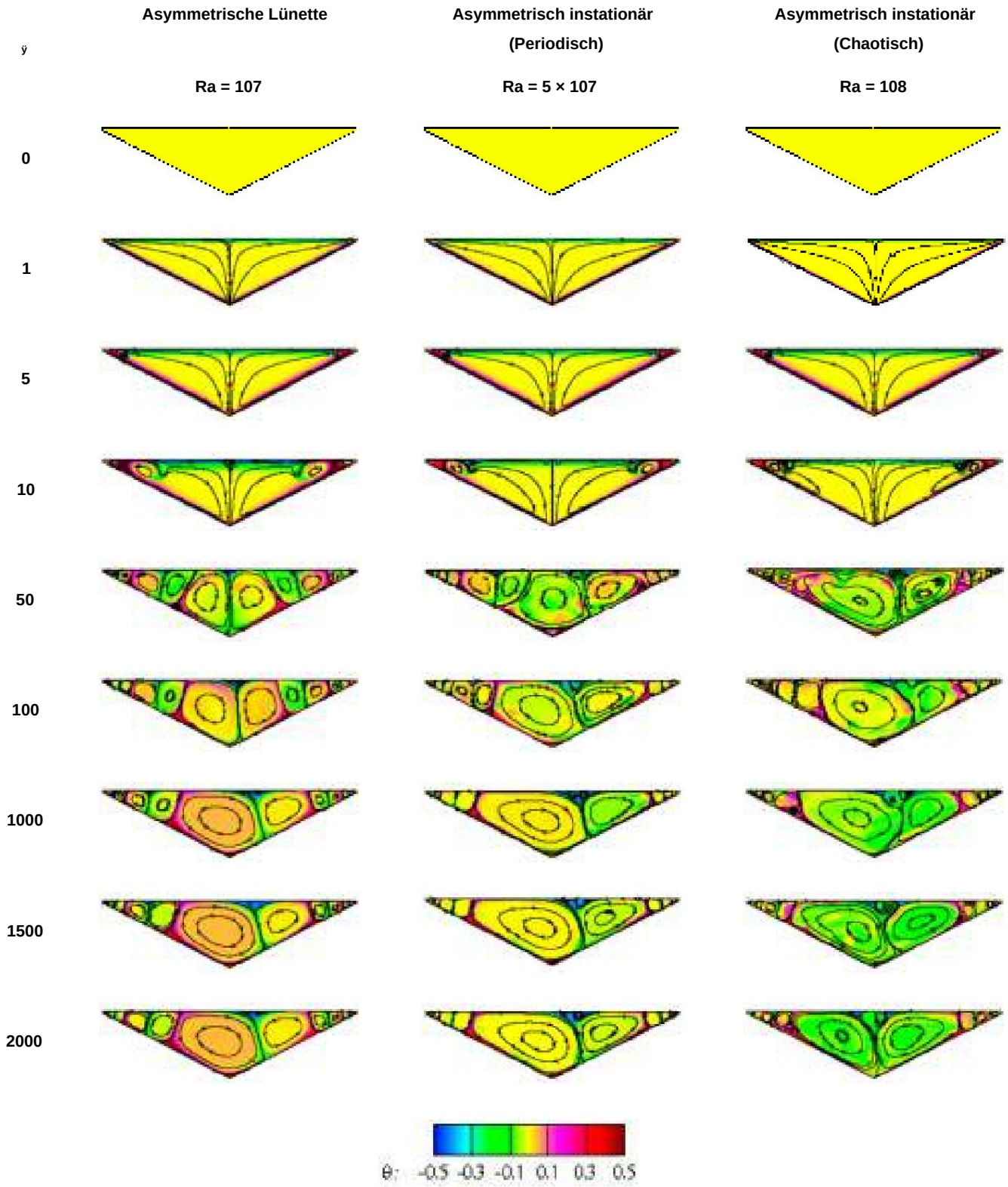


Abbildung 12. Stromlinien und Isothermen in verschiedenen dimensionslosen Zeitintervallen für deutlich höhere Rayleighzahlen: Ra = 107, Ra = 5 × 107 und Ra = 108 .

Machine Translated by Google

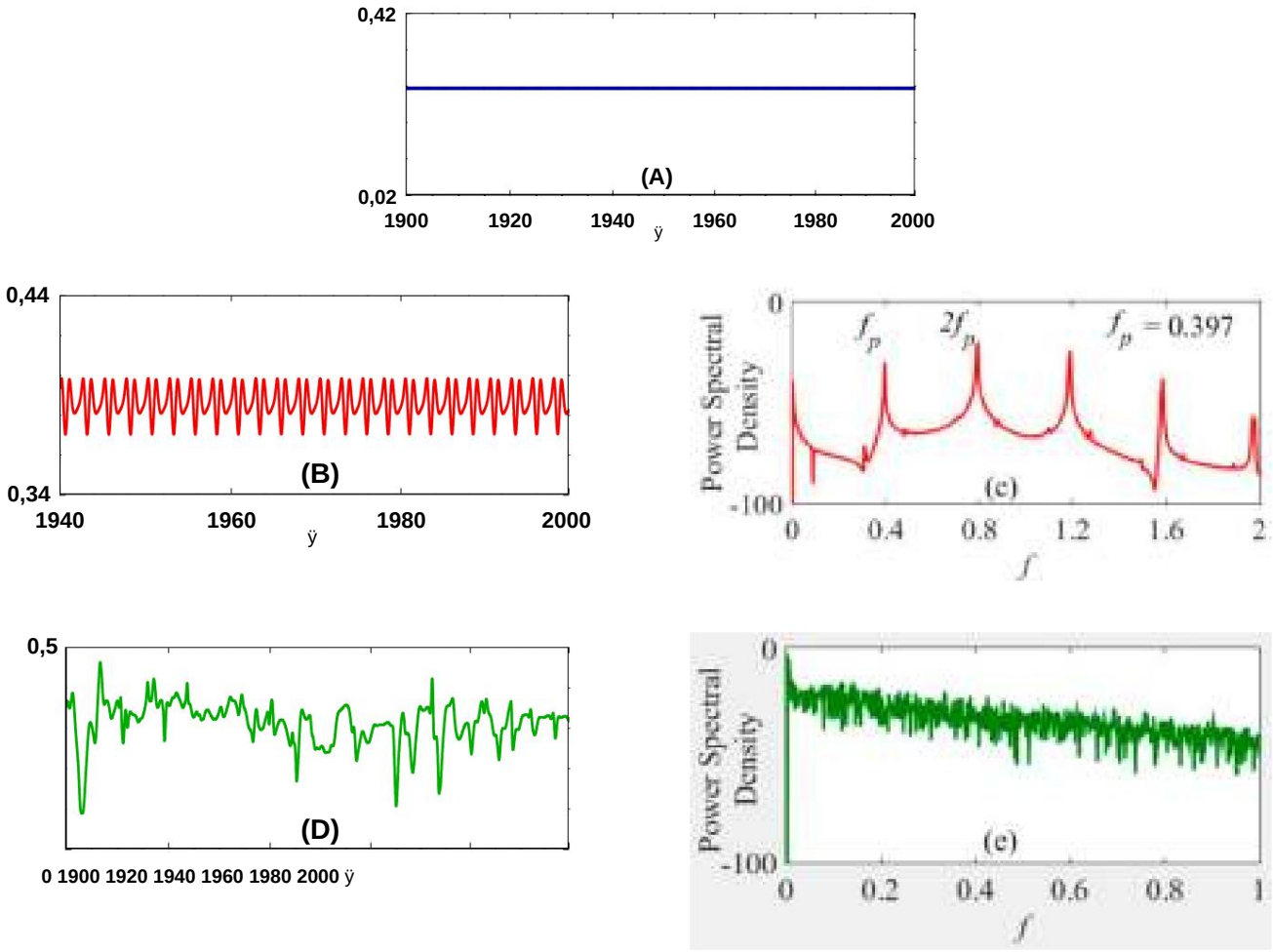


Abbildung 13. Eine Zeitreihe der Temperatur im vollständig entwickelten Stadium und der Leistungsspektraldichte am Punkt P5 (0,5, 0,255) (a) für Ra = 107 , (b) und (c) für Ra = 5 × 107 und (d), (e) für Ra = 108 .

Abbildung 14 zeigt eine Zeitreihenanalyse der Temperatur sowie der Geschwindigkeit an drei verschiedenen Punkten, P1, P2 und P5, mit höheren Rayleighzahlen, nämlich Ra = 107 5 × 107 und 108 . Da die Temperatur in Abbildung 14a–c anfangs isotherm und konstant ist, ist sie bei höheren Rayleighzahlen in verschiedenen S In der Übergangszeit schwankt die Temperatur mit der Zeit für jedes Ra in Abbildung 14.

Im fortgeschrittenen Entwicklungsstadium wird die Temperatur, wie in Abbildung 14a gezeigt, konstant; das heißt, es gibt keine Temperaturänderungen, aber in Abbildung 14b sehen wir, dass sie periodisch wird. In Abbildung 14c wird der Fluss im voll entwickelten Stadium mit zunehmender Zeit chaotischer und komplexer. Die Geschwindigkeit (Abbildung 14d–f) beginnt jedoch bei **Null und ändert sich im Laufe der Zeit während des Übergangsstadiums. Abbildung 14d–f zeigt, dass der Fluss im entwickelten Stadium stabil, in Abbildung 14e periodisch und in Abbildung 14f chaotisch ist. Darüber hinaus scheint sich der Fluss eines periodischen Zustands in einem Übergangsstadium von einem periodischen zu einem chaotischen zu ändern, was am wichtigsten ist . Darüber hinaus ist der Fluss in einem chaotischen Zustand im Übergangsstadium und in den entwickelten Stadien ständig chaotisch.**

Machine Translated by Google

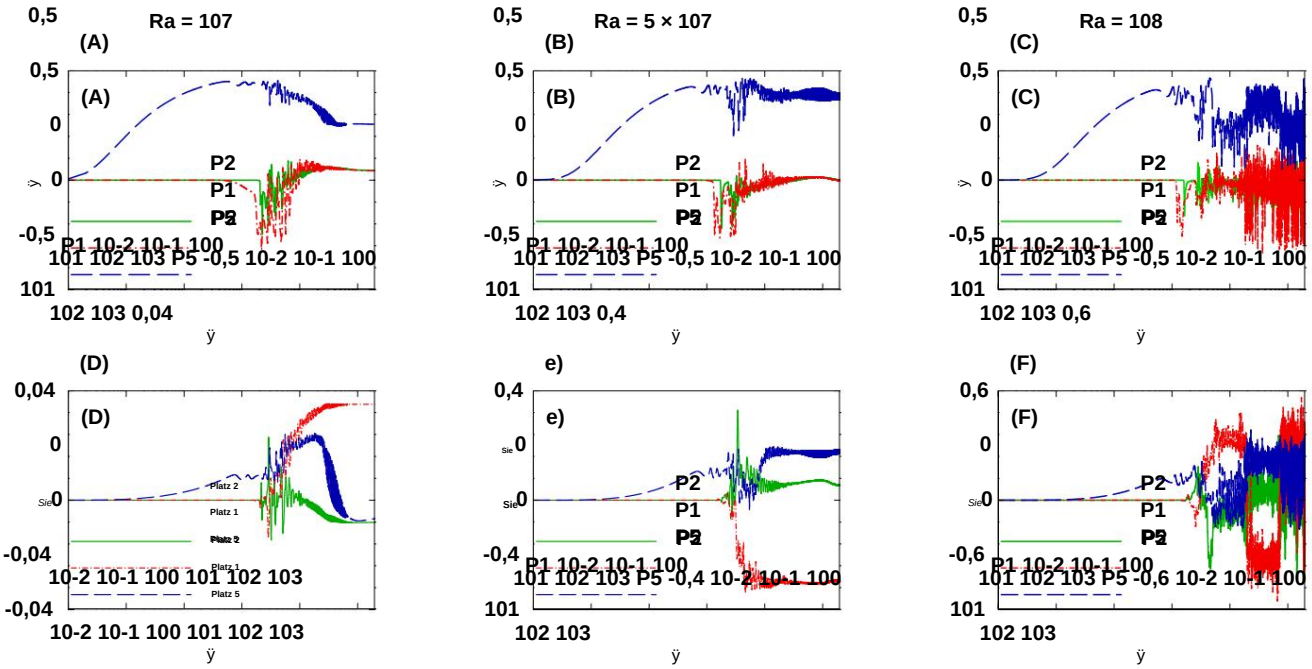


Abbildung 14. Zeitreihen der Temperatur und Geschwindigkeit an drei verschiedenen Punkten, P1 (0, 0,825), P2 (0, 0,46) und P3 (0,5, 0,255), für (a,d), , für (b,e), wenn Ra = 5 × 107 und für (c,f), wenn wenn Ra = 107 Ra = 108 .

5.3.1 Hopf-Bifurkation

Abbildung 15 zeigt die Stromlinien und Isothermen für Ra = 107 und Ra = 2 × 107 , um eine genauere Analyse der Strömung im Fall größerer Rayleigh-Zahlen zu ermöglic Abbildung 15a zeigt die komplizierteren Strömungen im gesamten voll entwickelten Stadium für Ra = 107 , obwohl es immer noch stabil ist. Eine genauere Betrachtung der numerischen Ergebnisse zeigt jedoch, dass mehr als zwei winzige Zellen abwechselnd auftreten; infolgedessen wird die Strömung im voll entwickelten Stadium für Ra = 2 × **107 instationär .** Dies deutet darauf hin, dass es **zwischen Ra = 107 und 2 × 107 eine Hopf-Bifurkation gibt .**

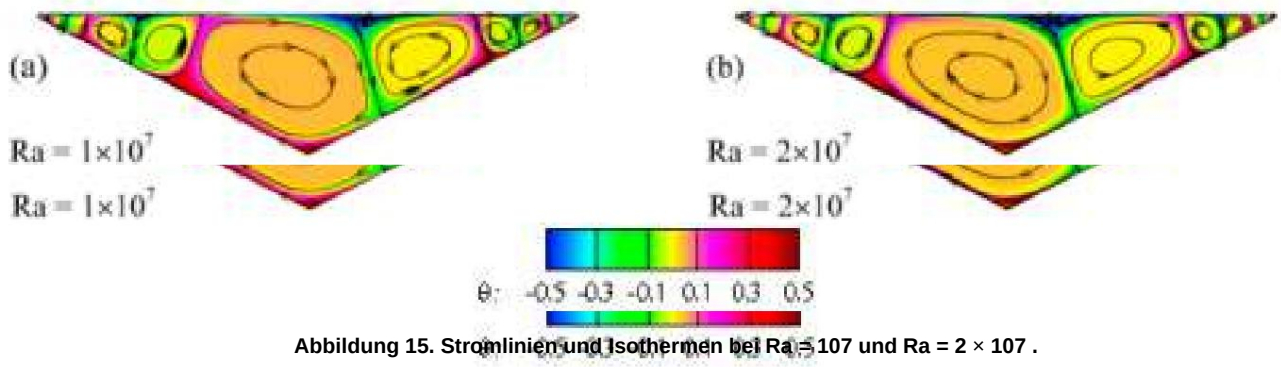


Abbildung 15. Stromlinien und Isothermen bei Ra = 107 und Ra = 2 × 107 .

Abbildung 16 zeigt die Attraktoren mit Werten von ÿ = 300 bis 2000 für Ra = 107 und ÿ = 1000 bis 1500 für Ra = 5 × 107 am Definitionspunkt P1 (0, 0,825), um das Verständnis der Hopf-Bifurkation zu erleichtern , die während des Übergangs vom **stationären Zustand zum periodischen Stadium stattfindet .** Abbildung **16a zeigt, dass die u-ÿ -Ebenenkurve einen bestimmten Wert erreicht, wenn Ra = 107 ist . Abbildung 16b zeigt einen Grenzzyklus für Ra = 5 × 107. Als Ergebnis gilt, wenn Ra = 5 × 107 , Es findet eine Hopf-Bifurkation statt (für weitere Informationen zur Hopf-Bifurkation siehe [65]).**

Machine Translated by Google

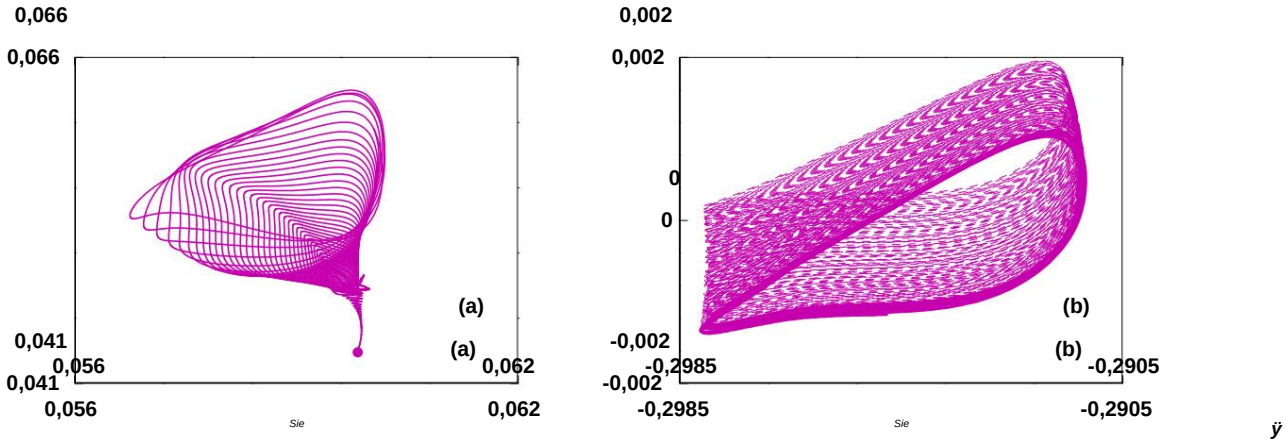


Abbildung 16. Der Grenzpunkt und der Grenzzyklus für (a) Ra , und für (b) Ra = 5 × 107 auf der Ebene von u-ÿ = 107 am Punkt P1 (0, 0,825).

5.3.2. Chaotisch

Abbildung 17a zeigt, dass die beiden Zellen im oberen rechten Teil der größten Zelle genau dann größer werden, wenn die Rayleigh-Zahl zunimmt. Die größte Zelle in der Mitte wandert bei Ra = 108 gleichermaßen über die rechte und , wie in Abbildung 17b zu sehen. linke Seite. Die instationäre Strömung wird zunehmend komplizierter, was als chaotisch bezeich

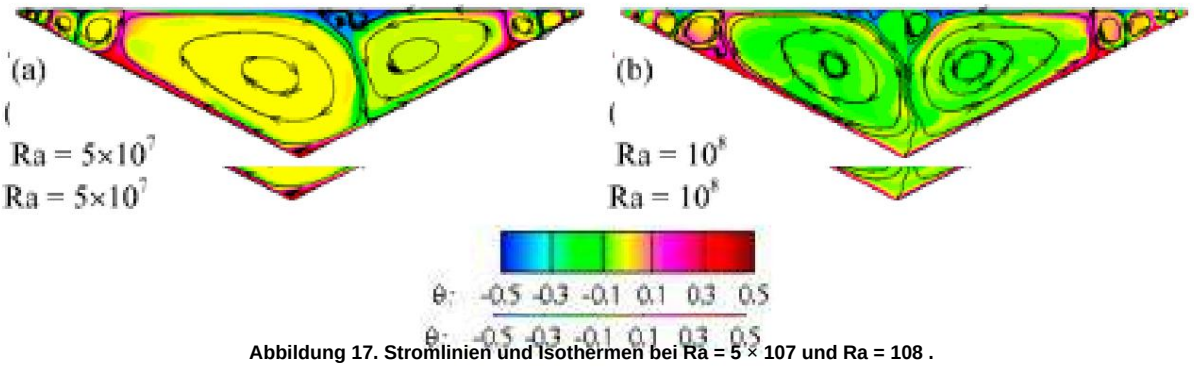


Abbildung 17. Stromlinien und Isothermen bei Ra = 5 × 107 und Ra = 108 .

Abbildung 18 zeigt die Trajektorien durch den Bühnenraum in der u-ÿ- Ebene am Punkt P5 (0,5, 0,255) für Ra = 5 × 107 und 108 , um klarer zu veranschaulichen, wie sich der periodische Zustand in einen chaotischen Zustand ändert. Der in Abbildung **18a dargestellte beobachtete Grenzzyklus demonstriert die periodische Natur der instationären Strömung bei einer Rayleigh-Zahl von Ra = 5 × 107. Dieses Ergebnis** steht im Einklang mit den in Abbildung **16 dargestellten Informationen und unterstützt weiter die Existenz eines Grenzzyklus. In Abbildung 18b zeigt die Trajektorie für Ra = 108, dass sich die periodische Strömung in eine chaotische Strömung ändert ,** was zwischen Ra = 5 × **107 und 108 stattfindet . Eine detaillierte Erklärung der Bühnenraum-Trajektorien findet sich in [66].**

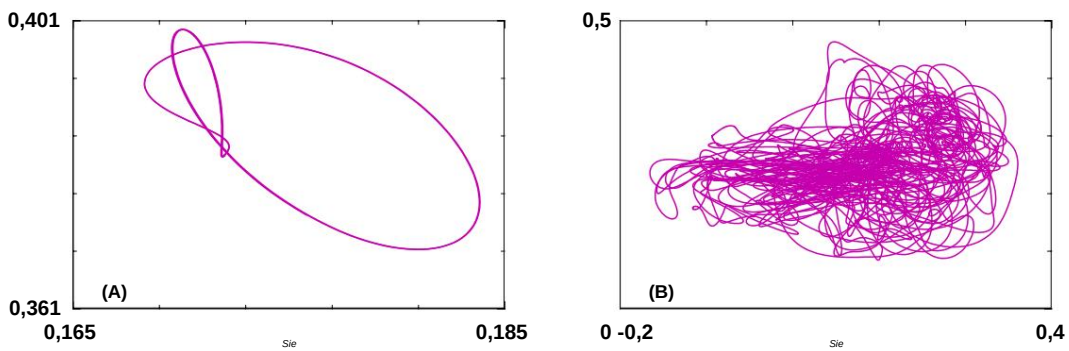


Abbildung 18. Temperatur- und x-Geschwindigkeitsverläufe im Bühnenraum für die Werte Ra = 5 × 107 und Ra = 108 am Punkt P5 (0,5, 0,255).

tt

Machine Translated by Google

5.4. Temperatur und Geschwindigkeit

Abbildung 19 zeigt die Temperatur und Geschwindigkeit an bestimmten Punkten P1 (0, 0,825) im Zeitverlauf bei verschiedenen Rayleigh-Zahlen. Diese Informationen dienen zum Verstä die Bildung natürlicher Konvektionsströmungsmuster innerhalb des Hohlraums als Reaktion auf plötzliche Erwärmung durch die geneigten Wände und Abkühlung durch die obere Wand. Die Simulationen wurden mit verschiedenen Rayleigh-Zahlen im Bereich von Ra = 103 bis 108 durchgeführt . Beobachtung bezüglich der verschiedenen schwankenden Strömungseigenschaften über einen Bereich von Rayleigh-Zahlen hinweg gemacht. Die Abbildungen 5, 6, 9 und 12 zeigen die Isothermen und die entsprechenden Stromlinien für verschiedene Rayleigh-Zahlen, insbesondere im Fall von A = 0,5. Die beobachteten numerischen Ergebnisse für die verschiedenen Ra-Werte, wie in Abbildung 19 dargestellt, weisen erkennbare Änderungen auf. Bei der niedrigsten Rayleigh-Zahl sind erstmals konvektive Strömungsinstabilitäten zu beobachten.

Allerdings nehmen Wellenzahl und Instabilität mit zunehmenden Rayleigh-Zahlen zu. Aufgrund der Symmetrie und des kontinuierlichen Flusses ist zu erwarten, dass der Fluss bei Ra = 103 schwächer ist und ein symmetrisches Verhalten zeigt . Während der Übergangsphase des Fluidflusses kann beobachtet werden, dass sich der Fluss bei den Rayleigh-Zahlen Ra = 104 und 106 asymmetrisch entwickelt . **Mit Fortschreiten des Flusses zum voll entwickelten Stadium stabilisiert er sich jedoch. Schließlich wechselt der Fluss bei Ra = 107 bzw. Ra = 108** in einen periodischen und einen chaotischen , Zustand , **wie in Abbildung 19a gezeigt. Wie in Abbildung 19b dargestellt, ist eine ähnliche Charakteristik** auch bei der **x-Geschwindigkeit am Punkt P1 zu erkennen .**

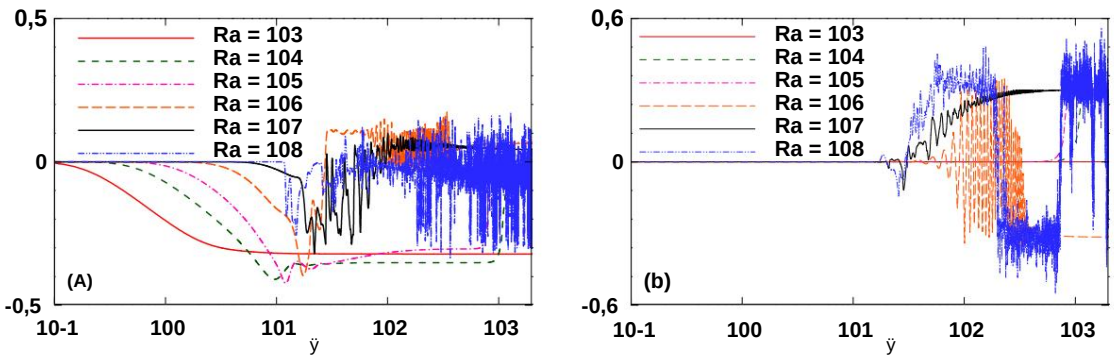


Abbildung 19. (a) Temperatur-Zeitreihe und (b) x-Geschwindigkeits-Zeitreihe für verschiedene Rayleigh-Zahlen am Punkt P1 (0, 0,825).

5.5. Wärmeübertragung

Während der Übergangsphase dominiert die konvektive Wärmeübertragung im V-förmigen Hohlraum. Die konvektive Wärmeübertragung wird durch die unregelmäßigen Schwankungen und Wirbel verstärkt, die die Flüssigkeitsmischung fördern. Für Luft wird die Nusselt-Zahl untersucht, die das Verhältnis der konvektiven zur konduktiven Wärmeübertragung ausdrückt. Die Nusselt-Zahl Nu [60–62] ist definiert als:

$$Nu = \frac{1}{\ln} \int_{\ln}^{\frac{\ddot{y}\ddot{y}}{\ddot{y}n}} ds. \quad (11)$$

In Übereinstimmung mit Abbildung 20a wurde eine Zeitreihendarstellung bereitgestellt, um die durchschnittliche Nusselt-Zahl zu veranschaulichen, die mit der geneigten Wand verbunden ist. Diese spezielle Messung wurde verwendet, um die Menge der Wärmeübertragung zu quantifizieren, die über die Hohlraumwand erfolgt. Es ist wichtig hervorzuheben, dass Abbildung 20b zusätzlich die Darstellung des Nu nach Normalisierung durch Ra1/4 zeigt. Das Vorhandensein eines signifikanten Temperaturunterschieds zwischen der Flüssigkeit und der Wand kann zum erheblichen Wärmeübertragungsphänomen beitragen. Folglich wird erwartet, dass ein großer Wert der Nusselt- Zahl (Nu) beobachtet wird. Das beobachtete Phänomen kann auf die gleichzeitige Anwendung von Heizung und Kühlung sowohl auf die geneigten Wände als auch auf die obere Wand zurückgeführt werden. Abbildung 20b zeigt, wie Nu im Laufe der Zeit während der Anfangsphase dramatisch abnimmt und während der vollständig zurückgebildeten Phase allmählich einen Wert erreicht, der entweder konstant oder oszillierend ist, und dieser Wert wird durch die Rayleigh-Zahl bestimmt. Dies

Machine Translated by Google

ähnelt denen in Abbildung 13, wo die Nusselt-Zahl für Ra ÿ 5 × 107 oszilliert , für Ra = 107 jedoch konstant bleibt . Im Gegensatz zu denen in Abbildung 20a ist es offensichtlich, dass die Kurven von Nu und den Kurven in Abbildung 20b zusammenfallen. Infolgedessen funktioniert **die Skalierung** Nu~Ra1/4 **unter Berücksichtigung des aktuellen Satzes von Ra-Werten effektiv. Abbildung 20b zeigt, dass** NuRaÿ1/4 **bei steigender Rayleigh-Zahl fast einen konstanten Wert von 1,473 beibehält, obwohl die Rayleigh-Zahl etwas abnimmt.**

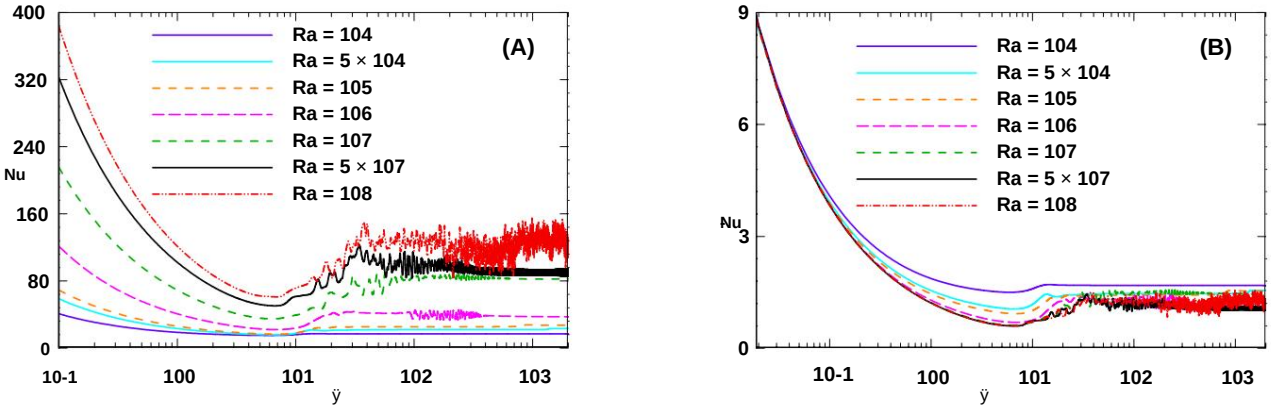


Abbildung 20. (a) Die Nusselt-Zahl und (b) die normalisierte Nusselt-Zahlen-Zeitreihe für verschiedene Arten von Rayleigh-Zahlen.

6. Schlussfolgerungen

Die vorliegende Untersuchung befasst sich mit der numerischen Erforschung instationärer 2D-Konvektionsströmungen in einem talförmigen Hohlraum, der mit Wasser gefüllt ist. Dabei erfolgt die Erwärmung entlang der geneigten Wände, während die Abkühlung durch die obere Wand erfolgt. Die Studie umfasst ein breites Spektrum von Rayleigh-Zahlen im Bereich von Ra = 100 bis 108 unter der Prandtl-Zahl Pr = 0,71 und dem Längenverhältnis A **= 0,5 und umfasst verschiedene dimensionslose Zeiten von** ÿ **= 0 bis** ÿ **= 5000. Die Forschung beschreibt die verschiedenen Strömungsstrukturen, die sich im Laufe der Zeit innerhalb des Hohlraums entwickeln, und untersucht die Beziehung zwischen Wärmeübertragungsdynamik und Rayleigh-Zahlen.**

Die Analyse hat ergeben, dass sich der Verlauf natürlicher Konvektionsströmungen in drei unterscheidbaren Stadien manifestiert: einem Anfangsstadium, einem Übergangsstadium und einem voll entwickelten Stadium, das auf die plötzliche Anwendung von Heizung durch schräge Wände und Kühlung durch die obere Wand folgt. Diese Studie untersucht die symmetrischen, asymmetrischen und instationären Strömungsmuster, die diese Stadien charakterisieren, unterstützt durch numerische Ergebnisse. Insbesondere konzentriert sich die Untersuchung vor allem auf die Aufklärung der Strömungsmechanismen über alle Stadien hinweg. Es wurde beobachtet, dass natürliche Konvektionsströmungen bei Rayleigh-Zahlen im Bereich von Ra = 100 bis 7 × 103 im symmetrischen Zustand stabil bleiben . **Über Ra > 7 × 103 weisen Strömungen Asymmetrie auf. Darüber hinaus geht die Strömung während des asymmetrischen Zustands in ein instationäres Regime im** Übergangsst **Diese Studie zeigt, dass sich periodische instationäre Strömungen während der Übergangsphase zu chaotischen Zuständen entwickeln und im entwickelten Stadium bei Ra = 5 × 107** wieder zu periodischem , Verhalten zurückkehren , **während bei höheren Rayleigh- , der chaotische Fluss bleibt vorherrschend in Zahlen wie Ra = 108 der instationäre Zustand eintritt.**

Darüber hinaus werden in der Untersuchung die bemerkenswerten Bifurkationen erörtert, die in den vollständig entwickelten Zuständen beobachtet werden. Detaillierte Analysen, einschließlich der Leistungsspektraldichte und der Bühnenraumtrajektorien für Pr = 0,71, werden bereitgestellt. Numerische Studien verdeutlichen die Feinheiten der Wärmeübertragung und zeigen den Einfluss der Rayleigh-Zahl sowohl auf die Nusselt-Zahl als auch auf die Strömungsgeschwindigkeitsdynamik.

Machine Translated by Google

Beiträge der Autoren: Konzeptualisierung, SB und SCS; Untersuchung, LRR; Methodik, LRR; Projektverwaltung, SCS; Software, LRR; Überwachung, SB und SCS; Validierung, LRR; Schreiben – Originalentwurf, SB und LRR; Schreiben – Überprüfung und Bearbeitung, FX und SCS Alle Autoren haben habe die veröffentlichte Version des Manuskripts gelesen und stimme ihr zu.

Finanzierung: Diese Forschung erhielt keine externe Finanzierung.

Datenverfügbarkeitserklärung: In dieser Studie werden keine Daten verwendet. Einsatz künstlicher Intelligenz: Während der Bei der Vorbereitung dieser Arbeit haben wir ChatGPT verwendet, um die Sprache und Lesbarkeit zu verbessern.

Interessenkonflikte: Die Autoren erklären, dass keine Interessenkonflikte vorliegen.

Nomenklatur

ÿ **Temperaturleitfähigkeit**
ÿ **dimensionslose Zeit**
ÿÿ **dimensionsloser Zeitschritt**
dimensionslose Temperatur
ÿ **kinematische Viskosität**
Dichte
ÿ ÿ **Wärmeausdehnungskoeffizient**
Ein **Seitenverhältnis**
G **Erdbeschleunigung**
Gr Grashof Nummer
M **halbe Länge der Höhle**
H **Höhe des Hohlraums**
k **Wärmeleitfähigkeit**
m **schräge Wandlänge**
N **dimensionslose Koordinate senkrecht zur geneigten Wand**
In **dimensionslose Länge der geneigten Wand**
Nu Nusselt Nummer
P **Druck**
P **dimensionsloser Druck**
Pr Prandtl-Zahl
Ra Rayleigh-Zahl
Rac kritische Rayleighzahl für den Bruch des symmetrischen Zustands
T **Dimensionstemperatur**
T0 Anfangstemperatur
Tc **kalte Oberwandtemperatur**
Das **Temperatur der heißen geneigten Wand**
T **Zeit**
ÿT **Temperaturdifferenz**
U-, V- **Geschwindigkeitskomponenten**
u, v **die dimensionslosen Geschwindigkeitskomponenten**
X-, Y- **Koordinaten in horizontaler und vertikaler**
x, y **die dimensionslosen Koordinaten in horizontaler und vertikaler**

Verweise

1. **Gill, E. Das Grenzschichtregime für Konvektion in einem rechteckigen Hohlraum.** J. Fluid Mech. **1966,** 26, **515–536.** [CrossRef]
2. **Prandtl, L.** Essentials of Fluid Dynamics; **Blackie: London, UK, 1952; S. 422–425.**
3. **Ravi, MRR; Henkes, RAWM; Hoogendoorn, CJ Über die Struktur der stationären laminaren natürlichen Konvektion mit hohen Rayleighzahlen Strömung in einem quadratischen Gehäuse.** J. Fluid Mech. **1994,** 262, **325–351.** [CrossRef]
4. **Xu, F.; Patterson, JC; Lei, C. Eine experimentelle Untersuchung des instationären thermischen Flusses um eine dünne Rippe an einer Seitenwand eines differentiell beheizter Hohlraum.** Int. J. Heat Fluid Flow **2008,** 29, **1139–1153.** [CrossRef]
5. **Cui, H.; Xu, F.; Saha, SC Übergang zu instationärem natürlichem Konvektionsfluss in einem prismatischen Gehäuse mit dreieckigem Querschnitt.** Int. J. Therm. Sci. **2017, 111 , 330–339.**
6. **Saha, SC; Khan, MMK Eine Übersicht über natürliche Konvektion und Wärmeübertragung in dachbodenförmigen Räumen.** Energy Build. **2011,** 43, **2564–2571.** [Querverweis]
7. **Cui, H.; An, H.; Wang, W.; Han, Z.; Hu, B.; Xu, F.; Liu, Q.; Saha, SC Numerische Untersuchung von Mischkonvektion und Wärmeübertragung in Bogenförmiger Hohlraum mit inneren Wärmequellen.** Appl. Sci. **2023,** 13, **1029.** [CrossRef]

Machine Translated by Google

8. **Chuhan, IS; Li, J.; Guo, Z.; Yaqub, M.; Manan, MA Wärmeübertragungsuntersuchung in plusförmigen Gehäusen unter Verwendung des Potenzgesetzes Fluid: Ein Finite-Elemente-Ansatz.** Appl. Sci. **2023,** 13, **11042.** [CrossRef]
9. **Sarangi, A.; Sarangi, A.; Sahoo, SS; Mallik, RK; Awad, MM Konjugierte Strahlungs- und Konvektionswärmeübertragungsanalyse in Solarkocher-Hohlraum unter Verwendung eines rechnergestützten Ansatzes.** Energies **2023,** 16, **3868.** [CrossRef]
10. **Gebhart, B.; Jaluria, Y.; Mahajan, RL; Sammakia, B.** Auftriebsinduzierte Strömungen und Transport; **Hemisphäre: Washington, DC, USA, 1988.**
11. **Manneville, P. Rayleigh-Bénard- Konvektion, dreißig Jahre experimentelle, theoretische und modellierende Arbeit, Dynamik räumlich- zeitlicher Zellstrukturen. In** Dynamics of Spatio-Temporal Cellular Structures: Henri Bénard Centenary Review; **Springer: New York, NY, USA, 2006; Band 207, S. 41–65.**
12. **Bodenschatz, E.; Pesch, W.; Ahlers, G. Recent developments in Rayleigh Benard convection.** Annu. Rev. Fluid Mech. **2000,** 32, **709–778.** [CrossRef]
13. **Sparrow, EM; Husar, RB Längswirbel in natürlicher Konvektionsströmung auf geneigten Platten.** J. Fluid Mech. **1969,** 37, **251–255.** [Querverweis]
14. **Batchelor, GK Wärmeübertragung durch freie Konvektion über einen geschlossenen Hohlraum zwischen vertikalen Grenzen bei unterschiedlichen Temperaturen.** Q. Appl. Math. **1954,** 12, **209–233.** [CrossRef]
15. **Eckert, ERG; Carlson, WO Natürliche Konvektion in einer Luftschicht zwischen zwei vertikalen Platten mit unterschiedlichen Temperaturen.** Int. J. Heat Mass Transf. **1961, 2, 106–120.** [CrossRef]
16. **Elder, JW Laminare freie Konvektion in einem vertikalen Schlitz.** J. Fluid Mech. **1965,** 23, **77–98.** [CrossRef]
17. **Xu, F.; Patterson, JC; Lei, C. Eine experimentelle Untersuchung der gekoppelten thermischen Grenzschichten neben einer Trennwand in einem Differenziell beheizter Hohlraum.** Exp. Therm. Fluid Sci. **2014,** 54, **12–21.** [CrossRef]
18. **Xu, F.; Patterson, JC; Lei, C. Vorübergehende natürliche Konvektion fließt um eine dünne Lamelle an der Seitenwand einer unterschiedlich beheizten Kavität.** J. Fluid Mech. **2009,** 639, **261–290.** [CrossRef]
19. **Patterson, JC; Imberger, J. Instationäre natürliche Konvektion in einem rechteckigen Hohlraum.** J. Fluid Mech. **1980,** 100, **65–86.** [CrossRef]
20. **Patterson, JC; Armfield, SW Transiente Eigenschaften natürlicher Konvektion in einer Kavität.** J. Fluid Mech. **1990,** 219, **469–497.** [CrossRef]
21. **De, AK; Eswaran, V.; Mishra, PK Skalierung von Wärmetransport und Energiespektren der turbulenten Rayleigh-Bénard- Konvektion in einem Box mit großem Seitenverhältnis.** Int. J. Heat Fluid Flow **2017,** 67, **111–124.** [CrossRef]
22. **Rahaman, MM; Bhowmick, S.; Mondal, RN; Saha, SC Instationäre natürliche Konvektion in einem anfänglich geschichteten, luftgefüllten von unten beheiztes Gehäuse.** Processes **2022,** 10, **1383.** [CrossRef]
23. **Rahaman, MM; Bhowmick, S.; Mondal, RN; Saha, SC Eine computergestützte Untersuchung chaotischer Strömung und Wärmeübertragung in einem trapezförmigen Hohlraum.** Energies **2023,** 16, **5031.** [CrossRef]
24. **Princevac, M.; Fernando, HJS Morgendliches Aufbrechen von Kältebecken in komplexem Gelände.** J. Fluid Mech. **2008,** 616, **99–109.** [CrossRef]
25. **Asan, H.; Namli, L. Laminare natürliche Konvektion in einem Schrägdach mit dreieckigem Querschnitt: Randbedingungen an einem Sommertag.** Energiebau. **2000,** 33, **69–73.** [CrossRef]
26. **Asan, H.; Namli, L. Numerische Simulation der Auftriebsströmung in einem Dach mit dreieckigem Querschnitt unter Wintertag-Randbedingungen .** Energy Build. **2001,** 33, **753–757.** [CrossRef]
27. **Salmun, H. Konvektionsmuster in einem dreieckigen Bereich.** Int. J. Heat Mass Transf. **1995,** 38, **351–362.** [CrossRef]
28. **Salmun, H. Die Stabilität einer Einzelzell-Steady-State-Lösung in einem dreieckigen Gehäuse.** Int. J. Heat Mass Transf. **1995,** 18, **363–369.** [Querverweis]
29. **Poulikakos, D.; Bejan, A. Die Fluiddynamik eines Dachbodens.** J. Fluid Mech. **1983,** 131, **251–269.** [CrossRef]
30. **Poulikakos, D.; Bejan, A. Natürliche Konvektionsexperimente in einem dreieckigen Gehäuse.** J. Heat Transf. **1983,** 105, **652–655.** [CrossRef]
31. **Flack, RD Die experimentelle Messung der natürlichen Konvektionswärmeübertragung in dreieckigen Räumen, die von unten.** J. Heat Transf. **1980,** 102, **770–772.** [CrossRef]
32. **Holtzman, GA; Hill, RW; Ball, KS Laminare natürliche Konvektion in gleichschenkligen Dreiecksräumen, die von unten beheizt werden und symmetrisch von oben gekühlt.** J. Heat Transf. **2000,** 122, **485–491.** [CrossRef]
33. **Lei, C.; Armfield, SW; Patterson, JC Instationäre natürliche Konvektion in einem wassergefüllten, von unten beheizten gleichschenkligen Dreiecksraum.** Int. J. Heat Mass Transf. **2008,** 51, **2637–2650.** [CrossRef]
34. **Saha, SC; Lei, C.; Patterson, JC Natürliche Konvektion in einem dreieckigen Gehäuse, das periodischen thermischen Einflüssen ausgesetzt ist. In Proceedings der 13. Internationalen Wärmeübertragungskonferenz, Sydney, Australien, 13.–18. August 2006.**
35. **Saha, SC; Lei, C.; Patterson, JC Einfluss des Seitenverhältnisses auf die natürliche Konvektion in Dachböden, die periodischen thermischen Einflüssen ausgesetzt sind.** Anziam J **2007,** 48, **C618–C632.** [CrossRef]
36. **Saha, SC; Patterson, JC; Lei, C. Natürliche Konvektion in dachbodenförmigen Räumen unter plötzlichen und rampenförmigen Erwärmungsrandbedingungen .** Heat Mass Transf. **2010,** 46, **621–638.** [CrossRef]
37. **Saha, SC; Patterson, JC; Lei, C. Natürliche Konvektion in Dachböden unter den Randbedingungen der Momentankühlung und der Rampenkühlung.** Energiebau. **2010,** 42, **1192–1204.** [CrossRef]
38. **Saha, SC; Patterson, JC; Lei, C. Natürliche Konvektion und Wärmeübertragung in Dachböden, die periodischen thermischen Einflüssen ausgesetzt sind.** International J. Therm. Sci. **2010,** 49 , **1899–1910.**
39. **Lei, C.; Patterson, JC Natürliche Konvektion in einem Seitenarm eines Reservoirs unter Sonneneinstrahlung: Experimentelle Beobachtungen.** Exp. Fluids **2002,** 32, **590–599.** [CrossRef]

Machine Translated by Google

40. Lei, C.; Patterson, JC Instationäre natürliche Konvektion in einem dreieckigen Raum, verursacht durch Strahlungsabsorption. J. Fluid Mech **2002,** 460, **181–209.** [CrossRef]

41. Lei, C.; Patterson, JC Natürliche Konvektion in einem Reservoir-Seitenarm, der der Sonneneinstrahlung ausgesetzt ist: Eine zweidimensionale Simulation. Numer. Heat Transf. **2002,** 42, **13–32.** [CrossRef]

42. Mao, Y.; Lei, C.; Patterson, JC Instationäre natürliche Konvektion in einem dreieckigen Raum, hervorgerufen durch Strahlungsabsorption – eine Neubetrachtung durch verbesserte Skalierungsanalyse. J. Fluid Mech. **2009,** 622, **75–102.** [CrossRef]

43. Mao, Y.; Lei, C.; Patterson, JC Instationäre natürliche Konvektion in Küstennähe durch Oberflächenkühlung. J. Fluid Mech. **2010,** 642, **213–233.** [CrossRef]

44. Mao, Y.; Lei, C.; Patterson, JC Merkmale der Instabilität strahlungsinduzierter natürlicher Konvektion in flachen Küstengewässern. Int J. Therm. Sci. **2010,** 49, **170–181.** [CrossRef]

45. Bednarz, TP; Lei, C.; Patterson, JC Eine numerische Untersuchung der instationären natürlichen Konvektion, die durch iso-flux Oberflächenkühlung induziert wird, Reservoirmodell. Int. J. Heat Mass Transf. **2009,** 52, **56–66.** [CrossRef]

46. Whiteman, CD Breakup von Temperaturinversionen in tiefen Gebirgstälern: Teil I. Beobachtungen. J. Appl. Meteorol. **1982,** 21, **270–289.** [CrossRef]

47. Roach, WT; Brown, R.; Caughey, SJ; Garland, J. Die Physik des Strahlungsnebels: Teil I: Eine Feldstudie. QJR Meteorol. Soc. **1976,** 102, **313–333.**

48. Pilie, RJ; Mack, EJ; Kocmond, WC; Rogers, CW; Eadie, WJ Der Lebenszyklus von Talnebel. Teil I: Mikrometeorologische Eigenschaften. J. Appl. Meteorol. **1975,** 14, **347–363.** [CrossRef]

49. Fuzzi, S.; Facchini, MC Das Po Valley Nebelexperiment 1989, ein Überblick. Tellus **1992,** 44B, **448–468.** [CrossRef]

50. Jiusto, JE; Lala Grieser, JGG Radiation Fog Field Programs Recent Studies; **Publikation Nr. 869; Atmospheric Sciences Research Center, State University of New York (ASRC, SUNY): New York, NY, USA, 1983.**

51. Zihua, L.; Limin, Z.; Qinghong, Z. Die physikalische Struktur des Winternebels im Großraum Chongqing und seine Entstehung Prozess. Acta Meteorol. Sin. **1994, 8, 316–328.**

52. Haiden, T.; Whiteman, CD Katabatische Strömungsmechanismen an einem flachen Hang. J. Appl. Meteorol. **2005,** 44, **113–126.** [CrossRef]

53. Catalano, F.; Cenedese, A. Hochauflösende numerische Modellierung thermisch bedingter Hangwinde in einem Tal mit starker Deckelung. Am. Meteorol. Soc. **2010,** 49, **1859–1880.** [CrossRef]

54. Clark, PA; Hopwood, WP Eindimensionale ortsspezifische Vorhersage von Strahlungsnebel. Teil 1: Modellformulierung und idealisierte Sensitivitätsstudien. Meteorol. Appl. **2001, 8, 279–286.** [CrossRef]

55. Baumbach, G.; Vogt, U. Experimentelle Bestimmung des Einflusses der Berg-Tal-Brise auf die Luftverschmutzung im Umgebung von Freiburg. Atmos. Environ. **1999,** 33, **4019–4027.** [CrossRef]

56. Lehner, M.; Gohm, A. Idealisierte Simulationen des Schadstofftransports am Tag in einem steilen Tal und seine Sensitivität gegenüber thermischen Schichtung und Oberflächenalbedo. Bound.-Layer Meteorol. **2010,** 134, **327–351.** [CrossRef]

57. Liu, H.; Liang, B.; Zhu, F.; Zhang, B.; Sang, J. Wassertank-Experiment zur thermischen Zirkulation durch die Bodenheizung in ein asymmetrisches Tal. Adv. Atmos. Sci. **2004,** 21, **536–546.** [CrossRef]

58. Kenjeres, S. Verbesserung der Wärmeübertragung durch Wandneigung bei turbulenter thermischer Konvektion. Phys. Rev. E **2015,** 92, **053006.** [Querverweis]

59. Kimura, F.; Noguchi, T.; Kitamura, K. Flüssigkeitsströmung und Wärmeübertragung durch natürliche Konvektion um beheizte V-förmige Hohlräume. Mech Ing. J. **2016, 3, 16–00330.** [CrossRef]

60. Bhowmick, S.; Saha, SC; Qiao, M.; Xu, F. Übergang zu einer chaotischen Strömung in einem von unten beheizten V-förmigen dreieckigen Hohlraum . Wärmemassentransf. **2019,** 128, **76–86.** [CrossRef]

61. Bhowmick, S.; Xu, F.; Molla, MM; Saha, SC Chaotische Phänomene der natürlichen Konvektion von Wasser in einem V-förmigen Gehäuse. Int. J. Therm. Sci. **2022,** 176, **107526.** [CrossRef]

62. Bhowmick, S.; Xu, F.; Zhang, X.; Saha, SC Natürliche Konvektion und Wärmeübertragung in einem talförmigen Hohlraum, der mit anfänglich geschichtetem Wasser gefüllt ist. Int. J. Therm. Sci. **2018,** 128, **59–69.** [CrossRef]

63. Patankar, SV Numerische Wärmeübertragung und Flüssigkeitsströmung; **Hemisphere Publishing Corporation: New York, NY, USA, 1980.**

64. Saha, SC Natürliche Konvektion neben einer geneigten flachen Platte und in einem Dachbodenraum unter verschiedenen thermischen Zwangsbedingungen. Doktorarbeit, School of Engineering and Physical Sciences, Townsville, Australien, 2009.

65. Drazin, PG Einführung in die hydrodynamische Stabilität; **Cambridge University Press: Cambridge, UK, 2002.**

66. McLaughlin, JB; Orszag, SA Übergang von periodischer zu chaotischer thermischer Konvektion. J. Fluid Mech. **1982,** 122, **123–142.** [CrossRef]

Haftungsausschluss/Anmerkung des Herausgebers: Die in allen Veröffentlichungen enthaltenen Aussagen, Meinungen und Daten sind ausschließlich die der einzelnen Autoren und Mitwirkenden und nicht die von MDPI und/oder den Herausgebern. MDPI und/oder die Herausgeber lehnen jegliche Verantwortung für Personen- oder Sachschäden ab, die aus den im Inhalt erwähnten Ideen, Methoden, Anweisungen oder Produkten resultieren.

Machine Translated by Google

Berechnung

MDPI

Artikel

Modellierung der Eigenschaften magnetostriktiver Elemente mit Quantenemulatoren

Edvard Karpukhin [1], Alexey Bormotov [1,*] und Luiza Manukyan [2]

[1] Fakultät für Industrielle Technologien, Staatliche Technologische Universität Penza, pr. Baidukova/ul. Gagarina, 1a, 11, 440039 Penza, Russland;

[2] edvar1@rambler.ru Institut für Luft- und Raumfahrttechnik, Nationale Forschungsuniversität Samara, ul. Moskovskoe Highway 34, 443086 Samara, Russland; lu-iza03@mail.ru * Korrespondenz: aleks21618@yandex.ru

Zusammenfassung: Der Artikel befasst sich mit mathematischen und numerischen Methoden zur Modellierung magnetostriktiver multielektronischer Systeme auf der Grundlage einer Kombination aus Quanten- und klassischen Methoden. Die Entwicklung eines Algorithmus, der für die Untersuchung magnetostriktiver Phänomene auf Mikroebene unter Verwendung der klassischen Quantenmethode geeignet ist, die auf einem modernen klassischen Computer implementiert wird, wird begründet. Die Algorithmen und die Struktur des Softwarepakets werden angegeben. Die Eignung der klassischen Quantenmethode wird durch Vergleich der berechneten Ergebnisse der Eigenschaften bekannter magnetostriktiver Materialien mit den tatsächlichen Eigenschaften magnetostriktiver Legierungen üb

Schlagwörter: Quanten-klassische numerische Methoden; Untersuchung magnetostriktiver Phänomene auf der Mikroebene

1. Einleitung

Bei der Modellierung magnetostriktiver Phänomene auf Mikroebene stellt sich das Problem der Lösung der Schrödinger-Gleichung (SE). Derzeit sind viele numerische Methoden zur Lösung dieser Gleichung bekannt [1–10]. Je nach Art des für ihre Implementierung vorgesehenen Computers können alle diese Methoden in klassische und Quantenmethoden unterteilt werden. Klassische Methoden sind für die Implementierung auf klassischen Computern vorgesehen und basieren auf dem klassischen Ansatz zur numerischen Lösung von Differentialgleichungen. Sie ermöglichen die effektive Lösung einer breiten Palette von Aufgaben in akzeptabler Zeit und mit ausreichend hoher Genauigkeit. In vielen Fällen, beispielsweise bei der Modellierung mehratomiger Systeme, führt die Verwendung eines solchen Ansatzes jedoch entweder zu einem übermäßig großen Fehler oder zu einer exponentiell zunehmenden Lösungszeit , die mit der modernen Leistung klassischer Computer inakzeptabel ist [11–19]. In wissenschaftlichen Arbeiten [20–27] werden Modifikationen klassischer Methoden vorgeschlagen, die die Genauigkeit erheblich erhöhen und die Berechnungszeit verkürzen können, aber dieses Problem bleibt weiterhin relevant.

Eine weitere grundlegend neue und sich aktiv entwickelnde Methode zur numerischen Lösung des SE ist die Verwendung von Quantenmethoden [11,12,28–31]. Solche Methoden basieren auf Algorithmen , die für die Ausführung durch Quantencomputer entwickelt wurden, die, wie bekannt ist [23,32–36], für die Lösung solcher Probleme effektiver **sind . Das Hauptproblem bei der Verwendung von Quantencomputern ist der unzureichende Stand der modernen technologischen Entwicklung in dieser Richtung: der Mangel an verfügbaren voll funktionsfähigen Quantencomputern und die geringe Anzahl bekannter effektiver Quantenalgorithmen und wissenschaftlicher Arbeiten in dieser Richtung. Bestehende Quantencomputer -Emulatoren ermöglichen es jedoch, neue quantennumerische Methoden zur Lösung bestimmter Probleme der Modellierung mehratomiger Systeme zu entwickeln und zu testen und die theoretische Möglichkeit der Verwendung dieser Methoden im allgemeinen Fall in der Zukunft zu untermauern, wenn vollwertige Quantencomputer erscheinen [37–41].**

Es ist auch möglich, einen kombinierten Ansatz zur Modellierung von Quantensystemen mit quantenklassischen Methoden unter Verwendung der Ressourcen herkömmlicher Computer und Quantenemulatoren anzuwenden . **Die Algorithmen der quantenklassischen numerischen Methoden (QCNM) s**

check for updates

Zitat: Karpukhin, E.; Bormotov, A.; Manukyan, L. Modellierung der Eigenschaften magnetostriktiver Elemente mithilfe von Quantenemulatoren. Computation **2024,** 12, **147. https://doi.org/ 10.3390/ computation12070147**

Wissenschaftlicher Herausgeber: Rafael Lahoz-Beltra

Empfangen: 7. Mai 2024
Überarbeitet: 24. Juni 2024
Akzeptiert: 26. Juni 2024
Veröffentlicht: 15. Juli 2024

Copyright: © 2024 bei den Autoren. Lizenznehmer MDPI, Basel, Schweiz.

Dieser Artikel ist ein Open Access-Artikel vertrieben unter den Bedingungen und Bedingungen der Creative Commons Namensnennungslizenz (CC BY) (https:// creativecommons.org/licenses/by/ 4.0/).

Machine Translated by Google

Die Ausführung soll auf einem klassischen Computer in einer Softwareumgebung erfolgen, die mit einem Modul für klassisches Computing und einem Modul für die Emulation von Quantencomputern ausgestattet ist, mit der Möglichkeit zum Datenaustausch zwischen ihnen (Abbildung 1).

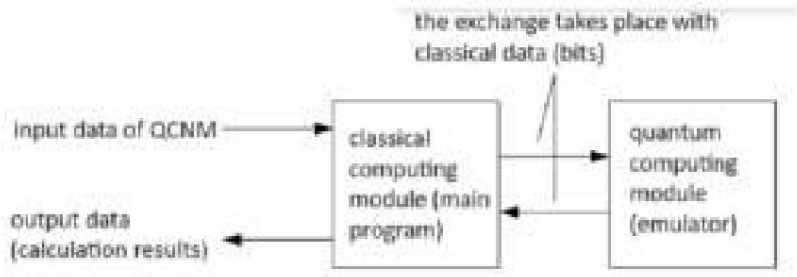


Abbildung 1. Vereinfachte Struktur des Softwarepakets zur Implementierung des QCNM.

Diese Modellierungsmethode ermöglicht es, die nützlichsten Eigenschaften von Quantenalgorithmen, um die Arbeit zu beschleunigen und die Effizienz klassischer Algorithmen zu steigern.

Die Hauptaufgabe dieses Artikels ist die Entwicklung eines QCNM-Algorithmus, der sich für die Untersuchung magnetostriktiver Phänomene durch deren mathematische Modellierung auf Mikroebene mithilfe eines klassischen Computers eignet. Dabei ist zu berücksichtigen, dass die Fähigkeiten eines klassischen Computers zur Implementierung von Quantencomputer- Emulatoren derzeit durch die Menge des Quantenspeichers stark eingeschränkt sind, der maximal etwa 400 Qubits beträgt (bei Verwendung von Cloud-Technologien).

Der vorgeschlagene QCNM-Algorithmus ist als Teil eines Softwarepakets implementiert (Abbildung 1) und mit seiner Hilfe wurde eine Studie magnetostriktiver Phänomene in Ni-Mn-Ga- **Geisler-Legierungen durchgeführt [42–47].**

2. Materialien und Methoden

Atome mit N Elektronen unterscheiden sich vom Wasserstoffatom und wasserstoffähnlichen Systemen. Erstens berücksichtigt der Hamiltonoperator die Beiträge aller N Elektronen zur kinetischen und potentiellen Energie, und in der potentiellen Energie entsteht ein Summand, der die interelektronische Wechselwirkung beschreibt. Zweitens muss die Wellenfunktion dem Pauli-Prinzip gehorchen – sie muss bei der Neuanordnung der Koordinaten eines beliebigen Elektronenpaars antisymmetrisch sein.

Dies führt dazu, dass die Lösung der Schrödinger-Gleichung für mehrelektronische Atome wesentlich komplizierter wird. Sie kann nicht analytisch ermittelt werden und erfordert approximative numerische Lösungsmethoden [13,20,48,49].

Allerdings lassen sich die Eigenschaften multielektronischer Systeme qualitativ recht einfach beschreiben, wenn man sich zunutze macht, dass für das Atom bestimmte Beziehungen bezüglich des Drehimpulses erfüllt sein müssen.

1. **Jeder Zustand des Atoms muss einen bestimmten Wert des Gesamtdrehimpulses haben.**
2. **Das Gesamtmoment aller Elektronen in einem Atom muss den Regeln der Quantisierung gehorchen und räumliche Quantisierung.**
3. **Da der Spin der Elektronen gleichzeitig das Impulsmoment ist, sollte er auch beitragen zum Gesamtmoment des Atoms.**
4. **Die Momente und Spins einzelner Elektronen sollten so kombiniert werden, dass das Gesamtmoment eine beobachtbare Größe bleibt und den Postulaten und Gleichungen der Quantenmechanik gehorcht.**

Der Gesamtmoment ist mit den Momenten einzelner Elektronen verbunden, da jedoch der Moment jedes Elektrons im Raum mehrdeutig ausgerichtet ist (räumliche Quantisierung erlaubt es nicht, alle Projektionen des Vektors eindeutig zu definieren), kann der Gesamtmoment gemäß dem Überlagerungsprinzip eine Kombination aller möglichen Ausrichtungen der Vektoren einzelner Momente werden. Diese Prinzipien wurden bei der Modellierung **multielektronischer Geisler-Legierungen vom** Typ Ni-Mn-Ga **verwendet .**

Machine Translated by Google

Betrachten Sie die Schrödinger-Zeitgleichung:

$$\hat{H}\psi = \psi\, 2m \frac{\partial^2}{\partial \text{Stunden}^2}\psi 2 + U(r, t)\bar{\psi}(r, t) = jh\bar{\psi}t \frac{\partial\psi(r, \bar{t})}{\partial}, \quad (1)$$

wobei Hˆ – der Hamiltonoperator; ψ(r, t), U(r, **t) – die Wellenfunktion und potenzielle Energie eines Teilchens, das sich zu einem Zeitpunkt** t an einem Raumpunkt mit den Koordinaten (x, **y,** z) **und einem Radiusvektor** ψ **2** ψ **2** r = xi + yj + zk befindet ; **ψ** = **Operator; m – die Teilchenmasse;** + ψx **2** ψz **2** ψy **und** $\bar{h} = \frac{h}{2\pi}$ **– der Laplace- die reduzierte Planck-Konstante.**

Die Lösung von Gleichung (1) auf einem Quantencomputer kann mit der Zalka– Wiesner-Methode [15] durchgeführt werden, die auch für mehratomige Systeme anwendbar ist. Das allgemeine Schema der numerischen Lösung des SE mit dieser Methode ist wie folgt: 1. Schreiben Sie die formal exakte Lösung des SE (1) ψ in Form eines Vektors |ψ(t)ψ auf:

$$|\psi(t)\psi = e^{\psi jHt\hat{}} |\psi(0)\psi. \quad (2)$$

2. Setze den Anfangszustand |ψ(0)ψ, den Zeitpunkt tf **oder was auch immer zur Bestimmung der Lösung und des Diskretisierungsschritts** ψt erforderlich ist, **so dass iψt** = tf **für eine Ganzzahl** i. Um **|ψ0ψ** =| ψ(0)ψ **zu akzeptieren , muss** i = **0 sein.**

3. Konstruieren Sie einen Quantenkreis von Uψt in der Form:

$$\mathbf{U\psi t} = \mathbf{IQFTexp}\,\psi\,\psi t\,\mathbf{QFTexp}\,\psi \frac{jj}{2m}\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{h}^2} - V(r)\bar{\psi}t, \mathbf{h}^- \quad (3)$$

wobei V(r) die potentielle Energie eines Quantenteilchensystems und QFT,IQFT die vorwärts- und rückwärtsgerichtete Quanten-Fourier-Transformation sind.

4. Der Beginn des iterativen Prozesses.

5. In einem Iterationsschritt wird der Wert |ψi+1ψ = **Uψt** |ψiψ **berechnet und der Zähler** i **ist um eins erhöht.**

6. Der iterative Prozess endet, wenn die Bedingung iψt ψ tf **erfüllt ist. Das Ergebnis wird zurückgegeben zu** ψ tf =|ψiψ.

Dieser Algorithmus wird auf einem Quantencomputer in polynomialer Zeit ausgeführt, ist der vielseitigste und eignet sich für die Modellierung einer breiten Palette von Quantensystemen, einschließlich magnetostriktiver Phänomene. Das Ergebnis wird mit einem Fehler erhalten, dessen Wert aus der Schätzung entnommen werden kann:

$$\text{tf } e^{\psi jHt\hat{}} f\,\psi(0)\,\psi \frac{\partial^2}{\partial}\psi\, 1\,\psi\,\psi. \quad (4)$$

Die Zalka-Wesner-Methode kann ohne Modifikationen auf einem klassischen Computer mit dem in Abbildung 1 gezeigten Softwarepaket implementiert werden , **eignet sich jedoch nur für die Modellierung eines Quantensystems mit einer kleinen Anzahl von Teilchen. Um die Effizienz zu erhöhen, wird vorgeschlagen, das QCNM auf Grundlage der Trotter-Suzuki-Transformation [24,50–52] zu verwenden,** die **durch die folgenden rekursiven Formeln ausgedrückt werden kann :**

$$\prod_{\text{ich} = 1}^{M} t^{\psi jHi\, t/2n\,\psi} e^{\sum_{i=m}^{1} \psi jHi\, t/2n} = e^{N\ \psi jHt} + O\left(\frac{m3\, t^3}{2n}\right) = U2(t), \quad (5)$$

$$U2k(t) = \mathbf{[U2k\psi2(sk}\, t)]2U2k\psi2([1\,\psi\, 4sk\,]t)[U2k\psi2(sk\, t)]2 == e^{\psi jHt} + O\left(\frac{(mt)^{2K+1}}{2n}\right), \text{sk} = \mathbf{4}\,\psi\,\mathbf{4}\, 1/(2k\psi1)^{\psi 1}.$$

Die Verwendung dieser Transformation ermöglicht es, die Genauigkeit der Näherung mit denselben Rechenressourcen zu erhöhen. Die Wirksamkeit der Trotter-Suzuki- Methode kann anhand der Abbildung in Abbildung 2 klar und einfach demonstriert werden. Wenn wir bedingt annehmen, dass der Quantenalgorithmus von Zustand 1 zu Zustand 2 wechseln muss und die Längen der Seiten des Dreiecks A, B und U2k(t)

Machine Translated by Google

Quellen, die für diesen Übergang benötigt werden, dann ist der kürzeste Weg U2k(t), **eine Trotter-Suzuki- Transformation der Ordnung** 2k.

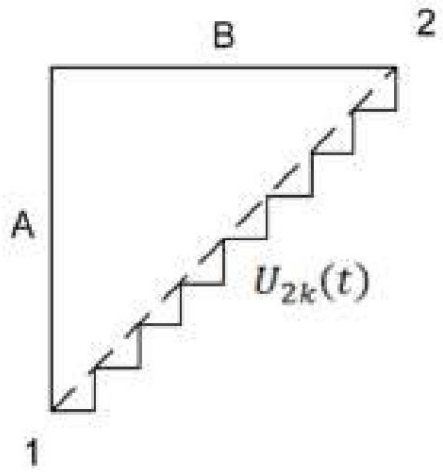


Abbildung 2. Das Funktionsprinzip der Trotter-Suzuki-Transformation.

Ein wichtiger Punkt bei der Implementierung des vorgeschlagenen QCNM ist die Verwendung der Quanten-Fourier-Transformation (QFT). Die Besonderheit der QFT im Vergleich zur üblichen Fourier-Transformation besteht darin, dass sie die Transformation selbst nicht beschleunigt, sondern eine effizientere Suche nach Anfangsnäherungen für die Eigenwerte unitärer Operatoren ermöglicht, die für andere numerische Methoden benötigt werden.

In einer Orthonormalbasis | 0ÿ, · | N ÿ 1ÿ Q QFT ist ein linearer Operator, der wie folgt funktioniert [14]:

$$| x\ddot{y} \ddot{y} \frac{1}{\ddot{y} N} \ddot{y}_{k=0}^{N \ddot{y} 1} e \ddot{y}2\ddot{y}jkx/N| k\ddot{y}. \quad (6)$$

Oder wenn Sie N = **2** akzeptieren[N.] **wobei n eine ganze Zahl ist und der Zustand | xÿ als Binärzahl x** = x1x2 . . . xn (6) dargestellt wird, können Sie es in eine für praktische **Zwecke bequemere Form umschreiben :**

$$| x\ddot{y} = | x1x2 \ldots xn\ddot{y} \ddot{y} \frac{(| 0\ddot{y} + e \ddot{y}2\ddot{y}j0.xn | 1\ddot{y}) | 0\ddot{y} + e^{\ddot{y}2\ddot{y}j0.xn\ddot{y}1 x_n} | 1\ddot{y} \ldots (| 0\ddot{y} + e \ddot{y}2\ddot{y}j0.x1\,x2 \ldots xn | 1\ddot{y})}{2^{n/2}}, \quad (7)$$

wobei die Notation vom Typ 0.x1x2 . . . xn **einen binären Bruch x1** bezeichnet $\frac{x1}{2} + \frac{x2}{4} + \ldots \frac{xn}{2^n}$.

Die Darstellung (7) erlaubt die Konstruktion eines einfachen Quantenschemas zur Berechnung der QFT basierend auf Quantengattern von Hadamard H und kontrollierten Phasenverschiebungen Rk = $R\ddot{y}$ **bei** $\ddot{y} = \frac{1\ddot{y}k}{\ddot{y}2}$ **, wie in Abbildung 3 dargestellt.**

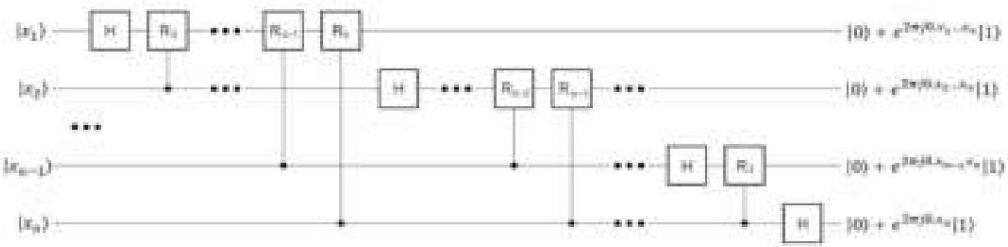


Abbildung 3. Ein Quantenschema zur Berechnung der QFT.

Um Studien zu magnetostriktiven Phänomenen auf Mikroebene durchzuführen, wurde daher das vorgeschlagene QCNM verwendet, das auf der modifizierten Zalka-Wesner-Methode basiert, die dank der Quantensimulation der Trotter-Suzuki- Transformation und der QFT auf einem klassischen Computer implementiert werden kann.

Machine Translated by Google

Die Implementierung des Softwarepakets zur Durchführung von Forschungen gemäß dem vorgeschlagenen Algorithmus erfolgte in der MS Visual Studio-Umgebung unter Verwendung der Programmiersprachen C# für das klassische Computermodul und Q# für das Quantenemulatormodul (siehe Abbildung 1). Das Schema des Algorithmus des klassischen Computermoduls ist in Abbildung 4 dargestellt.

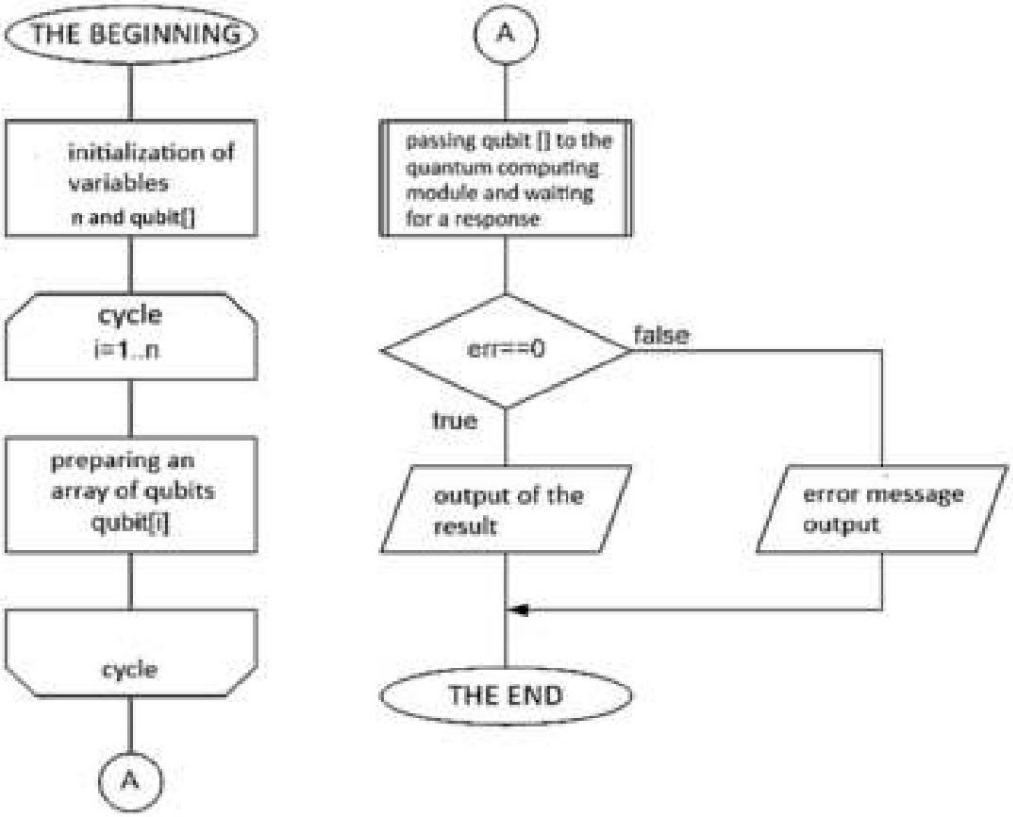


Abbildung 4. Das Schema des Algorithmus des klassischen Computermoduls.

Das klassische Computermodul ist das Hauptmodul des Programms und seine Aufgabe besteht darin, das QCNM zu verwalten, d. h. die Ausgangsdaten vorzubereiten, sie an das Quantenemulatormodul zu übertragen und die erhaltenen Ergebnisse zu verarbeiten. In der Anfangsphase des Modulalgorithmus wird ein Array von Qubits [i] der Länge n initialisiert, das für die Modellierung des betreffenden Quantensystems erforderlich ist . Anschließend werden die Elemente dieses Arrays je nach Art des Hamiltonoperators Hˆ von SE (1) vorbereitet und an das Quantencomputermodul zur Simulation auf einem Quantenemulator übertragen. Nach Erhalt einer Antwort werden, sofern kein Fehlerflag vorhanden ist, Ausgabedaten au

Das Schema des Algorithmus des Quantencomputermoduls ist in Abbildung 5 dargestellt.

In der Anfangsphase konvertiert dieses Modul das resultierende Qubit-Array in die entsprechende Hamilton-Matrix und simuliert seine Quantenentwicklung mithilfe der vorgeschlagenen modifizierten Zalka-Wiesner-Methode. Gleichzeitig ist es zur Emulation von Quantenoperationen möglich, integrierte Operationen der Q#-Sprache zu verwenden, wie z. B. Exp – zur Berechnung des Matrixexponenten, DcomposedIntoTimeStepsCA – zur **Durchführung eines einzelnen Schritts in der Entwicklung des Hamilton-Operators usw. [12,53,54]. Der Hauptteil des Quantenmodulalgorithmus ist der iterative Prozess des Aufrufs des Trotter-Suzuki-Transformationsverfahrens gemäß Ausdruck (5). In diesem Fall wird der QFT-Algorithmus verwendet, der auf den Formeln (6) und (7) basiert und gemäß dem Schema in Abbildung 3 implementiert ist. Nach Abschluss des iterativen Prozesses wird ein Array „Ergebnis“ gebildet,** das die numerischen Daten der Simulation und die Variable „err“ enthält, die im **Falle von Fehlern im Betrieb des Moduls 1** und in deren Abwesenheit 0 ist. **Diese Daten werden zur Ve**

Machine Translated by Google

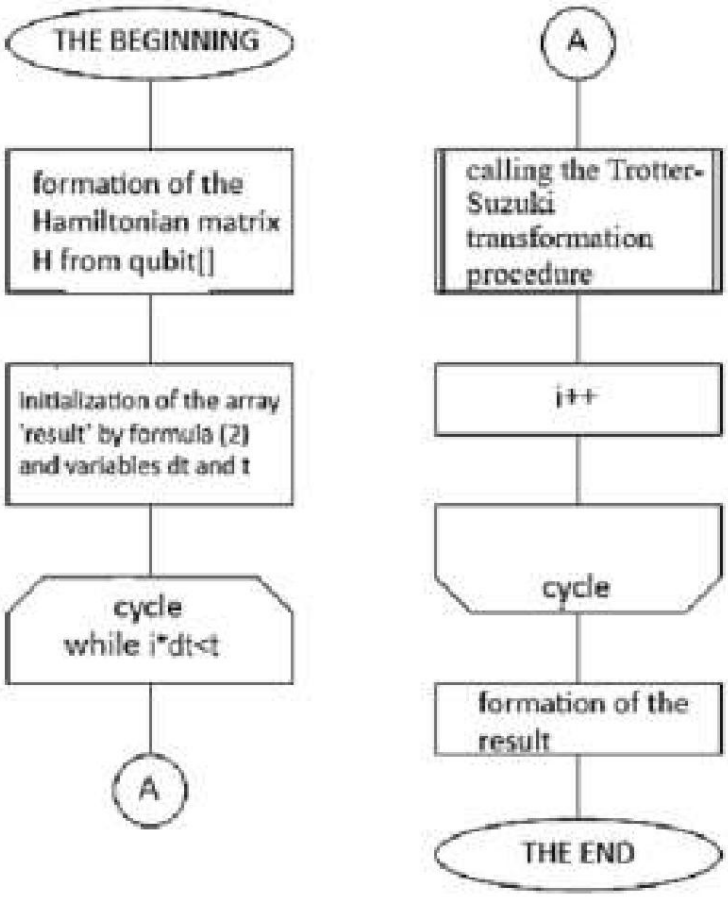


Abbildung 5. Das Schema des Algorithmus des Quantencomputermoduls.

3. Ergebnisse

Mithilfe des entwickelten Softwarepakets, das den Algorithmus des vorgeschlagenen QCNM implementiert, haben wir eine magnetostriktive Geisler-Legierung vom Typ Ni-Mn-Ga untersucht , **deren Kristallgitterstruktur in Abbildung 6 dargestellt ist. Wenn das betreffende Materieatom Elektronen enthält, muss der Einfluss jedes einzelnen von ihnen auf die gesamte kinetische und potenzielle Energie sowie die interelektronische Wechselwirkung** zwischen ihnen berücksichtigt werden. Der Hamiltonoperator der SE (1) für eine solche Legierung **kann , wie bekannt ist [42,53–57], in der Born-Oppenheimer-Näherung wie folgt geschrieben werden:**

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \left(-\frac{\hbar^2}{2m_i}\nabla_i^2 \right) + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1,(j\neq i)}^{N} \frac{ke^2}{|r_i - r_j|}, \quad (8)$$

wobei mi die Masse des i-Teilchens, h¯die reduzierte Planck-Konstante, Z die Gesamtladung des Atoms, e die Ladung des Elektrons, k der Proportionalitätskoeffizient im Coulombschen Gesetz und ri die Radiusvektoren der Elektronen sind.

Durch die Modellierung des durch den Hamiltonoperator (8) beschriebenen Mikropartikelsystems unter Verwendung des QCNM-Algorithmus auf einem klassischen Computer wurden numerische Daten seiner Energieeigenschaften erhalten. Bei der Untersuchung magnetostriktiver Phänomene sind die Werte möglicher magnetostriktiver Deformationen eines Materials in Abhängigkeit von seiner Struktur, Temperatur, dem Vorhandensein eines äußeren Magnetfelds usw. von größtem Interesse. Auf Grundlage der erhaltenen numerischen Daten wurden unter Verwendung einer bekannten Technik, die beispielsweise in [42] beschrieben wird, Graphen einiger dieser Abhängigkeiten erstellt. Abbildung 7 zeigt Graphen der Abhängigkeit magnetostriktiver Deformationen ei **vom Elastizitätsmodul** a **(Abbildung 7a) und der Temperatur** t **(Abbildung 7b), wenn sich di**

Machine Translated by Google

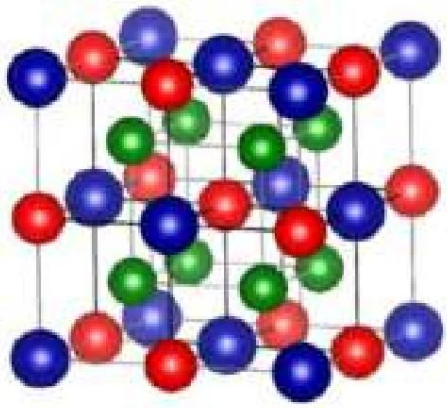


Abbildung 6. Die Kristallgitterzelle der Ni-Mn-Ga- **Legierung [42].**

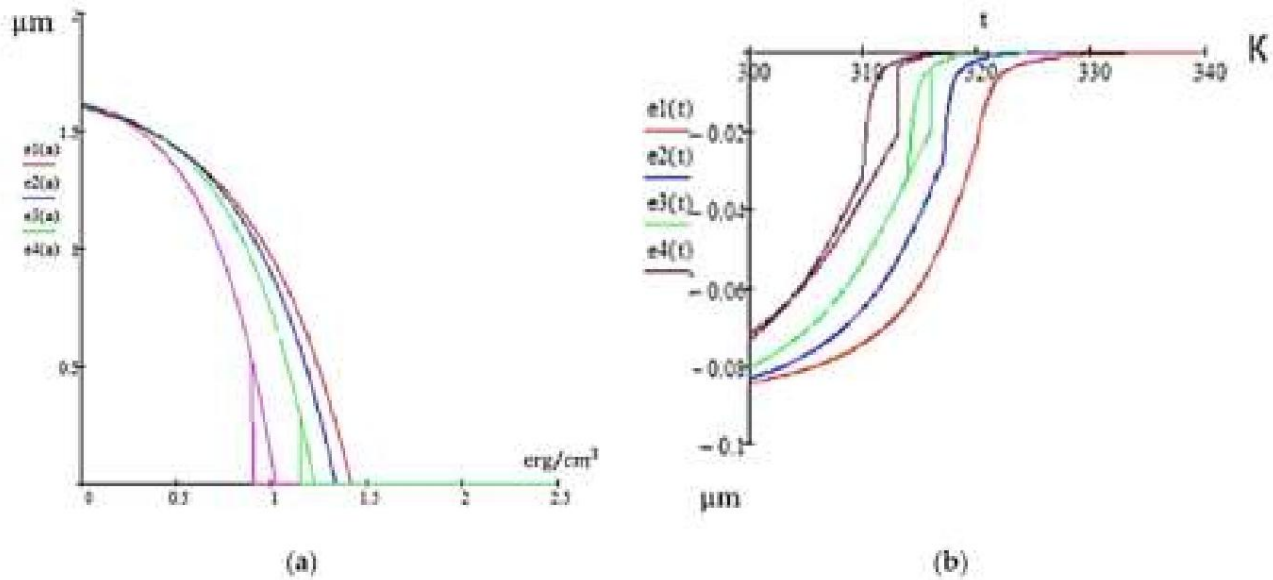


Abbildung 7. Abhängigkeitsdiagramme magnetostriktiver Verformungen einer Ni-Mn-Ga- **Legierung bei konstanten Magnetfeldern von 5, 14, 25 und 30 T. (a) Diagramme der Abhängigkeit magnetostriktiver Verformungen vom Elastizitätsmodul; (b) Diagramme der Abhängigkeit magnetostriktiver Verformungen von der Temperatur .**

Die in Abbildung 7 dargestellten **Temperatur- und Elastizitätsabhängigkeiten von Verformungen bei konstanten Magnetfeldern von 5, 14, 25 und 30 T zeigen, dass die Hysteresebreite mit zunehmendem Wert des äußeren Felds abnimmt und in einem Feld mit einem Induktionswert von mehr als 25 T die Hysterese verschwindet. Ein Vergleich der Diagramme in Abbildung 7 mit den bekannten Ergebnissen der Modellierung von** Ni-Mn-Ga- **Legierungen und experimentellen Daten mit ähnlichen Eigenschaften in Abbildung 8 zeigt Abweichungen von nicht mehr als 5 % bei der Modellierung der Abhängigkeit der Verformung vom Elastizitätsmodul und von nicht mehr als 7 % bei der Konstruktion ihrer Abhängigkeit von der Temperatur, an den Randpunkten der Hystereseschleife oder an den Wendepunkten der Diagramme, in deren Abwesenheit. Dies weist auf die Richtigkeit des QCNM- Algorithmus bei der**

Machine Translated by Google

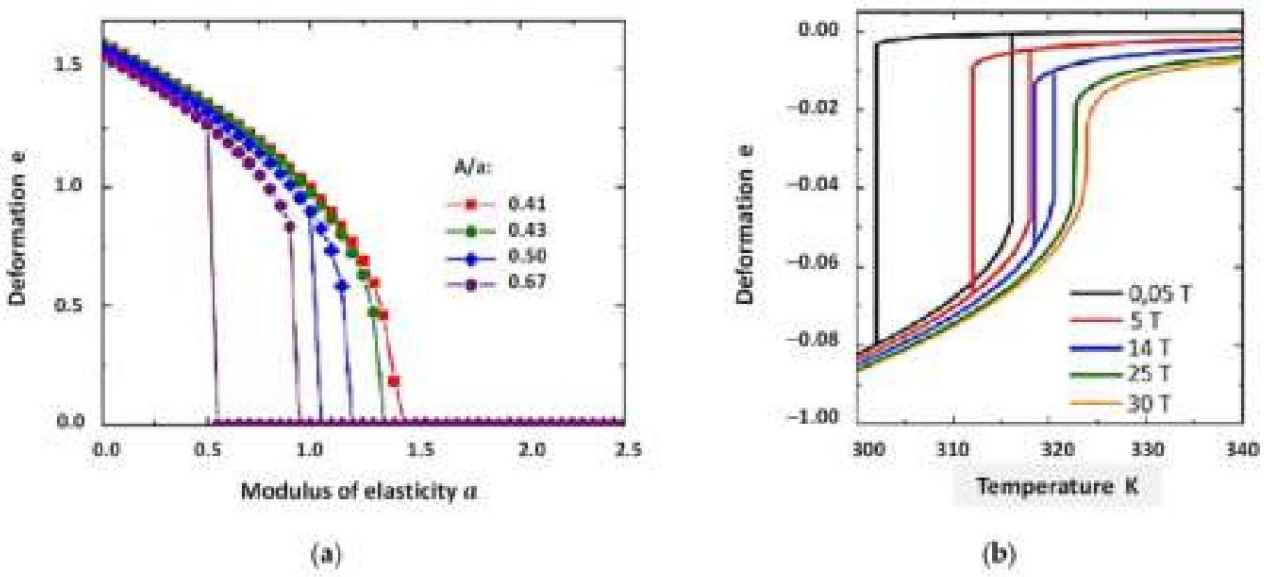


Abbildung 8. Experimentelle Eigenschaften magnetostriktiver Deformationen einer Ni-Mn-Ga-**Legierung [42–47]. (a) Diagramme der Abhängigkeit magnetostriktiver Deformationen vom Elastizitätsmodul; (b) Diagramme der Abhängigkeit magnetostriktiver Deformationen von der Temperatur.**

4. Schlussfolgerungen

Im Rahmen der Studie wurde ein QCNM-Algorithmus entwickelt , der für die Modellierung polyatomarer Systeme, einschließlich magnetostriktiver Phänomene, auf Mikroebene geeignet ist und für die Modellierung der magnetostriktiven Eigenschaften geeignet ist [58–61]. Der zur Lösung des Problems verwendete Ansatz ist der effektivste, da er es ermöglicht, die Fähigkeiten moderner numerischer Methoden zu kombinieren und sie mit den Vorteilen von Quantenmethoden zu ergänzen.

Der vorgeschlagene QCNM-Algorithmus basiert auf einer Modifikation der Zalka-Wesner-Methode zur Lösung der Schrödinger-Gleichung unter Verwendung der Trotter-Suzuki-Transformation und der auf einem Quantenemulator implementierten Quanten-Fourier-Transformation.

Bei der Untersuchung magnetostriktiver Phänomene in Ni-Mn-Ga- **Geisler-Legierungen mithilfe des entwickelten Softwarepakets wurden ähnliche Ergebnisse wie die bekannten experimentellen Ergebnisse erzielt, was die Richtigkeit des Algorithmus des vorgeschlagenen QCNM be**

Beiträge der Autoren: Konzeptualisierung, AB und EK; Methodik, AB und EK; Software, AB und EK; Validierung, AB und EK; formale Analyse, AB und EK; Untersuchung, AB und EK; Ressourcen, AB, EK und LM; Datenkuratierung, AB und EK; Schreiben – Vorbereitung des Originalentwurfs, AB, EK und LM; Schreiben – Überprüfung und Bearbeitung, AB, EK und LM; Visualisierung, AB und EK; Überwachung, AB; Projektverwaltung, AB und LM; Mittelbeschaffung, AB. Alle Autoren haben die veröffentlichte Version des Manuskripts gelesen und stimmen ihr zu.

Finanzierung: Die Forschung wurde mit einem Stipendium der Russian Science Foundation (Projekt Nr. 23-29-00207) durchgeführt, https://rscf.ru/project/23-29-00207/ (abgerufen am 13. Februar 2023).

Erklärung zur Datenverfügbarkeit: Die Rohdaten können derzeit nicht weitergegeben werden, da die Daten auch Teil einer laufenden Studie sind.

Interessenkonflikte: Die Autoren erklären, dass keine Interessenkonflikte vorliegen.

Verweise

1. **Barabanov, AL** Quantenmechanik; **MIPT: Dolgoprudny, Russland, 2015; 97p.**
2. **Kashurnikov, VA; Krasavin, AV** Computergestützte Methoden in der Quantenphysik; **MEPHI: Moskau, Russland, 2005; 412 S.**
3. **Linev, AV-** Technik zur Lösung der nichtstationären Schrödinger-Gleichung unter Verwendung einer parallelen Version der Runge-Kutta-Methode; **Linev, AV, Satanin, AM, Hrsg.; Staatliche Universität Nischni Nowgorod: Nischni Nowgorod, Russland, 2014; 89p.**

Machine Translated by Google

4. **Serov, VV** Numerische Methoden zur Lösung quantenmechanischer Probleme; **Staatliche Universität Saratow: Saratow, Russland, 2008; 39 S.**
5. **Chuluunbaatar, O. Mehrschichtschemata für die numerische Lösung der instationären Schrödinger-Gleichung durch die Finite-Elemente-Methode.** Stier. RUDN Mathe. Ser. Berechnen. Wissenschaft. Physik. **2008, 69–84. Online verfügbar : https://cyberleninka.ru/article/n/mnogosloynye-shemy-dlya-chislennogo-resheniya-nestatsionarnogo-uravneniya-shryodingera-metodom-konechnyh-elementov/viewer (abgerufen am 6. Mai 2024).**
6. **Liu, Y.; Ran, M.; Zhang, L. Hamilton-erhaltende Schemata für die zweidimensionalen fraktionalen nichtlinearen Schrödinger-Wellengleichungen .** Comput. Math. Appl. **2023,** 150, **54–69.** [CrossRef]
7. **Zhang, Q.; Duan, J. Problem der Nebenbedingungsminimierung der nichtlinearen Schrödingergleichung mit dem Anderson-Hamiltonoperator.** Math. Anal. Appl. **2024,** 538, **128360.** [CrossRef]
8. **Chen, YP; Wei, EI; Jiang, L.; Meng, M.; Wu, YM; Chew, WC Eine vereinheitlichte Hamilton-Lösung für Maxwell-Schrödinger-Gleichungen zur Modellierung der Wechselwirkung zwischen elektromagnetischen Feldern und Teilchen.** Comput. Phys. Commun. **2017,** 215, **63–70.** [CrossRef]
9. **Lorin, E.; Yang, X. Quasi-optimale Domänenzerlegungsmethode für die auf neuronalen Netzwerken basierende Berechnung der zeitabhängigen Schrödingergleichung.** Comput. Phys. Commun. **2024,** 299, **109129.** [CrossRef]
10. **Gabrick, EC; Sayari, E.; de Castro, ASM; Trobia, J.; Batista, AM; Lenzi, EK Bruchgleichung von Schrödinger und Zeit abhängige Potentiale.** Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul. **2023,** 123, **107275.** [CrossRef]
11. **Ignatov, SK** Quantenchemie. Quantenmechanik und die Struktur des Atoms; **Staatliche Universität Nischni Nowgorod: Nischni Nowgorod, Russland, 2015; 113 S.**
12. **Kaiser, S.; Granad, K.** Studie Quantencomputing in Python und Q#; **DMK Press: Moskau, Russland, 2021; 430 S.**
13. **Karpukhin, EV; Bormotov, AN Numerische Methoden zur Berechnung magnetischer Felder von Magnetostriktionspegelwandlern EDP Sciences. In Proceedings der International Scientific and Practical Conference „Environmental Risks and Safety in Mechanical Engineering“ (ERSME-2023), Rostow am Don, Russland, 1.–3. März 2023; Band 376, S. 01101.** [CrossRef]
14. **Bormotov, AN; Orlov, DI; Khnyreva, ES; Bratkova, ME Erfahrungen in der Anwendung des Algorithmus zum Entladen eines Schwungradmotors mit magnetischen Aktuatoren zur Stabilisierung des Fernerkundungssatelliten Aist-2D.** Mod. Probl. Remote Sens. Earth Space **2023,** 20, **157–164.**
15. **Li, Z.; Ye, J.; Wang, Y.; Liu, L.; Shi, Y.; Li, Y.; Ye, J. Eine neuartige mikromechanische Methode zur nichtlinearen Analyse magnetostriktiver Verbundwerkstoffe.** Compos. Struct. **2023,** 311, **116633.** [CrossRef]
16. **Chen, L.; Zhu, Y.; Ling, J.; Zhang, M. Temperaturabhängigkeitsmodellierung und experimentelle Bewertung eines mehrdimensionalen diskreten magnetostriktiven Aktuators.** Appl. Therm. Eng. **2023,** 230, **120736.** [CrossRef]
17. **Mizukawa, Y.; Ahmed, U.; Blaževi´c, D.; Rasilo, P. Modellierung und Effizienzmaximierung von magnetostriktiven Energieerzeugern unter freier Schwingung.** J. Sound Vib. **2023,** 558, **117759.** [CrossRef]
18. **Xie, J.; Li, M. Eine schnelle BDF2 Galerkin Finite-Elemente-Methode für die eindimensionale zeitabhängige Schrödingergleichung mit künstlichen Randbedingungen.** Appl. Numer. Math. **2023,** 187, **89–106.** [CrossRef]
19. **Navia, D.; Sanz, Á.S. Erforschung der nichtklassischen Dynamik der „klassischen“ Schrödingergleichung.** Ann. Phys. **2024,** 463, **169637.** [Querverweis]
20. **Bormotov, AN; Proshin, IA; Vasilkov, AV** Untersuchung mathematischer Modelle der Strukturbildung von Verbundwerkstoffen mit analytischen Methoden; **Bulletin der Staatlichen Technischen Universität Brjansk: Brjansk, Russisch, 2011; S. 62–70. Online verfügbar: https://www.elibrary.ru/item.asp?id=16388945 (abgerufen am 10. Juni 2024).**
21. **Bormotov, AN; Proshin, IA; Kuznetsova, MV Qualitätsmanagementsystem in der mathematischen Modellierung und multikriteriellen Synthese von nanomodifizierten Verbundwerkstoffen für spezielle Zwecke.** Proc. Inst. Syst. Anal. Russ. Acad. Sci. **2014,** 64, **110–118.**
22. **Konovalova, II; Selezneva, SV; Konovalov, AN; Bormotov, AN Algorithmus zur Einstellung adaptiver Regler.** Weltwissenschaft. Entdeckung. **2013, 22–33. Online verfügbar: https://www.elibrary.ru/item.asp?id=19049611 (abgerufen am 10. Juni 2024).**
23. **Nielsen, M.; Chang, I.** Quantencomputing und Quanteninformation; **Verlag „Mir“: Moskau, Russisch, 2006; 824 S.**
24. **Ozhigov, YI Modifiziertes Zalka-Wiesner-Schema zur Modellierung von Quantensystemen.** Math. Model. **2012,** 24, **109–119.**
25. **Satanin, AM** Zusätzliche Kapitel der Quantenmechanik: Methoden zur Lösung des Streuproblems mit Hochleistungs-Informatik; **Staatliche Universität Nischni Nowgorod: Nischni Nowgorod, Russland, 2014; 56 S.**
26. **Li, A.; Goto, K.; Kobayashi, Y.; Hara, Y.; Jia, Y.; Shi, Y.; Soutis, C.; Kurita, H.; Narita, F.; Otsuka, K.; et al. Energiegewinnung mit einem magnetostriktiven Wandler basierend auf Schaltsteuerung.** Sens. Actuators A Phys. **2023,** 355, **114303.** [CrossRef]
27. **Kurita, H.; Keino, T.; Senzaki, T.; Narita, F. Direkte und inverse magnetostriktive Eigenschaften von Fe–Co–V-Legierungspartikeln Weiche Verbundplatten mit Polyurethanmatrix.** Sens. Actuators A Phys. **2022,** 337, **113427.** [CrossRef]
28. **Bogdanov, YI; Bogdanova, NA; Fastovets, DV; Lukichev, VF Die Lösung der Schrödinger-Gleichung auf einem Quantencomputer mit der Zalka-Wiesner-Methode unter Berücksichtigung von Quantenrauschen.** Lett. JETF **2021,** 114, **391–399.**
29. **De Raedt, H.; Hams, AH; Michielsen, K.; De Raedt, K. Quantencomputer-Emulator.** Berechnen. Physik. Komm. **2000,** 132, **1–20.** [Querverweis]
30. **Pfister, R.; Schubert, G.; Kröll, M. Übertragung von Logistikoptimierungen auf Materialfluss-Ressourcenoptimierungen mittels Quantencomputing.** Procedia Comput. Sci. **2024,** 232, **32–42.** [CrossRef]
31. **Lee, KF; Reilly, DR; Moraw, P.; Kanter, GS Emulation eines auf Up-Conversion basierenden Quantenschlüsselverteilungsschemas mit aktiven Pumpengesteuerte Basisauswahl und adaptive Schwellenwertbildung.** Opt. Commun. **2020,** 475, **126258.** [CrossRef]
32. **Osca, J.; Vala, J. Implementierung der partiellen Unterscheidbarkeit von Photonen in einer quantenoptischen Schaltkreissimulation.** Comput. Phys. Commun. **2023,** 289, **108773.** [CrossRef]

Machine Translated by Google

33. Rakyta, P.; Morse, G.; Nádori, J.; Majnay-Takács, Z.; Mencer, O.; Zimborás, Z. Hochoptimierte Quantenschaltkreise synthetisiert über Datenfluss-Engines. J. Comput. Phys. **2024,** 500, **112756.** [CrossRef]

34. Islam, MT; Nandwana, D.; Healy, J.; Jaklich, JK; Dong, B.; Yu, A.; Moore, EE; Ijiri, Y.; McCall, SK; Willard, MA Struktur- und magnetische Eigenschaften einer magnetostriktiven Fe-Ga-Zr-Nanokristalllegierung. J. Alloys Compd. **2023,** 958, **170541.** [CrossRef]

35. Zhan, Y.-S.; Lin, C.-H. Mikromechanikbasierte konstitutive Modellierung von magnetostriktiven 1–3- und 0–3-Verbundwerkstoffen. Zusammensetzung. Struktur. **2021,** 260, **113264.** [CrossRef]

36. Hubert, O.; Daniel, L.; Bernard, L. Multiskalenmodellierung magnetostriktiver Materialien. Encycl. Smart Mater. **2022, 5, 337–354.** [Querverweis]

37. Ajagekar, A.; You, F. Variationaler Quantenschaltkreis basierend auf der Nachfragereaktion in Gebäuden unter Nutzung eines hybriden quantenklassischen Strategie. Appl. Energy **2024,** 364, **123244.** [CrossRef]

38. Cranganore, SS; De Maio, V.; Brandic, I.; Deelman, E. Den Weg zu hybriden quanten-klassischen wissenschaftlichen Arbeitsabläufen ebnen. Zukunft Gener. Comput. Syst. **2024,** 158, **346–366.** [CrossRef]

39. Hevia, JL; Peterssen, G.; Piattini, M. qSOA®: Dynamische Integration für hybride Quanten-/klassische Softwaresysteme. J. Syst. Softw. **2024,** 214, **112061.** [CrossRef]

40. Shukla, A.; Vedula, P. Ein hybrider klassischer Quantenalgorithmus zur Lösung nichtlinearer gewöhnlicher Differentialgleichungen. Angewandte Mathematik. 2023 , 442, **127708.** [CrossRef]

41. Gay-Balmaz, F.; Tronci, C. Evolution hybrider quantenklassischer Wellenfunktionen. Phys. D Nichtlineare Phänomene. **2022,** 440, **133450.** [Querverweis]

42. Zagrebin, MA Kristallstruktur, Phasendiagramme, elektronische und magnetische Eigenschaften von drei-, vier- und fünfkomponentigen Geisler-Legierungen: Dissertation zur Erlangung des Doktorgrades der physikalischen und mathematischen Wissenschaften. Dissertation, Verlag der Staatlichen Universität Tscheljabinsk, Tscheljabinsk, Russland, 2021; 326 Seiten.

43. Chernenko, V. Magnetostriktive Ni-Mn-basierte Heusler-Legierungen. Encycl. Smart Mater. **2022, 4, 160–176.** [CrossRef]

44. Chen, ZX; Sakuraba, Y.; Masuda, K.; Xu, XD; Kumara, LSR; Tajiri, H.; Kotani, Y.; Kushwaha, V.; Perumal, A.; Hono, K. Mikrostruktur- und Atomordnungsanalysen in dünnen Filmen aus Co-Fe-Cr-Al-Heusler-Legierungen: Interpretation der spinlückenlosen halbleiterähnlichen Transporteigenschaften. Acta Mater. **2022,** 232, **117958.** [CrossRef]

45. Pfeuffer, L.; Gràcia-Condal, A.; Gottschall, T.; Koch, D.; Faske, T.; Bruder, E.; Lemke, J.; Taubel, A.; Ener, S.; Scheibel, F.; et al. Einfluss der Mikrostruktur auf die Anwendung von Ni-Mn-In-Heusler-Verbindungen zur multikalorischen Kühlung mittels Magnetfeld und einachsiger Spannung. Acta Mater. **2021,** 217, **117157.** [CrossRef]

46. Budruk, A.; Phatak, C.; Petford-Long, AK; De Graef, M. In-situ-Lorentz-TEM-Magnetisierungsstudie eines Ni–Mn–Ga-Ferromagneten Formgedächtnislegierung. Acta Mater. **2011,** 59, **4895–4906.** [CrossRef]

47. Hao, Z.; Liu, R.; Fan, Y.; Wang, L. First-Principles-Berechnungen einer neuen halbmetallischen Heusler-Legierung Fe-Cr-As. J. Alloys Compd. **2020,** 820, **153118.** [CrossRef]

48. Mori, K.; Horibe, T.; Maejima, K. Bewertung der Axialkraft in einer FeCo-Schraube unter Verwendung des inversen magnetostriktiven Effekts. Messung **2020,** 165, **108131.** [CrossRef]

49. Hao, X.; Yang, B.; Li, J.; Wang, D.; Li, Z.; Yan, H.; Zhang, Y.; Esling, C.; Zhao, X.; Zuo, L. Erzielen eines linearen magnetostriktiven Effekts in texturierten MnCoSiGe-Legierungen. Acta Mater. **2023,** 242, **118486.** [CrossRef]

50. Wittek, P.; Cucchietti, FM Ein verteilter Trotter-Suzuki-Löser zweiter Ordnung mit einem hybriden CPU-GPU-Kernel. Comput. Phys. Commun. **2013,** 184, **1165–1171.** [CrossRef]

51. Ariasoca, TA; Sholihun; Santoso, I. Trotter-Suzuki-Zeitausbreitungsmethode zur Berechnung der Zustandsdichte von ungeordnetem Graphen. Comput. Mater. Sci. **2019,** 156, **434–440.** [CrossRef]

52. Wittek, P.; Calderaro, L. Erweiterte Rechenkerne in einer massiv parallelen Implementierung der Trotter–Suzuki-Approximation information. Comput. Phys. Commun. **2015,** 197, **339–340.** [CrossRef]

53. Semenova, A.; Dyachenko, SA; Korotkevich, AO; Lushnikov, PM Vergleich von Split-Step- und Hamilton-Integrationsmethoden zur Simulation nichtlinearer Schrödinger-Gleichungen. J. Comput. Phys. **2021,** 427, **110061.** [CrossRef]

54. Zhang, X.; Yang, B.; Wei, C.; Luo, M. Quantisierungsmethode und Schrödingergleichung der Bruchzeit und ihre schwachen Auswirkungen auf den Hamiltonoperator: Phasenübergänge von Energie- und Wellenfunktionen. Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul. **2021,** 93, **105531.** [Cross

55. Graf, T.; Felser, C.; Parkin, SSP Einfache Regeln zum Verständnis von Heusler-Verbindungen. Prog. Solid State Chem. **2011,** 39, **1–50.** [Querverweis]

56. Pirge, G.; Hyatt, CV; Altÿnta¸s, S. Charakterisierung von Ni-Mn-Ga magnetischen Formgedächtnislegierungen. J. Mater. Process. Technol. **2004,** 155–156, **1266–1272.** [CrossRef]

57. Webster, PJ; Ziebeck, KRA Dynamische magnetische Eigenschaften ferromagnetischer und antiferromagnetischer Heusler-Legierungen. J. Magn. Magn. Mater. **1985,** 50, **7–18.** [CrossRef]

58. Scherban, AB; Meshcheryakova, EN Ansatz zur Formalisierung von Modellen der Identifizierung und des strukturellen Managements von komplexe Systeme. J. Adv. Res. Dyn. Control Syst. **2019,** 11, **124–131.**

59. Vorontsov, AA; Slesarev, YN Mathematische Modellierung und experimentelle Überprüfung von Ausgangssignalen magne-tostriktiver Bewegungswandler . In Proceedings der International Russian Automation Conference 2019, RusAutoCon, Sotschi, Russland, 8.–14. September 2019.

Machine Translated by Google

60. Pashchenko, D.; Martyshkin, A.; Trokoz, D. Modellierung von Prozesssteuerungsalgorithmen für parallele Computersysteme unter Verwendung Nichtdeterministische Automaten. Zucht. Syst. Entscheidung. Kontrolle **2021,** 337, **235–249.**

61. Sedelnikov, A.; Kurkin, E.; Quijada-Pioquinto, JG; Lukyanov, O.; Nazarov, D.; Chertykov-tseva, V.; Kurkina, E.; Hoang, VH Algorithmus zur Propelleroptimierung basierend auf differentieller Evolution. Berechnung **2024,** 12, **52.** **[CrossRef]**

Haftungsausschluss/Anmerkung des Herausgebers: Die in allen Veröffentlichungen enthaltenen Aussagen, Meinungen und Daten sind ausschließlich die der einzelnen Autoren und Mitwirkenden und nicht die von MDPI und/oder den Herausgebern. MDPI und/oder die Herausgeber lehnen jegliche Verantwortung für Personen- oder Sachschäden ab, die aus den im Inhalt erwähnten Ideen, Methoden, Anweisungen oder Produkten resultieren.

Machine Translated by Google

Berechnung

MDPI

Artikel

Mathematische Modellierung des Wärmeübertragungsprozesses in Kuge Objekte mit flachen, zylindrischen und sphärischen Defekten

Pavel Balabanov, Andrey Egorov und Huthefa Abu Zetoonh *, **Alexander Divin**, **Sergey Ponomarev, Victor Yudaev, Sergey Baranov**

Fakultät für Mechatronik und technologische Messungen, Staatliche Technische Universität Tambow, 392000 Tambow, Russland; balabanov.pv@mail.tstu.ru (PB); agdv@yandex.ru (AD); svponom@yahoo.com (SP); pt-arta@yandex.ru (VY); baranov.sergey127@gmail.com (SB); hodefax2020x@yandex.r
*** Korrespondenz: egorov.andrey@list.ru; Tel.: +7-(910)-6522100**

Zusammenfassung: In diesem Artikel wird eine Methode zur Bestimmung der optimalen Parameter für die thermische Prüfung von Pflanzengewebe von Obst und Gemüse vorgeschlagen, das Oberflächen- und Untergrunddefekte in Form von Bereichen von Pflanzengewebe mit unterschiedlichen thermophysikalischen Eigenschaften aufweist. Auf der Grundlage bekannter mathematischer Modelle für Objekte mit überwiegend flacher, zylindrischer und kugelförmiger Form, die flache, kugelförmige und zylindrische Defektbereiche enthalten, wurden numerische Lösungen für dreidimensionale, nicht stationäre Temperaturfelder gefunden, die es ermöglichen, Leistung und Zeit der thermischen Einwirkung von Infrarotlampen auf die Probenoberfläche mithilfe der Methode der finiten Elemente zu messen. Dadurch konnte mit modernen Wärmebildkameras ein Temperaturkontrast von bis zu 4 °C zwischen den defekten und fehlerfreien Bereichen des Testobjekts zuverlässig erkannt werden. In diesem Fall können Untergrunddefekte in einer Tiefe von bis zu 3 mm unter der Oberfläche erkannt werden. Zur Bestimmung der Parameter mathematischer Modelle von Temperaturfeldern, wie etwa der Wärmeleitfähigkeit und des Wärmeleitfähigkeitskoeffizienten von Pflanzengewebe, wird eine neue Methode eines gepulsten Wärmeflusses aus einem flachen Heizgerät vorgeschlagen; Dieser unterscheidet sich in der Methode der Verarbeitung der experimentellen Daten und ermöglicht die hochgenaue Bestimmung der erforderlichen Eigenscha

Schlüsselwörter: thermophysikalische Kontrolle; Pflanzenkrankheiten; Modellierung von Temperaturfeldern

check for updates

Zitat: Balabanov, P.; Egorov, A.; Divin, A.; Ponomarev, S.; Yudaev, V.; Baranov, S.; Abu Zetoonh, H. Mathematische Modellierung des Wärmeübertragungsprozesses in sphärischen Objekten mit flachen, zylindrischen und sphärischen Defekten. Computation **2024,** 12, **148.** **https://doi.org/10.3390/ calculation12070148**

Wissenschaftlicher Herausgeber: Ali Cemal Benim

Erhalten: 10. Juni 2024
Überarbeitet: 15. Juli 2024
Akzeptiert: 15. Juli 2024
Veröffentlicht: 17. Juli 2024

Copyright: © 2024 bei den Autoren. Lizenznehmer MDPI, Basel, Schweiz.
Dieser Artikel ist ein Open Access-Artikel vertrieben unter den Bedingungen und Bedingungen der Creative Commons Namensnennungslizenz (CC BY) (https:// creativecommons.org/licenses/by/ 4.0/).

1. Einleitung

Computer-Vision-Systeme können Defekte in Pflanzengewebe effektiv erkennen, indem sie Bilder von Obst und Gemüse analysieren, die im Bereich von 8–13 Mikrometern aufgenommen wurden [1]. In diesem Fall sind die Hauptbedingungen signifikante Unterschiede in den thermophysikalischen Eigenschaften (TPCs) der defekten und defektfreien Zonen des Testobjekts sowie die richtig ausgewählten Betriebsparameter des berührungslosen, zerstörungsfreien thermischen Testverfahrens, die den erforderlichen Temperaturkontrast zwischen den verschiedenen Qualitätszonen des Pflanzengewebes gewährleisten **[2]. Um die Betriebsparameter der thermischen Prüfung zu bestimmen, muss das Problem der mathematischen Modellierung der Wärmeübertragung in heterogenen sphärischen Körpern** gelöst werden , **die Einschlüsse (Defekte) mit thermischen Eigenschaften enthalten, die sich von den Eigenschaften des Grundmaterials unterscheiden. In diesem Zusammenhang stellt sich das Problem der Bestimmung der Parameter mathematischer Modelle – des Wärmeleitfähigkeitskoeffizienten und der Wärmeleitfähigkeit**

Aus der Analyse literarischer Quellen lässt sich schlussfolgern, dass mathematische Modelle der Wärmeübertragung in Körpern aus heterogenen Materialien in den meisten Fällen für Objekte in Form einer Platte, eines Zylinders oder einer Kugel entwickelt werden. Die Formulierung des Problems der Wärmeübertragung in einem heterogenen Material in Form einer unbegrenzten Platte wird in [3,4] beschrieben, wo das Problem des Gefrierens von nassem Boden in aufgetautem Zustand und mit einer bestimmten vorgegebenen Temperatur- und Feuchtigkeitsverteilung als klassisch a

Machine Translated by Google

Dabei ist zu bedenken, dass sich der Prozess der Wärmeübertragung im Pflanzengewebe von Obst und Gemüse aufgrund **der unterschiedlichen Formen der Objekte deutlich von ähnlichen Prozessen im Boden unterscheidet .** In **[3,5] werden die gekoppelten Probleme der stationären Wärmeleitfähigkeit in einem ungleichmäßigen Körper betrachtet, der aus mehreren homogenen Teilen besteht, in denen jeweils der Wärmeleitfähigkeitskoeffizient des Materials von der Temperaturverteilung im Körper abhängt. Dieser Ansatz ist jedoch nicht anwendbar, wenn der Prozess der instationären Wärmeübertragung modelliert wird. Aus dieser Perspektive ist Referenz [6] von besonderem Interesse, da dort ein mathematisches Modell des Temperaturfelds in einer mehrschichtigen inhomogenen Kugel aus mehreren Schichten betrachtet wird. Jede Schicht ist zu jedem Zeitpunkt** durch Innen- und Außenradien, Temperatur, spezifische Wärmekapazität, **Dichte, Wärmeleitfähigkeit, Feuchtigkeit und Wärmefreisetzungsdichte charakterisiert .** In dieser Studie **wurde eine Abhängigkeit zur Berechnung der Schichttemperatur als Funktion der Fourierzahl vorgeschlagen.**
Das vorgeschlagene Modell kann zur Berechnung des Temperaturfelds in Objekten pflanzlichen Ursprungs verwendet werden, wenn deren Form nahezu kugelförmig ist, wie z. B. Äpfel. Es berücksichtigt jedoch nicht den Einfluss von Defekten, die in einem begrenzten Volumen des Objekts lokalisiert sind. In [7] wird ein mathematisches Modell eines mehrschichtigen Zylinders mit endlichen Abmessungen mit einem Defekt in der in Die Lösung kann mithilfe einer numerischen Methode erreicht werden. Gleichzeitig ermöglicht das vorgeschlagene mathematische Modell die Bestimmung der Temperaturfelder in einem mehrschichtigen Zylinder während seiner Abkühlung und des Vorhandenseins von Defekten in der inneren Schicht. Das vorgestellte Modell kann verwendet werden, um das Temperaturfeld in zylindrischen Objekten pflanzlichen Ursprungs (beispielsweise Karotten und Zwiebeln) zu beschreiben. In [8] wurde ein Modell des Temperaturfelds in einem flachen Objekt mit zylindrischen Defekten vorgeschlagen. In [9] wird die Wärmeübertragung in geschichteten Stabstrukturen betrachtet [9]. In [10] werden **basierend auf einem statistischen Modell, einem künstlichen neuronalen Netzwerkmodell und einem Finite-Elemente-Modell die Temperaturfelder von flachen Objekten mit verschiedenen Einschlüssen untersucht .**

In [11–14] werden mathematische Modelle von Temperaturfeldern rissförmiger Defekte vorgestellt. Es wird darauf hingewiesen, dass die Ausbreitung von Wärme in einem Objekt zum Auftreten einer komplexen Temperaturfeldverteilung auf seiner Oberfläche führt. Indem dies formal behoben und das inverse Problem der nichtstationären Wärmeleitfähigkeit gelöst wird, können die ungefähre Position und die Abmessungen des Defekts ermittelt werden. Somit können die bekannten Methoden der analytischen Modellierung von Temperaturfeldern in heterogenen Medien für bestimmte geometrische Formen und Einschlüsse verwendet werden. Gleichzeitig enthalten die Modelle aufgrund der Notwendigkeit, dreidimensionale Temperaturfelder zu berechnen , eine Reihe von Vereinfachungen, die ihre Genauigkeit erheblich verringern können. Am vielversprechendsten scheint die numerische Modellierung der Parameter heterogener Objekte [15], einschließlich Temperaturfeldern [16], unter Verwendung der **Methode der finiten Elemente [17] zu sein. In [18,19] wurde diese Modellierungsmethode für Objekte verwendet, die eine feste Phase mit Poren und Rissen [20]** enthielten , **die mit einer anderen Substanz gefüllt waren, was es ermöglichte, Temperaturänderungen, mechanische Spannungen und Phasenverformungen in heterogenen Objekten beliebiger Form, einschließlich Nanoobjekten, zu berechnen. Die Modellierung von Wärmeübertragungsprozessen in Pflanzengeweben wird durch die Notwendigkeit erschwert, die Diffusion von Feuchtigkeit und ihre anschließende Verdunstung zu berücksichtigen. Ähnliche Studien wurden durchgeführt, um die Prozesse des Trocknens von Maiskörnern [21] und Kakaobohnen [22], Kartoffeln [23] usw. zu simulieren. Die zur Untersuchung des Trocknungsprozesses verw Ihre Komplexität bringt jedoch zwangsläufig Kosten für Rechenleistung und Zeitressourcen mit sich, um die dreidimensionalen Temperaturfelder in Kontrollobjekten zu berechnen. Bei der Bestimmung der optimalen Betriebsparameter für aktive thermische Tests sollte die Notwendigkeit berücksichtigt werden, die Leistung der thermischen Einwirkung zu begrenzen, um die Sicherheit des Pflanzengewebes zu gewährleisten. Dies ermöglicht es auch, das Pflanzengewebe zu erhitzen, so dass die thermophysikalischen Eigenschaften als konstant betrachtet werden können. In [24,25] wurden Modelle entwickelt, die es ermöglichen, die Betriebsparameter der Laserstrahlung (Leistung, Heizfleckfläche usw.) zu bestimmen, die auf die Oberfläche einer Probe entsprechend einer nichtstationären Temperaturverteilung einwirken und den notwendigen Temperaturkontrast zwischen den defekten und defektfreien Zonen der Probe gewährleisten.**

Machine Translated by Google

des Prüfobjekts sowie die Ermittlung seiner geometrischen Parameter, berechnet mit Hilfe von Regressionsmodellen.

Referenz [26], die sich mit der Entwicklung mathematischer Modelle für Probleme der thermischen Diagnostik beschäftigt, legt nahe, dass die Vorhersage der Haltbarkeit von Verbundstrukturelementen (CSEs) mit Defekten auch bei der Entwicklung von Algorithmen zur Bestimmung der Haltbarkeit von Pflanzenprodukten nützlich sein kann. Die Aufgabe der Haltbarkeitsvorhersage besteht darin, die Schadensparameter von CSEs mit diagnostizierten Defekten unter dem Einfluss externer mechanischer Faktoren für einen bestimmten Zeitraum zu berechnen und die Gren Die Studie enthält außerdem eine mathematische Formulierung des geometrischen inversen Problems der Wärmeleitfähigkeit zum Erkennen dreidimensionaler Formen und Defektarten in CSEs sowie eine numerische Methode zu dessen Lösung.

In [27–29] wird der Prozess der Wärmeleitfähigkeit in einem heterogenen Medium durch eine homogene Matrix mit zylindrischen Einschlüssen modelliert, die durch eine Kontaktschicht getrennt sind. In diesen Arbeiten wurde auch der Einfluss der Dicke und des Materials der Schicht auf die effektiven Eigenschaften des Matrix-Schicht-Einschluss-Systems untersucht und Temperaturprofile für Konfigurationen mit unterschiedlichen Einschlusskonzentrationen und der Oberflächenschicht sowie für die unterschiedlichen Wärmeleit

Zur Bestimmung der thermophysikalischen Eigenschaften von Materialien können experimentelle Daten zu den thermophysikalischen Eigenschaften von Pflanzengeweben verwendet werden, die maßgeblichen wissenschaftlichen Veröffentlichungen entnommen wurden [30,31], oder berechnete Abhängigkeiten [30], einschließlich solcher, die mithilfe von Technologien des maschinellen Lernens und künstlichen neuronalen Netzwerken (KNN) [32] erhalten wurden. Es ist **jedoch zu beachten, dass die thermophysikalischen Eigenschaften je nach Sorte und Wachstumsort unterschiedlich sein können. Daher ist ein thermophysikalisches Experiment nach wie vor die zuverlässigste Methode, um Informationen über die Werte thermophysikalischer Eigenschaften zu** erhalten .

So zeigte die Literaturrecherche einerseits, dass bestehende mathematische Modelle der Wärmeübertragung in heterogenen Medien in der Regel die endlichen Abmessungen des Testobjekts nicht berücksichtigen und darauf ausgelegt sind, das Vorhandensein von Einschlüssen einer bestimmten geometrischen Form zu bestimmen. Andererseits erfordert ihre numerische Umsetzung aufgrund ihrer Komplexität und in der Regel ihrer Nichtlinearität erhebliche Rechenressourcen. Die Ziele der in diesem Artikel beschriebenen Forschung bestehen darin, bekannte mathematische Modelle von Temperaturfeldern für Objekte wie Obstbäume und Gemüsekulturen mit Oberflächen- und Untergrunddefekten anzupassen, eine numerische Lösung der vorgestellten mathematischen Modelle zu erhalten, um die optimale Stärke und Dauer der externen Wärmeeinwirkung zu bestimmen und so einen akzeptablen Temperaturkontrast zwischen den defekten und den defektfreien Zonen sicherzustellen, sowie eine Methode zu entwickeln und ein Messgerät zu konfigurieren, um ausdrücklich die thermophysikalischen Eigenschaften von Pflanzengeweben von Kontrollobjekten zu bestimmen, deren Werte als Parameter für mathematische Modelle verwendet werden.

2. Materialien und Methoden

2.1. Ein mathematisches Modell des Temperaturfeldes eines sphärischen Objekts mit Defekten

Beim Schreiben mathematischer Modelle in Form von Randwertproblemen der Wärmeleitfähigkeit , die es ermöglichen, die Temperaturfelder von Testobjekten (TO) (oder deren lokalen Bereichen) zu berechnen, wurden die folgenden Annahmen getroffen. Testobjekte pflanzlichen Ursprungs wie Äpfel, Kartoffeln, Orangen und Zitronen haben eine Kugelform (Abbildung 1). Die Defekte , die sie enthalten, darunter Fäulnis, Druckstellen, Hagellöcher und Schorfe, ähneln in ihrer Form der Form der Oberfläche des Objekts, auf dem sie sich befinden. Nehmen wir an, dass V1, V2, V3 und V4 eine Menge von Punkten x, y **und z sind, die zu gesundem 1 (Abbildung 1) Gewebe des Testobjekts bzw. zu Geweben gehören, die Defekte der flachen Form 2 (Dicke H), der zylindrischen Form 3 bzw. der Kugelform 4 (Radius R) enthalten. Die Defekte befinden sich in einem Abstand** h **von der Oberfläche des Objekts. In ähnlicher Weise** sind **S1, S2, S3 und S4 eine Reihe von Punkten x,** y **und** z , die zur **äußeren Oberfläche von gesundem Gewebe und von durch Defekte in der entsprechenden Form beschädigtem Gewebe gehören . Die Anfangstemperatur T0 von Pflanzengewebe wird als konstant und gleichmäßig über das Volumen des Testobjekts verteilt angesehen. Wenn das Testobjekt ausgesetzt ist**

Machine Translated by Google

ein Wärmestrom von einer Wärmequelle, die Temperaturänderung T **an der Oberfläche und im Inneren des Objekts überschreitet 3–5 ÿC nicht. Bei einer solchen Änderung der Oberflächentemperatur des Testobjekts können die thermophysikalischen Eigenschaften von Pflanzengeweben als temperaturunabhängig und im Laufe der Zeit konstant angesehen werden.**

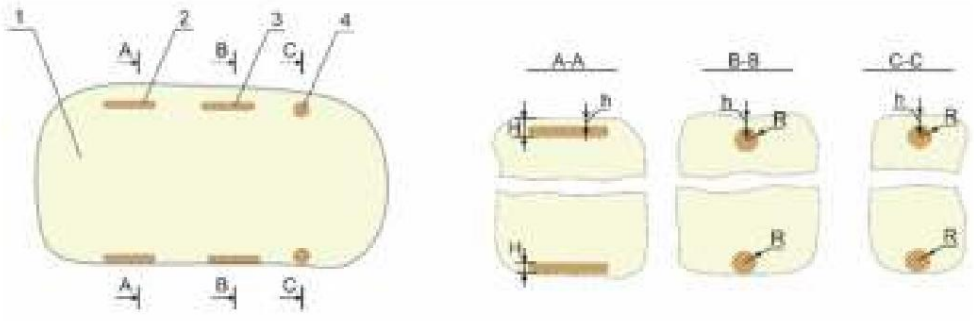


Abbildung 1. Physikalisches Modell sphärischer Objekte mit Defekten. A, B, C sind die Schnittebenen für Gewebe mit Defekten in flacher, zylindrischer bzw. sphärischer Form.

Ausgehend vom Temperaturfeldmodell eines sphärischen Körpers [33,34] haben wir ein mathematisches Modell des Temperaturfelds eines sphärischen Körpers vorgeschlagen, das alle drei betrachteten Defektarten enthält. Im allgemeinen Fall kann dies in Form eines Randwertproblems der Wärmeleitfähigkeit [35] geschrieben werden:

$$\frac{\ddot{y}Ti(x, \mathbf{y, z,} \ddot{y})\ \ddot{y}}{\ddot{y}\ \ddot{y}} = \mathrm{div}[\ddot{y}i \cdot \mathbf{grad}\ Ti(x, \mathbf{y, z,} \ddot{y})], \ddot{y}\ \mathbf{c}i\ddot{y}i\ \ddot{y}\ddot{y} \quad (1)$$

$$\mathbf{i} = \overline{\mathbf{1, 4,}}\ \ddot{y}^{\ddot{y}} > \mathbf{0,\ x, y, z}\ \ddot{y}\ \ddot{\mathbf{V}}\mathbf{i}$$

$$Ti(x, \mathbf{y, z,} 0) = \mathbf{T0} = \mathbf{const}, \quad (2)$$

$$\frac{\ddot{y}T1(x, \mathbf{y, z,} \ddot{y})\ \ddot{\mathbf{y}}\mathbf{1}}{\ddot{y}\quad \ddot{\mathbf{y}}\mathbf{n}} = q(\ddot{y}) = \begin{cases} q = \mathrm{konst.}, & \mathbf{0} < \ddot{y} < \ddot{\mathbf{y}}\mathbf{1}, \\ \mathbf{0}, & \ddot{y} > \ddot{\mathbf{y}}\mathbf{1} \end{cases} \quad (3)$$

$$\ddot{y}\ T1(x, \mathbf{y, z,} \ddot{y})|_{\ddot{y}\ \mathbf{x,y,z}\ddot{y}\mathbf{Si+1}} = \mathbf{Ti+1}(\mathbf{x, y, z,} \ddot{y})|_{\mathbf{x,y,z}\ddot{y}\mathbf{Si+1}}, \ \mathbf{ich} = \overline{\mathbf{1, 3,}} \quad (4)$$

$$\ddot{y}\quad \frac{\ddot{y}\mathbf{T1(x,y,z,}\ddot{y}\mathbf{)}}{\ddot{y}\quad \ddot{y}\mathbf{ni+1}} = \ddot{y}i+1\ \frac{\ddot{y}\mathbf{Ti+1(x,y,z,}\ddot{y}\mathbf{)}}{\ddot{y}\mathbf{ni+1}}$$

$$\frac{\ddot{\mathbf{y}}\mathbf{1}\ \ddot{y}\ \ddot{y}T1(x, \mathbf{y,}}{\mathbf{z,}\ \ddot{y})\ \ddot{\mathbf{y}}\mathbf{x}}_{x=0} = \frac{\ddot{y}T1(x, \mathbf{y, z,} \ddot{y})}{\ddot{\mathbf{y}}\mathbf{y}}_{y=0} = \frac{\ddot{y}T1(x, \mathbf{y, z,} \ddot{y})\ \ddot{\mathbf{y}}\mathbf{z}}{}_{z=0} = \mathbf{0}, \quad (5)$$

wobei $\ddot{y}$**,** c**,** $\ddot{y}$ **und** a **die Wärmeleitfähigkeit, die spezifische Wärmekapazität, die Dichte und die Temperaturleitfähigkeit des Pflanzengewebes sind;** $\ddot{y}$ **ist die Zeit;** n **ist ein einzelner Vektor normal zur Ober des entsprechenden Bereichs des Testobjekts;** q **ist die spezifische Wärmestromdichte einer externen Wärmequelle. Da das Testobjekt während des Experiments einer etwa 20–30 s dauernden thermischen Wirkung in der Mitte des Testobjekts** $(x = y = z = 0)$ **ausgesetzt war, änderte sich die Temperatur so unbedeutend, dass wir diese Änderung vernachlässigten. Daher können im Zentrum der Probe die in Gleichung (5) angegebenen Randbedingungen verwendet werden. Aufgrund der unbedeutenden Erwärmung des Testobjekts vernachlässigten wir auch die Änderung der thermophysikalischen Eigenschaften.**

Beachten Sie, dass wir unter Berücksichtigung der im Vergleich zu den Anfangswerten unbedeutenden Temperaturunterschiede im Pflanzengewebe während des Wärmetests anstelle der durch das Stefan-Boltzmann-Gesetz festgelegten Randbedingung die Randbedingung zweiter Art (3) verwendet haben, wobei $\ddot{y}1$ **die Dauer der Wärmeeinwirkung auf das Testobjekt bei der Diagnose von Defekten ist.**

Machine Translated by Google

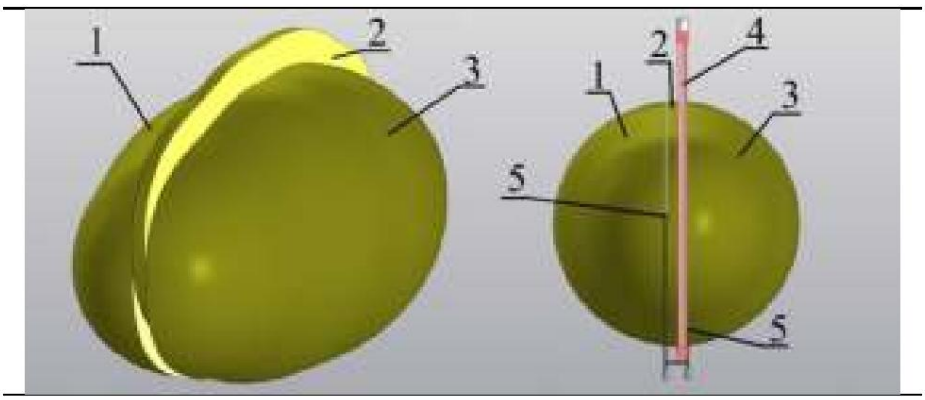
Bei der mathematischen Beschreibung des Temperaturfeldes eines sphärischen Körpers ÿ, mit Defekten 2ÿ und 3ÿ auf seiner Oberfläche ergänzten wir die Randbedingung (3) durch die 1 folgende ÿ Gleichungen: ÿ

$$\ddot{y}ni\frac{\ddot{y}Ti(x, \mathbf{y}, \mathbf{z}, \ddot{y})\ \ddot{y}i}{x,y,z\ddot{y}Si} = q(\ddot{y}),\ i = \mathbf{2, 4.}$$

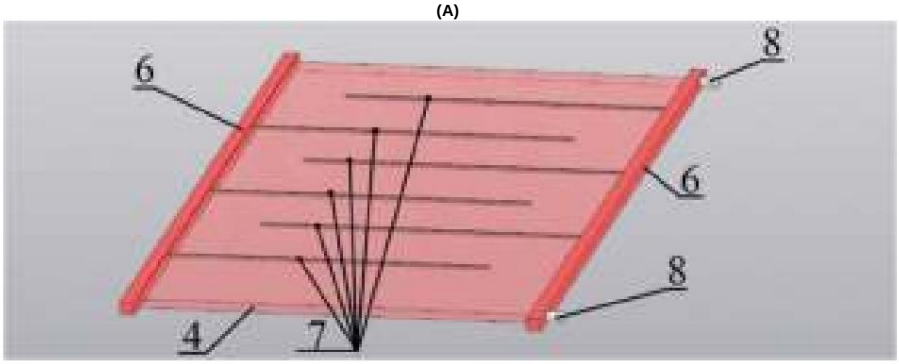
Bei der Modellierung des Temperaturfelds von Objekten pflanzlichen Ursprungs, die eine kugelförmige Gestalt aufweisen und innere und äußere Defekte aufweisen, ist es notwendig, die thermophysikalischen Eigenschaften der entsprechenden Pflanzengewebe zu kennen. Zur Untersuchung von TPCs wird die unten beschriebene Methode vorgeschlagen.

2.2. Ein mathematisches Modell des Temperaturfelds in einer flachen Probe bei Einwirkung einer gepulsten Wärmequelle

Zur Bestimmung der TPCs von Pflanzengewebe wurden die Proben 1–3 aus dem untersuchten kugelförmigen Körper (Abbildung 2a) in Form von Platten mit einer Dicke von l ausgeschnitten. **Zwischen den Proben 2 und 3 wurde ein flacher Heizer 4** mit **geringer Trägheit** platziert. Der elektrische Heizer (Abbildung **2b) bestand aus Permalloy-Folie 4, die in dielektrischen Haltern 6 befestigt war. In die Folie wurden Schlitze 7 eingebracht, um den angegebenen elektrischen Widerstand des Heizers sicherzustellen: 1,57 Ohm. Die äußersten Elemente des Heizers waren mit elektrischen Kontakten 8 ausgestattet, an die Drähte zur Stromversorgung angeschlossen wurden .** Da der Heizer aus dünner Folie bestand, **betrug die Dauer des ihm zugeführten Leistungsimpulses** 20–30 s; bei der mathematischen Modellierung haben wir die Trägheit q_{ij} **während des Erhitzens vernachlässigt. Die Hauptverbindungsstelle eines Differenzialthermoelements 5 wurde zwischen den Proben 1 und 2 installiert, und eine zusätzliche Verbindung desselben Thermoelements wurde auf der Unterseite von Probe 3**



(A)



(B)

Abbildung 2. Ein physikalisches Modell des Messgeräts (a) und der elektrischen Heizung (b).

Machine Translated by Google

Wenn ein elektrischer Spannungsimpuls an die Heizung angelegt wird, wird das Temperaturfeld in Beispiel 2 kann in Form eines Randwertproblems geschrieben werden:

$$\frac{\ddot{y}T(x,\ddot{y})\,\ddot{y}\ddot{y}}{} = \textbf{ein}\,\frac{\ddot{y}\,2T(x,\ddot{y})}{\ddot{y}\mathbf{x}\,\mathbf{2}},\ \ddot{y} > \mathbf{0},\ \mathbf{0} < \mathbf{x} < \ddot{\mathbf{y}}, \tag{6}$$

$$\mathbf{T(x,}\ 0) = \mathbf{T0} = \mathbf{0,}\ \ddot{y}T(0, \tag{7}$$

$$\frac{\ddot{y}) = \mathbf{q}\ h(\ddot{y})}{}\ \ddot{\mathbf{y}}\ \mathbf{h}\ \ddot{y}\ \ddot{\mathbf{y}}\ \ddot{\mathbf{y}}\mathbf{imp,}\ \ddot{y}\ddot{y}\ \ddot{\mathbf{y}}\mathbf{x} \tag{8}$$

$$\mathbf{T(\ddot{y},}\ \ddot{y}) = \mathbf{T0} = \mathbf{0,} \tag{9}$$

wobei T(x, **ÿ) die Temperatur der untersuchten Probe in der Ebene mit der Koordinate** x **zum Zeitpunkt ÿ ist, gerechnet ab dem Moment, in dem der Wärmeimpuls zuzuführen beginnt; T0 die Anfangstemperatur ist ;** q der der Probe über einen Zeitraum von 0 < *ÿ* **ÿ** ÿimp **zugeführte Wärmestrom ist ;** *h(ÿ),* **h(ÿ ÿ** ÿimp) **sind asymmetrische Einheitsstufenfunktionen, die durch die folgenden Beziehungen a**

$$h(\ddot{y}) = \begin{array}{l}\mathbf{0,}\ \ddot{y} < \mathbf{0,}\\ \ddot{y}\ \ddot{y}\ \mathbf{0}\ \mathbf{;}\end{array}\quad \text{hÿ}\ \ddot{y}\ \ddot{\mathbf{y}}\mathbf{imp} = \mathbf{1,}\quad \begin{array}{l}\mathbf{0}\ \ddot{y} < \ddot{y}\text{imp},\\ \mathbf{1}\ \ddot{y}\ \ddot{\mathbf{y}}\ \ddot{y}\text{imp};\end{array} \tag{10}$$

ÿimp **ist die Dauer des thermischen Impulses bei der Bestimmung von TPCs. Wir haben die Abhängigkeit der gewünschten thermophysikalischen Eigenschaften von der Temperatur vernachlässigt, da sich die Temperatur des Pflanzengewebes im Bereich der thermischen Einwirkung während des Experiments um nicht mehr als 5 °C änderte.**

Die Lösung des Randwertproblems (6)–(9) hat die Form T(x, ÿ) **ÿ T0** = · f **x, ÿ,** ÿimp, a **wobei**

$$\frac{2q}{\ddot{y}}\ \ ,$$

$$\text{f}\ \mathbf{x,}\ \ddot{\mathbf{y}},\ \ddot{y}\text{imp, a} = \begin{array}{l}\ddot{\mathbf{y}}\\ {}^{\prime\prime\prime}\ \ddot{\mathbf{y}}\ \overline{\text{nach fc}}\ \frac{\text{X}}{\mathbf{2}\ \ddot{\mathbf{y}}\ a\ddot{y}}\\ \ddot{\mathbf{y}}\ddot{\mathbf{y}}\ddot{\mathbf{y}}\end{array}\quad \begin{array}{l}\ddot{\mathbf{y}}\ \overline{a\ddot{y}\cdot\text{ier fc}}\ \frac{\text{X}}{\mathbf{2}\ \ddot{\mathbf{y}}\ a\ddot{y}}\\ \ddot{\mathbf{y}}\ \text{a}\ \ddot{y}\ \ddot{\mathbf{y}}\ \ddot{y}\text{imp}\cdot\text{ier fc}\ \frac{\text{X}}{\mathbf{2}\ a(\ddot{y}\ddot{y}\ddot{y}imp)}\end{array}\quad \begin{array}{l}\text{wenn}\ \mathbf{0} < \ddot{y}\ \ddot{\mathbf{y}}\ \ddot{y}\text{imp},\\ \text{wenn}\ \ddot{y} > \ddot{y}\text{imp},\end{array}$$

$$\text{ier f c(u)} = \text{er f c(W)dW}_{\frac{\ddot{y}}{\text{Sie}}} = \ddot{\mathbf{y}}\ \textbf{die Funktion}\ \text{er f c(W)} = \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{1}\ \ddot{\mathbf{y}}}\ \frac{\ddot{y}\text{u e}^{\mathbf{2}}}{\ddot{y}}\ \ddot{\mathbf{y}}\ \text{uer f c(u)}$$

ist eine spezielle Funktion, die ein Integral von ist erf(W); ÿW2 dW **ist die Gaußsche Fehlerfunktion. 2** erf(W) =

$$\frac{}{\ddot{y}}\ \text{Wir}\ \mathbf{0}\ \ddot{\mathbf{y}}$$

Für die Zeit *ÿ* **ÿ** ÿimp **nimmt die obige Lösung die Form an**

$$\text{T(x, ÿ)}\ \ddot{\mathbf{y}}\ \mathbf{T0} = \ddot{y}\quad \frac{\text{qx}}{}\ \frac{\text{ier f c[U(x, ÿ)]}}{\text{U(x, ÿ)}}\ \frac{\text{ier fc U}\ \mathbf{x,}\ \ddot{y}\ \ddot{\mathbf{y}}\ \ddot{y}\text{imp}}{\text{U}\ \mathbf{x,}\ \ddot{y}\ \ddot{\mathbf{y}}\ \ddot{y}\text{imp}}\ , \tag{11}$$

wobei U(x, ÿ) = **2** ÿ *aÿ* $\frac{\text{X}}{}$**,** U **x,** *ÿ* **ÿ** ÿimp = **sind dimensionslose Funktionen abhängig von 2** *a(ÿÿÿimp)*

ing auf x, ÿ, ÿimp, a **und** U **x,** *ÿ* **ÿ** ÿimp = **2** $\frac{\text{X}}{a(\ddot{y}\ddot{y}\ddot{y}imp)}$ = $\frac{\text{X}}{\mathbf{2}\ a\ddot{y}\ \frac{\ddot{y}\ddot{y}\ddot{y}imp}{\ddot{y}}}$ = U(x, ÿ) $\frac{\ddot{y}}{\ddot{y}\ddot{y}\ddot{y}imp}$**.**

Aus der Analyse des Ausdrucks (11) ist klar, dass zu einem bestimmten Zeitpunkt *ÿ* = ÿmax **die Änderung der Temperaturdifferenz** [T(x, ÿ) **ÿ T0] ihren Maximalwert** [Tmax **ÿ T0]** = [T(x, ÿmax) **ÿ** T0] erreicht hat. **Und zu dem angegebenen Zeitpunkt** entspricht *ÿ* = ÿmax **einem bestimmten Wert der dimensionslosen Funktion** Um = U(x, ÿmax) = $\frac{\text{X}}{}$**.**

3. Ergebnisse

Der Algorithmus, der zur Durchführung des Experiments und zur Bestimmung der gewünschten TPCs verwendet wurde, stellt sicher, dass während der Zeit ÿimp **eine konstante Leistung** P **an einen flachen elektrischen Heizer mit der Fläche** S (P = 2qS) geliefert wird **und die zeitliche Änderung, die den Temperaturunterschieden** T(l, ÿ) **ÿ T0** entspricht, **mithilfe eines Signals von einem Differenzthermoelement aufgezeichnet wird. Basierend auf den erhaltenen experimentellen Daten wird der Maximalwert des Temperaturunte**

Machine Translated by Google

Das Experiment ist beendet, wenn die Bedingung (T(l, ÿ) **ÿ** T0)/(Tmax **ÿ T0)** > **0,8 . . . 0,9** **erfüllt ist. Die erhaltenen experimentellen Daten werden zur Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit und thermische Diffusivität. Um dies zu erreichen, wird für eine Reihe von Werten** ÿx, ax, **ausgewählt aus den Bereichen** amin **<** ax < amax, ÿmin **<** ÿx < ÿmax , **in denen die erforderlichen TPCs liegen können, die Werte der Funktional** F(ax, ÿx) = $\sum_{ich=1}^{N}$[Tt(l, ÿi) **ÿ** T(l, ÿi)]2 **bestimmt, wobei Tt(l,** ÿi) **das Theo-** **netzförmige Temperatur, berechnet zum Zeitpunkt** ÿi **unter Verwendung des Modells (11) für eine gegebene TPC;** N **ist die Zahl von Temperaturwerten, die bei der experimentellen Messung thermophysikalischer Eigenschaften. Für das Paar** ax, ÿx wird F **ÿ** min **als gewünschter TPC angenommen.**

Mit dem beschriebenen Algorithmus wurden die TPCs von Pflanzengeweben von Obst und Gemüse erhalten. Als Beispiel zeigt Tabelle 1 die mathematische Erwartung M **und Standard Abweichung** D **der Ergebnisse von fünf Messungen der TPCs von gesunden und erkrankten Kartoffelpflanzengewebe. Unter Verwendung der erhaltenen TPC-Werte und der mathematischen oben die Modellierung von Temperaturfeldern in sphärischen Objekten mit Defekten verschiedener Formen wurde durchgeführt.**

Tabelle 1. TPCs von Pflanzengeweben von Obst und Gemüse.

Testprobe	ÿ, W/(m²K)	ein, (×107) m2 /s	*cÿ,* (×103) kJ/(m3 ·K)
M **(gesundes Gewebe)**	**0,507**	**1.417**	**3,56**
D **(gesundes Gewebe)**	**0,010**	**0,022**	**0,011**
M **(Gewebe der Kraut- und Knollenfäule)**	**0,550**	**1.420**	**3.800**
D **(Gewebe der Kraut- und Knollenfäule)**	**0,009**	**0,046**	**0,017**
M **(Hausschwammgewebe)**	**0,384**	**1.272**	**3.015**
D **(Hausschwammgewebe)**	**0,007**	**0,053**	**0,178**

Als Beispiel betrachten wir das Verfahren zur Validierung eines mathematischen Modells von Wärmeübertragung in einem ellipsoidförmigen Objekt (Abbildung 3a) mit den Abmessungen der großen und kleinen Halbachsen von 64–70 mm bzw. 23–65 mm. Die angegebene Größe Die Bereiche entsprechen dem Bereich der durchschnittlichen Größen von Kartoffelknollen, die als Saatgut zum Anpflanzen verwendet werden. Der Defekt hat eine sphärische Form und befindet sich in einer Tiefe h **von bis zu 3 mm unterhalb der Oberfläche. Defekte in einer Tiefe von mehr als drei Millimetern können nicht erkannt werden durch die vorgeschlagene thermische Methode. Das Verhältnis des Defektvolumens V3 zum Gesamtvolumen Der V0-Wert des simulierten Objekts lag im Bereich von 1–3 %, was ungefähr entspricht Der Radius sphärischer Defekte beträgt bei den kleinsten und größten Knollen 2,3–10,5 mm. Die Berechnungen des Temperaturfeldes auf der Oberfläche des Modells erfolgten bei Anfangstemperatur des Objekts von T0 = 20 ÿC. Auf der äußeren Oberfläche des Testobjekts wird eine Wärme Der Lichtstrom** q **mit einer spezifischen Leistung von 50–3000 W/m2 wurde eingestellt, der für eine Zeit** ÿm **im Bereich 1–5 s. Bei der Auswahl der angegebenen Bereiche der Wärmestromdichte und der Zeit der thermischen Einwirkung Für das Testobjekt haben wir uns von folgenden Überlegungen leiten lassen. Je länger wir auf ein Kartoffelknolle und je größer die Wärmestromdichte, desto stärker erwärmt sich die Knolle. Dies führt zur thermischen Zerstörung des Gewebes und verkürzt die Haltbarkeit. Je geringer der Wärmestrom Dichte auf der Oberfläche der Knolle und je kürzer die Dauer der Wärmeeinwirkung auf die Knolle, desto unwahrscheinlicher ist es, dass ein Defekt entdeckt wird. Unter Berücksichtigung dieser Tatsache war es experimentell festgestellt, dass die Wahl der angegebenen Bereiche einerseits ermöglicht, um einen Defekt festzustellen; andererseits führt es nicht zu einer Erwärmung des Kartoffelgewebes über 5 ÿC relativ zur Anfangstemperatur von 20 ÿC. Für gegebene Werte von** ÿm **und q ist die Temperaturfeld auf der Oberfläche des Testobjekts berechnet (Abbildung 3b) und dann die Absolutwert der maximalen Temperaturdifferenz** ÿTmax **im Defektbereich und im der Bereich des unbeschädigten Gewebes berechnet. Es wurde ein Experiment durchgeführt, bei dem Ein reales Testobjekt, eine Kartoffelknolle (Abbildung** 3c), wurde **für die Zeit** ÿm **einem Wärmestrom** q ausgesetzt **und Das Temperaturfeld wurde mit einer Wärmebildkamera Fluke Ti32 gemessen (Abbildung 3d).** ÿTmax **wurde berechnet.**

Machine Translated by Google

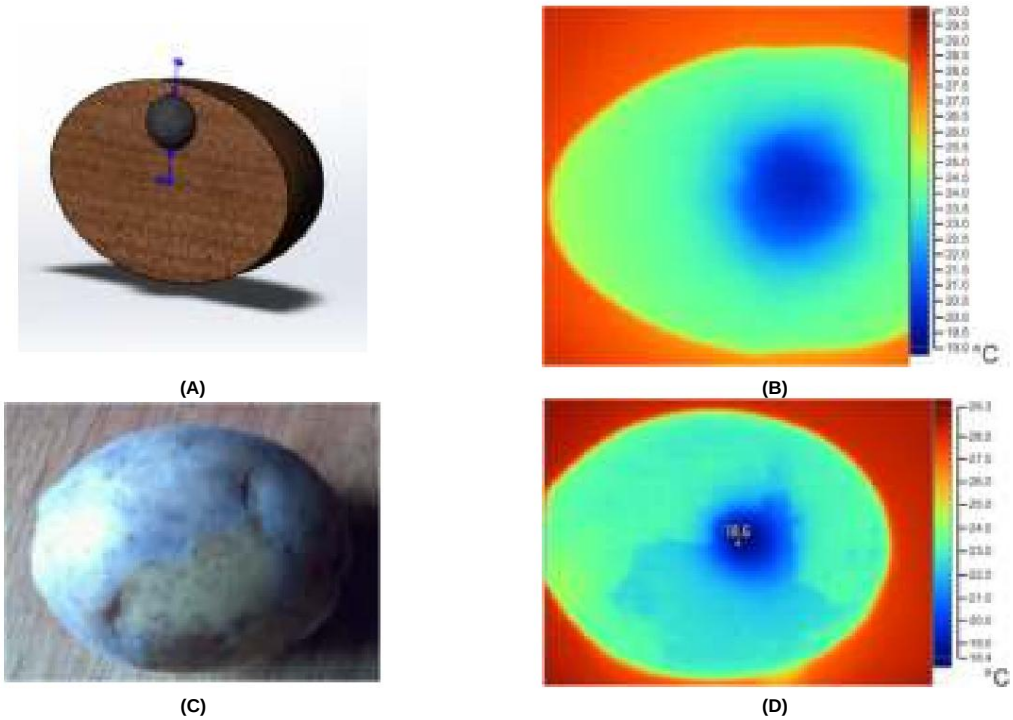


Abbildung 3. Ein 3D-Modell eines kugelförmigen Objekts mit einem kugelförmigen Defekt unter der Oberfläche (a), das Temperaturfeld auf seiner Oberfläche im Bereich des Defekts (Draufsicht) (b), eine echte Kartoffelknolle mit einem inneren Defekt (c) und das Temperaturfeld auf ihrer Oberfläche (d).

Abbildung 4 zeigt Beispiele für einen Vergleich zwischen theoretischen (durchgezogene Linie) und experimentellen (gepunktete Linien) Werten von ÿTmax, **berechnet für Testobjekte mit kugelförmigen Defekten wie Hausschwamm (Abbildung 4a) und Kraut- und Knollenfäule (Abbildung 4b), erhalten für einen Wärmestrom** q **im Bereich von 50–1500 W/m2 zum Zeitpunkt** ÿm **der Wärmeeinwirkung auf das Objekt im Be**

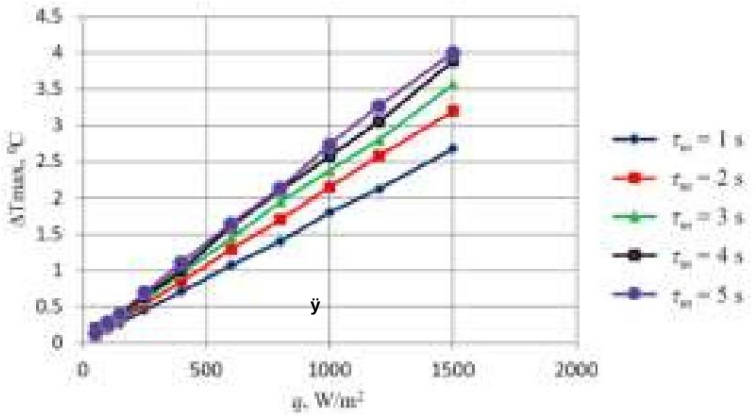
Die erhaltenen Berechnungsdaten ermöglichen es, je nach Empfindlichkeit der für die Wärmeprüfung verwendeten Wärmebildgeräte die Mindestleistung der Wärmeeinwirkung und deren Dauer auszuwählen, um die Erkennung des Defekts zu gewährleisten. Wie beispielsweise in Abbildung 4 gezeigt, ist es klar, dass bei einem Defekt in einer Tiefe von bis zu 3 mm bei q **= 300 W/m2 und ÿ1 = 1 s ein Temperaturunterschied** ÿTmax **von etwa 0,5 ÿC in der Region beobachtet wird, in der** der Defekt auftritt, was für die Erkennung durch ein Wärmebildgerät mit einer Empfindlichkeit von **0,05** ÿC **ausreicht .**

Die entwickelten Empfehlungen ermöglichten die Auswahl der optimalen Parameter für die thermische Einwirkung auf das Testobjekt. Abbildung **5 zeigt beispielsweise** Fotos von defekten **Kartoffeln, die im sichtbaren und infraroten Bereich des Strahlungsspektrums aufgenommen wurden, als die Objekte 2,4 s lang einem Wärmestrom mit einer Dichte von 300 W/m2 ausgesetzt wurden .**

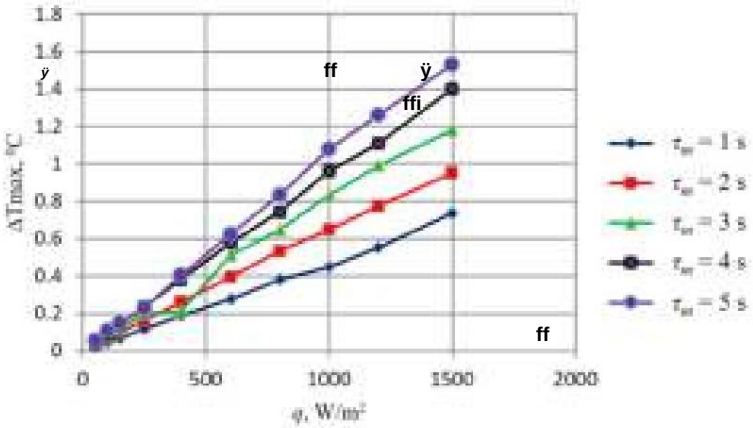
Abbildung 5 zeigt, dass sich die Temperatur im Defektbereich und im fehlerfreien Bereich eines Kartoffelknollengewebes nach der Wärmeeinwirkung um 1,4 ° C unterscheidet. Das Temperaturfeld des fehlerfreien Kartoffelgewebes ist gleichmäßig. Im Defektbereich ist jedoch ein Temperaturgradient zu beobachten. Dies ermöglicht die Verwendung einer Wärmebildkamera zum Erkennen von Defekten wie Trockenfäule (Abbildung 5a) oder Kraut- und Knollenfäule (Abbildung 5b). Dies kann wie folgt erreicht werden. Wenn eine Kartoffelknolle kurzzeitig, bis zu 5 s, durch eine externe Wärmequelle mit einer Leistung von bis zu 1500 W/m2 erhitzt wird, ist auf dem Wärmebildbild ein Temperaturkontrast im Defektbereich zu beobachten, der dessen Erkennung ermöglicht.

Machine Translated by Google

ÿ

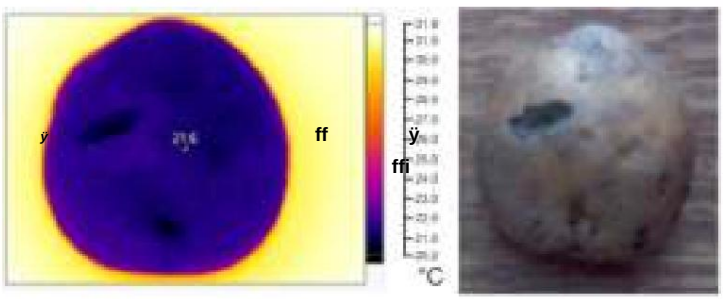


(A)

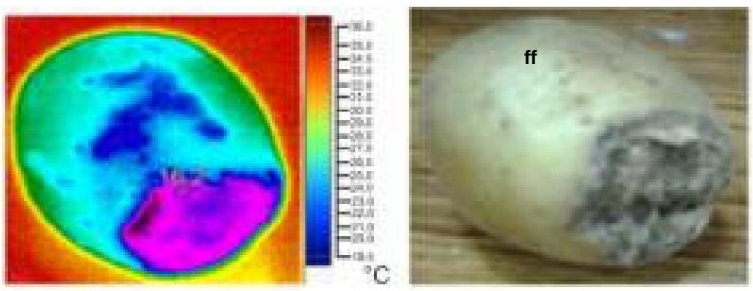


(B)

Abbildung 4. Abhängigkeitsgraphen Ÿ |ÿTmax| = f(q) **für kugelförmigen Untergrund: (a) Hausschwamm; (b) Kraut- und Knollenfäule Defekt.**



(A)



(B)

Abbildung 5. Fotografien von defektfreien und defekten Kartoffelgeweben im Infrarot- und sichtbaren Bereich von Das Spektrum: (a) Hausschwamm; (b) Kraut- und Knollenfäule.

ffi

Machine Translated by Google

4. Schlussfolgerungen

Bei der thermischen Untersuchung von Defekten in Objekten pflanzlichen Ursprungs besteht das Risiko einer thermischen Schädigung des Pflanzengewebes durch längere oder hochintensive thermische Einwirkung. Andererseits kann eine unzureichende Stärke der thermischen Einwirkung dazu führen, dass einige Defekte, insbesondere solche unter der Oberfläche der Testobjekte, nicht erkannt werden. Daher ist es notwendig, die optimalen Parameter der thermischen Einwirkung zu bestimmen, insbesondere die Einwirkungszeit und die Leistung der Strahlungsquellen. Zur Lösung des Problems wurden auf der Grundlage bekannter mathematischer Modelle für Objekte mit überwiegend flacher, zylindrischer und kugelförmiger Form, die flache, kugelförmige und zylindrische Defektbereiche enthalten, numerische Lösungen dreidimensionaler nichtstationärer Temperaturfelder entwickelt, die es ermöglichten, mithilfe der Methode der finiten Elemente die Stärke und Zeit der thermischen Einwirkung auf die Oberfläche der Probe durch Strahlung von Infrarotlampen zu bestimmen. Dadurch konnte eine zuverlässige Erkennung eines Temperaturkontrasts von bis zu 4 **°C zwischen den defekten und den defektfreien Zonen des Testobjekts durch moderne Wärmebildkameras** gewährleistet werden. In diesem Fall **können sich unter der Oberfläche liegende Defekte in**

Zur Bestimmung der Parameter mathematischer Modelle von Temperaturfeldern, wie etwa der Wärmeleitfähigkeit und des Temperaturleitfähigkeitskoeffizienten von Pflanzengewebe, wird eine neue Methode mit einer gepulsten Wärmestromquelle aus einem Flachheizgerät vorgeschlagen, die sich in der Art der Verarbeitung der Versuchsdaten unterscheidet und es ermöglicht, die erforderlichen Eigenschaften während der aktiven Phase des Versuchs in einem Zeitraum von höchstens 1–3 Minuten mit hoher Genauigkeit zu bestimmen.

Die Experimente zur Prüfung der thermischen Prüfmethode zum Erkennen von beschädigtem Pflanzengewebe einer Kartoffelknolle haben gezeigt, dass bei einer Wärmeeinwirkung von Infrarotlampen mit einer Leistung von bis zu 1500 W für 3–5 s Oberflächen- und Untergrunddefekte auf Infrarotbildern, die mit einem Wärmebildkamerasystem des Typs Fluke Ti32 aufgenommen wurden, gut zu erkennen sind . **Dies ermöglicht die Anwendung der thermischen Prüfung zum Sortieren von Kartoffeln vor der Lagerung oder vor dem Versand an den Verbraucher.**

Beiträge der Autoren: PB, AD, AE, SP und HAZ: Konzeptualisierung, Software, Datenpflege, Schreiben – Vorbereitung des Originalentwurfs, Schreiben – Überprüfung und Bearbeitung, Überwachung und Mittelbeschaffung ; PB, VY und SB: Validierung, formale Analyse, Untersuchung, Visualisierung und Schreiben – Vorbereitung des Originalentwurfs. Alle Autoren haben die veröffentlichte Version des Manuskripts g

Finanzierung: Diese Forschung wurde mit finanzieller Unterstützung des Ministeriums für Wissenschaft und Hochschulbildung der Russischen Föderation im Rahmen des Projekts „Entwicklung eines Roboterkomplexes aus unbemannten Boden- und Luftplattformen für den Einsatz in landwirtschaftlichen Technologie

Datenverfügbarkeitserklärung: Die Daten sind im Artikel enthalten.

Interessenkonflikte: Die Autoren erklären, dass keine Interessenkonflikte bestehen.

Verweise

1. **Samanian, N.; Mohebbi, M. Thermographie ein neuer Ansatz in der Lebensmittelwissenschaft: Ein Überblick.** MOJ Food Process. Technol. **2016, 2, 110–119.** [CrossRef]
2. **Ballester, C.; Jiménez-Bello, MA; Castel, JR; Intrigliolo, DS Nützlichkeit der Thermografie zur Erkennung von Wasserstress bei Zitrus- und Kakibäumen.** Agric. For. Meteorol. **2013,** 168, **120–129.** [CrossRef]
3. **Zhao, L.; Gray, DM; Male, DH Numerische Analyse der gleichzeitigen Wärme- und Massenübertragung während der Infiltration in gefrorene Boden.** J. Hydrol. **1997,** 200, **345–363.** [CrossRef]
4. **Lykov, AV** Theorie der Wärmeleitfähigkeit; **Vysshaya Shkola: Moskau, Russland, 1967; S. 600. (In Russisch)**
5. **Zarubin, VS; Rodikov, AV Mathematische Simulation des Temperaturzustandes eines inhomogenen Körpers.** High Temp. **2007,** 45, **243–254.** [CrossRef]
6. **Kurmachev, YUF** Mathematische Modellierung des thermischen Felds einer mehrschichtigen inhomogenen Kugel im instationären Modus; **Wissenschaftliche Ausgabe von Bauman zu Wissenschaft und Bildung; MSTU: Murfreesboro, TN, USA, 2007. Online verfügbar: https: //cyberleninka.ru/article/n/matematicheskoe-modelirovanie-teplovogo-polya-mnogosloynogo-neodnorodnogo-shara- pri-nestatsionarnom-rezhime/viewer (abgerufen am 5. Juli 2024).**

Machine Translated by Google

7. **Sinitsyn, NN; Shestakov, IV Mathematische Modellierung des Temperaturfelds einer Mischerpanzerung unter Berücksichtigung eines Defekts auf der Innenfläche.** Cherepovets State Univ. Bull. **2008, 4, 118–120.**
8. **Sinitsyn, NN; Makonkov, AV; Belozor, MY Modellierung eines nichtstationären Temperaturfelds eines Asphaltbelags mit Gummifüllstoff . In** Modern Materials, Equipment and Technology, Proceedings der 4. International Scientific and Practical Conference, Kursk, Russland, 25.–26. Dezember 2014; **University Book Closed Joint Stock Company: Kursk, Russland, 2014; S. 400–403.**
9. **Stankevich, IV Mathematische Modellierung des Temperaturzustandes räumlicher Stabstrukturen aus inhomogenen Materialien.** Symb. Sci. **2016,** 13, **53–57.**
10. **Li, J.; Yang, Y.; Liu, M. Forschungsfortschritte bei der Vorhersage der Wärmeübertragungseigenschaften von Textilien auf der Grundlage struktureller Eigenschaften.** Adv. Text. Technol. **2022,** 30, **18–25. [CrossRef]**
11. **Kotel'nikov, VV Mathematische Modellierung des Prozesses der Bildung eines Temperaturfeldes auf einem Defekt in Form eines Risses in der Bereich eines Spannungserhöhers.** Occup. Saf. Ind. **2008, 5, 51–58. (Auf Russisch)**
12. **Rittel, D. Thermomechanische Aspekte der dynamischen Rissbildung.** Int. J. Fract. **1999,** 99, **201–212. [CrossRef]**
13. **Zvyagin, AV; Udalov, AS; Shamina, AA Numerische Modellierung der Wärmeleitung in Körpern mit Rissen.** Acta Astronaut . 214, **196–201. [CrossRef]**
14. **Esfarjani, AA; Nazari, MB; Bayat, SH Dynamische Rissausbreitung in Verbundlaminaten mit variabler Steifigkeit unter Thermoschock .** Theor. Appl. Fract. Mech. **2024,** 130, **104325. [CrossRef]**
15. **Salman, M.; Schmauder, S. Multiskalenmodellierung von Formgedächtnispolymeren, Schäumen und** Nanokompositen . 232, **112658. [CrossRef]**
16. **Jin, L.; Zhang, R.; Du, X. Charakterisierung der temperaturabhängigen Wärmeleitung in heterogenem Beton.** Mag. Concr. Res. **2018,** 70 , **325–339.**
17. **She, Z.; Wang, K.; Li, P. Hybride Trefftz-Polygonelemente für Wärmeleitungsprobleme mit Einschlüssen/Hohlräumen.** Comput. Math. Appl. **2019,** 78, **1978–1992. [CrossRef]**
18. **Marin, M.; Hobiny, A.; Abbas, I. Die Auswirkungen von fraktionalen Zeitableitungen in porothermoelastischen Materialien unter Verwendung der Finite-Elemente-Methode Methode.** Mathematik **2021, 9, 1606. [CrossRef]**
19. **Chen, Y.; Sandhofer, SN; Wong, BM SHORYUKEN: Ein Open-Source-Softwarepaket zur Berechnung nichtlokaler Austauschwechselwirkungen in Nanodrähten.** Comput. Phys. Commun. **2024,** 300, **109197. [CrossRef]**
20. **Zhou, L.; Zhu, Z.; Que, X. Simulation der nicht-Fourier-Wärmeleitung in diskontinuierlichen heterogenen Materialien basierend auf der peridynamischen Methode.** Therm. Sci. **2023,** 27, **917–931. [CrossRef]**
21. **Wei, S.; Wang, Z.; Wang, F.; Xie, W.; Chen, P.; Yang, D. Simulation und experimentelle Untersuchungen des Wärme- und Massentransfers in Maiskörnern während der Heißlufttrocknung.** Food Bioprod. Process. **2019,** 117, **170–182. [CrossRef]**
22. **Hii, CL; Law, CL; Law, MC Simulation des Wärme- und Massentransfers von Kakaobohnen unter schrittweisen Trocknungsbedingungen in einem Wärmepumpentrockner .** Appl. Therm. Eng. **2013,** 54, **264–271. [CrossRef]**
23. **Heshmati, MK; Khiavi, HD; Dehghannya, J.; Baghban, H. 3D-Simulation von Impuls-, Wärme- und Massenübertragung in Kartoffelwürfeln während intermittierender Mikrowellen-Konvektions-Heißlufttrocknung.** Heat Mass Transf. **2023,** 59, **239–254. [CrossRef]**
24. **Divin, AG; Karpov, SV Verwendung von Laser-Punkt-Scan-Thermografie zur Qualitätsüberwachung von Produkten aus Verbundwerkstoffen .** Eng. Technol. Syst. **2024,** 34, **145–163. [CrossRef]**
25. **Divin, AG; Ponomarev, SV Anwendung der Laser-Scan-Thermografie und Regressionsanalyse zur Bestimmung von Eigenschaften von Defekten in Polymerverbundwerkstoffen.** Russ. J. Nondestruct. Test. **2024,** 60, **40–48. [CrossRef]**
26. **Nikolaev, AA Mathematische Modellierung bei Problemen der thermischen Diagnostik und Prognose der Haltbarkeit von Verbundstrukturelementen mit Defekten. Tver: Ph.D. Diss. in Phys. und Math. Sci.: 13.05.18 Mathematische Modellierung, numerische Methoden und Softwarepakete. 2010, S. 148. Online verfügbar: https://www.dissercat.com/content/matematicheskoe-modelirovanie-v- zadachakh-teplovoi-diagnostiki-i-prognozirovaniya-dolgovechn (abgerufen am 5. Juli 2024). (Auf Russisch)**
27. **Savatorova, VL; Talonov, AV; Vlasov, AN Homogenisierung von thermoelastischen Prozessen in Verbundwerkstoffen mit periodischen Struktur von Heterogenitäten.** ZAMM Zeitschrift Angew. Math. Mech. **2013,** 93, **575–596. [CrossRef]**
28. **Vlasov, AN; Savatorova, VL; Talonov, AV Asymptotische Mittelwertbildungstechnik für Wärmeleitungsprobleme mit Phasenübergängen in geschichteten Medien.** J. Appl. Mech. Tech. Phys. **1995,** 36, **773–780. [CrossRef]**
29. **Savatorova, VL; Talonov, AV Wärmeübertragung in einem Verbundwerkstoff mit struktureller Hierarchie.** Compos. Mech. Comput. Appl. **2021,** 12, **45–59. [CrossRef]**
30. **Donsì, G.; Ferrari, G.; Nigro, R. Experimentelle Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit von Äpfeln und Kartoffeln bei unterschiedlichen Feuchtigkeit Inhalt.** J. Food Eng. **1996,** 30, **263–268. [CrossRef]**
31. **Muniandy, A.; Benyathiar, P.; Mishra, DK; Ozadali, F. Dynamische thermische Eigenschaftenschätzung mit Sensitivitätskoeffizienten für schneller Erhitzungsprozess.** Foods **2021,** 10, **1954. [CrossRef] [PubMed]**
32. **Sablani, SS; Rahman, MS Verwendung neuronaler Netze zur Vorhersage der Wärmeleitfähigkeit von Lebensmitteln als Funktion des Feuchtigkeitsgehalts, Temperatur und scheinbare Porosität.** Food Res. Int. **2003,** 36, **617–623. [CrossRef]**
33. **Carslaw, HS; Jaeger, JC** Wärmeleitung in Festkörpern; **Clarendon Press: Oxford, UK, 1984; S. 532.**

Machine Translated by Google

34. Polyanin, AD Handbuch linearer partieller Differentialgleichungen für Ingenieure und Wissenschaftler; **Chapman & Hall/CRC: Boca Raton, FL, USA, 2002; S. 735. [CrossRef]**

35. Ponomarev, SV; Divin, AG; Ponomareva, ES Mathematische Modelle von Temperaturfeldern von Kartoffelknollen mit Oberflächen- und Interne Defekte. Adv. Mater. Technol. **2017, 4, 65–75. [CrossRef]**

Haftungsausschluss/Anmerkung des Herausgebers: Die in allen Veröffentlichungen enthaltenen Aussagen, Meinungen und Daten sind ausschließlich die der einzelnen Autoren und Mitwirkenden und nicht die von MDPI und/oder den Herausgebern. MDPI und/oder die Herausgeber lehnen jegliche Verantwortung für Personen- oder Sachschäden ab, die aus den im Inhalt erwähnten Ideen, Methoden, Anweisungen oder Produkten resultiere

Machine Translated by Google

Berechnung

MDPI

Artikel

Mehrstufige Quasi-Interpolation auf dünnen Tschebyscheff-Gittern

Faisal Alsharif

Fakultät für Mathematik, College of Science, Taibah University, Al-Madinah Al-Munawarah 30002, Saudi-Arabien; fsharif@taibahu.edu.sa

Zusammenfassung: Dieser Artikel untersucht das Potenzial der Verwendung mehrstufiger Quasi-Interpolationstechniken auf dünn besetzten Tschebyscheff-Gittern für komplexe numerische Berechnungen. Der Artikel beginnt mit der Darlegung der Gründe für die Wahl dünn besetzter Tschebyscheff-Gitter und Quasi-Interpolationsmethoden mit Gauß- Kerneln. Er befasst sich mit den praktischen Aspekten der Implementierung dieser Techniken. Es werden verschiedene numerische Experimente durchgeführt, um die Effizienz und die Grenzen der mehrstufigen quasi-dünn besetzten Interpolationsmethoden mit zwei- und dreidimensional orientierten Dimensionen zu bewerten. Die Arbeit zielt letztendlich darauf ab, ein umfassendes Verständnis der mit diesem Ansatz erreichbaren Rechenleistung und -

Schlüsselwörter: mehrstufig; Quasi-Interpolation; spärlich; Tschebyscheff; Gaußscher Kern; netzloses Gitter

1. Einleitung

Herkömmliche Interpolationsmethoden, wie die gitterbasierte oder radiale Basisfunktionsinterpolation, stoßen bei der Verarbeitung mehrdimensionaler Datensätze auf Rechenschwierigkeiten. Die Rechenkomplexität dieser Methoden wächst exponentiell mit der Anzahl der Dimensionen, was sie in angemessenen Zeiträumen ebenfalls undurchführbar macht. Daher sind neuartige Ansätze erforderlich, um die Herausforderung der Interpolation in mehrdim

Der Bedarf an innovativen Lösungen hat zur Entwicklung neuartiger numerischer Methoden geführt, die in der Lage sind, 2D-, 3D- oder hochdimensionale Daten mithilfe leistungsstärkerer Computer effizient zu verarbeiten **[1,2]. Dadurch konnten Forscher in den verschiedenen genannten wissenschaftlichen Bereichen bedeutende Fortschritte erzielen und innovative Lösungen für komplexe Probleme** entwickeln **[3].**

2. Chebyshev Sparse Grids-Technik

In der Literatur wurde eine Sparse-Grid-Technik vorgeschlagen, um den Fluch der Dimensionalität mit gleichmäßig verteilten Gittern für höherdimensionale Bereiche zu überwinden **[4]. Georgoulis et al. [4] schlugen einen Algorithmus vor, der die Anforderung einer großen Anzahl von Datenpunkten auf einem gleichmäßig verteilten Gitter reduziert, aber die Einfachheit einer Gitterstruktur bei der Auswertung des Interpolant Die Konstruktion eines dünn besetzten Gitters wird wie folgt definiert.**

Definieren Sie Multiindex ÿ = **(l1, . . . ,** ld) ÿ Nd **und (i1, . . . ,** id) ÿ Nd **als räumliche Positionen.**

Definieren Sie den Punkt für diese Position wie folgt:

xÿ,i = (xl1 ,i1 , . . . , xld ,id) **mit** xl j ,i j = 2(ij **.2ÿl** j ÿ **0,5) für** j = **1, . . . , D.**

Wir können nun die Familie der gleichmäßigen Gitter Gÿ **als die folgende Menge an Punkten definieren:**

$$j\,G\ddot{y} = \{x_{\ddot{y},i} : i = (i1, \ldots, id),\ ij = 0, 1, \ldots, ,\ j = 1, \ldots, 2^{l}, d\}.$$

Die Anzahl der Punkte Nÿ **in** Gÿ **ist wie folgt gegeben:**

$$N_{\ddot{y}} = \ddot{y}\,(2^{\ddot{y}} \cdot (2^{\ddot{y}-1}+1)^{d-1} + \sum_{j=1}^{\ddot{y}-1} 2^{j} \cdot (2^{j-1}+1)^{d-1})$$

check for updates

Zitat: Alsharif, F. Multilevel Quasi-Interpolation auf Tschebyscheff-Gittern. Computation **2024,** 12, **149. https://doi.org/10.3390/ calculation12070149**

Empfangen: 24. Mai 2024
Überarbeitet: 25. Juni 2024
Akzeptiert: 3. Juli 2024
Veröffentlicht: 18. Juli 2024

Copyright: © 2024 beim Autor. Lizenznehmer MDPI, Basel, Schweiz.

Dieser Artikel ist ein Open Access-Artikel vertrieben unter den Bedingungen und Bedingungen der Creative Commons Namensnennungslizenz (CC BY) (https:// creativecommons.org/licenses/by/ 4.0/).

Machine Translated by Google

Wenn ÿ = (n, . . . , n) **ist ,** ist Gÿ **das gleichmäßige volle Gitter aus gleichmäßig verteilten Punkten von . Ebene** n **mit Abständen zwischen den Punkten gegeben durch** h = **2** ÿn **Die Größe des Gitters** Gÿ **ist** N = **(2** n + 1) D **. Wir bezeichnen dieses volle Gitter als Gn,d . Nun betrachten wir eine spärliche Teilmenge von gleichmäßige Vollgitter, Gn,d , wie folgt:**

$$G\tilde{}\,nd = \bigcup_{|ÿ|=n+(dÿ1)} Gÿ , \quad (1)$$

mit |ÿ| = **l1** + **l2** + **· · ·** + ld . **Wir bezeichnen G˜ nd als das dünn besetzte Gitter der Ebene in der Dimension d. Abbildung 1 zeigt eine visuelle Darstellung des dünn besetzten Gitters für** n = **4 und** d = **2. Beachten Sie, dass einige Gitterpunkte in mehr als einem Untergitter enthalten sind; daher gibt es einige Redundanzen.**



Abbildung 1. Dünnes Gitter G˜ 4.2.

In einer alternativen Formulierung des dünn besetzten Gitters gibt es Argumente dafür, dass man statt eines gleichmäßig verteilten Gitters Tschebyscheff-Punkte verwenden kann, um Gitter auf [ÿ1, 1] zu erstellen. Für den Mehrfachindex ÿ = **(l1, . . . ,** ld) ÿ Nd **und (i1, . . . ,** id) ÿ Nd **, Wir können definieren**

$$c_{X|L\,ich\,j} = ÿ \cos \frac{2ij\ ÿ\ 1}{l\ 2 \times 2\ j} \quad \textbf{für } j = 1, \ldots, d$$

um die Punkte x ÿ**,i Gitter** C = (x c l1 , i1 , . . . , ld , id x c **). In ähnlicher Weise können wir die Familie der Tschebyscheff- wie folgt zu haben:**

$$G\,ÿ^{C} = \{x\ c\ ÿ,i \quad j : i = (i1, \ldots, id),\ ij = 0, 1, \ldots, , j = 2|1, \ldots, d\},$$

und die spärliche Teilmenge der Tschebyscheff-Gitter wie folgt:

$$G\tilde{}\,c_{nd} = \bigcup_{|ÿ|=n+(dÿ1)} G\,ÿ^{C}, \quad (2)$$

wobei G˜ c nd wird als dünnes Tschebyscheff-Gitter der Ebene n **in der Dimension** d **bezeichnet . Abbildung 2 zeigt eine visuelle Darstellung des dünnen Tschebyscheff-Gitters für** n = **4 und** d **ÿ 2. Wir beobachten , dass die Punkte des dünnen Gitters nicht gleichmäßig verteilt sind.**



Abbildung 2. Dünnes Tschebyscheff-Gitter G˜ c 4.2.

3. Quasi-Sparse-Interpolation mit Gaußschen Kernen

Bei der vorherigen Formulierung der Interpolation mit RBF haben wir festgestellt, dass ein System aus N **linearen Gleichungen gelöst werden muss, wobei** N **die Gesamtzahl der Punkte ist.**
Die Verwendung eines dünnen Punkterasters, wie im vorherigen Unterabschnitt definiert, verringert die Gesamtzahl der Punkte und damit auch die Gesamtzahl der Gleichungen für die höhere Dimension im Vergleich zu einem vollständigen Punkteraster. Dies beseitigt jedoch nicht vollständig die Unzulänglichkeit der Probleme. Eine andere in der Literatur vorgeschlagene Methode, um die Lösung des linearen Gleichungssystems zu vermeiden, ist die Verwendung der Quasi-Interpolation. **In der Literatur [5–7] gibt es ausführliche Diskussionen über Fehlerschätzungen** bei der Quasi-Interpolation.

Machine Translated by Google

Wir verwenden die Idee der Quasi-Interpolation auf dem dünn besetzten Gitter mit anisotropen Gaußschen Basisfunktionen. Wenn ci,j = |xi+1,j **ÿ xi,j |, ist der Abstand zwischen den Punkten** xi **und** xi+1 **in der Dimension** j **für** j = **1, . . . , d. Dann kann die Diagonalmatrix wie folgt definiert werden:**

$$A_i = \mathrm{diag}(c_{i1}, 1, \ldots, c_{id}),$$

wobei i = **(i1, . . . ,** id). **Für jeden Mehrfachindex ÿ können wir nun den Quasi-Interpolanten anisiotropisch definieren:**

$$Q_ÿ f(x) = \sum_{ÿ=1}^{ÿ} f(x_{ÿ,i})ÿ c(A_{xÿ,i}ÿ G_ÿ \; (x - x_{ÿ,i})), \; x \in ÿ. \tag{3}$$

Hier betrachten wir den Gaußschen Kernel

$$ÿc(x) = \exp(-\tfrac{1}{2}x^2), \; ÿ \in \mathbb{R}^d, \; ÿc > 0,$$

wobei c **den Glättegrad des Interpolanten bestimmt.**

Um den quasi-dünnen, kernelbasierten Interpolanten auf dem dünnen Gitter G˜ zu $_{n,d}$, **das** konstruieren , **müssen anisotrope Interpolanten auf den Untergittern** Gÿ mithilfe der folgenden **Formel linear kombiniert werden:**

$$Q_{n,d} f(x) = \sum_{j=0}^{dÿ-1} (-1)^j \binom{d-1}{j} \sum_{ÿ \in J, \; |ÿ|=n+(dÿ-1)-j} Q_ÿ f(x). \tag{4}$$

Beispielsweise **wäre die quasi-sparse-kernelbasierte Interpolation für** d = 2

$$Q_{n,2} f(x) = \sum_{|ÿ|=n+1} Q_ÿ f(x) - \sum_{|ÿ|=n} Q_ÿ f(x),$$

und für d = **3 wäre es**

$$Q_{n,3} f(x) = \sum_{|ÿ|=n+2} Q_ÿ f(x) - 2 \sum_{|ÿ|=n+1} Q_ÿ f(x) + \sum_{|ÿ|=n} Q_ÿ f(x).$$

Die Gleichung lautet : Qÿ f(x).

In ähnlicher Weise können wir die quasi-sparse-kernelbasierte Interpolation konstruieren

Formel für die dünn besetzten Gitter auf der Basis von Tschebyscheff-Punkten durch Ersetzen der Gitter Gÿ **durch** Gc ,

4. Mehrstufige quasi-spärliche Interpolation

Aus der Konstruktion von dünnen Gittern ist ersichtlich, dass dünnen Gittern aus den unteren Ebene zur oberen Ebene sind verschachtelt, das heißt,

$$G̃_{n,d} \subset G̃_{n+1,d}$$

für alle n **ÿ 1. Wir haben diese Verschachtelung in Abbildung 3 für gleichmäßig verteilte Gitterpunkte** dargestellt . **Für Tschebyscheb-Punkte haben wir auch die Verschachtelung der Gitter gezeigt, die in Abbildung 4 dargestellt ist. Darüber hinaus wurden die kernelbasierten anisotropen Interpolanten für jedes Untergitter bei der Kombination entsprechend skaliert, wobei die Skalierung proportional zur Dichte des entsprechenden Teilgitters war. Man kann diese Verschachtelungseigenschaften der Untergitter nutzen, um eine mehrstufige Interpolationsmethode mit ihnen vorzuschlagen, ohne der zuvor eingeführten quasi-spärlichen kernelbasierten Interpolation weite**

In der früheren Literatur [8–10] wurden Mehrebenenmethoden für radiale Basisfunktionen verwendet, um stationäre und nichtstationäre Interpolanten zu kombinieren, um die Konvergenz zu beschleunigen und die numerische Stabilität schlecht konditionierter Probleme zu verbessern.

Machine Translated by Google

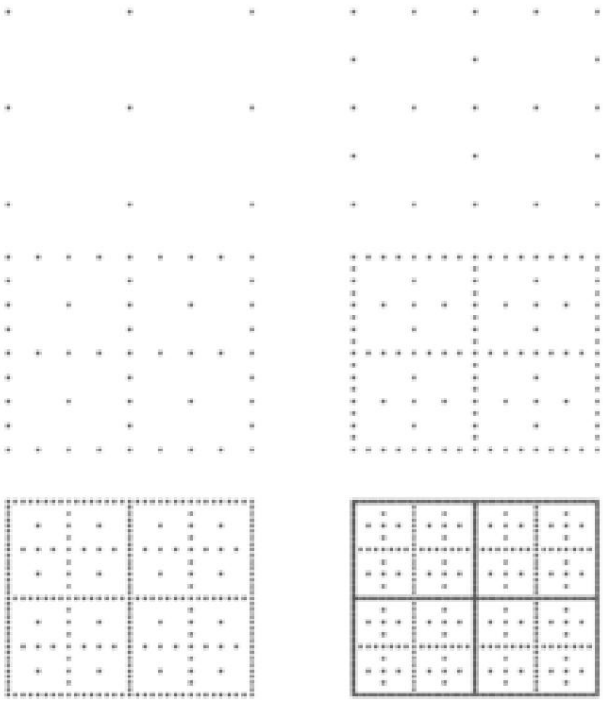


Abbildung 3. Verschachtelte Natur von dünn besetzten Gittern $G_{n,2}$ mit gleichmäßig verteilten Punkten für n = **1, 2, ..., 6.**

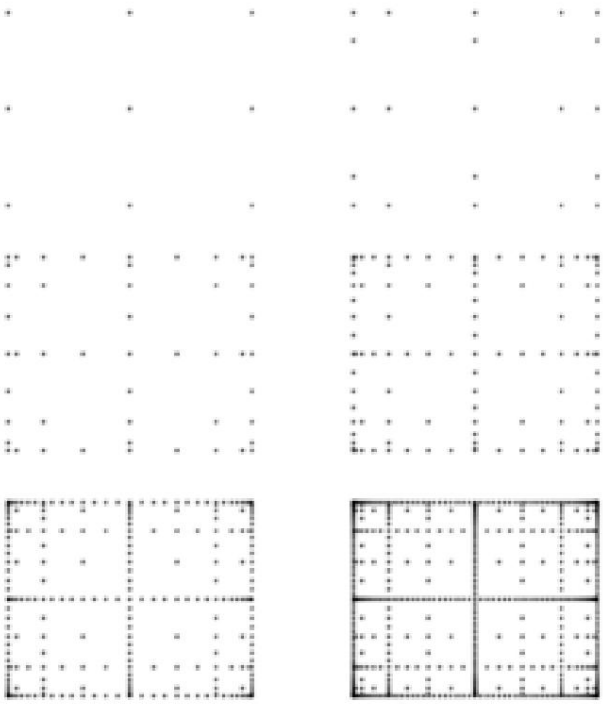


Abbildung 4. Verschachtelte Natur von dünn besetzten Gittern $G_{n,2}$ mit Tschebyscheff-Punkten für n = **1, 2, . . . , 6.**

Die Grundidee der mehrstufigen, spärlichen, gitterbasierten Quasi-Interpolation besteht darin, die Funktion auf der niedrigsten Ebene zu interpolieren, d. h. für n = **1, und dann auf jeder Ebene der Untergitter zu aktualisieren, indem die Residuen auf jeder Ebene berechnet und auf der höheren Ebene interpoliert werden. Formaler ausgedrückt erhalten wir die quasi-spärliche, kernbasierte Interpolation Qn0,d** f(x) **auf der gröbsten Ebene 1; d. h. die gröbste Ebenenapproximation ist S**

Machine Translated by Google

die Residuenfunktion auf der Ebene j **als** rj(x) = f(x) **ÿ Sjÿ1,d** f(x) **und interpolieren die Residuen Funktion als**

$$ÿj(x) = Qn0+j,d\ rj(x)$$

auf der Ebene n0 + j **dünn besetztes Gitter G˜ und aktualisiere dann den Multilevel-Interpolanten wie folgt:**

Sj,d f(x) = **Sjÿ1,d** f(x) + ÿj(x), **für 1 ÿ** j **ÿ n.**

Wir bezeichnen diesen Algorithmus als mehrstufige quasi-sparse kernelbasierte Interpolation. Da die quasi-sparse kernelbasierte Interpolation auf jeder Ebene verwendet wird, ist die Zeitkomplexität der mehrstufigen Methode linear zu diesen Ebenen. Sie benötigt jedoch mehr Zeit als die übliche quasi-sparse Interpolation für eine feste Ebene, da sie die Residuen an jedem Gitterpunkt auswertet . Auch hier ist der Algorithmus leicht für parallele Berechnungen geeignet.

5. Implementierung In

diesem Artikel werden alle Algorithmen und numerischen Experimente in der MATLAB-Software 23.2 implementiert. Dies ist notwendig, da es sonst die Veröffentlichungsumgebung beeinträchtigt.
Die Implementierung ist in drei Hauptteile gegliedert: • Erstellen von

dünnen Gittern mit entweder gleichmäßig verteilten Gittern oder Tschebyscheff-Punkten für jedes Ebene des mehrstufigen Gitters;

• Anisotrope Quasi-Interpolation Qÿ f(x) **unter Verwendung eines Gauß-Kernels; • Die Entwicklung eines Algorithmus für quasi-spärliche Interpolation, der anisotrope Quasi-Interpolanten kombiniert, wie zuvor beschrieben.**

Für die mehrstufige Quasi-Interpolation implementieren wir eine weitere Funktion, um den Algorithmus anzuwenden.

Mehrstufige quasi-spärliche Interpolation **Der**

Umriss des Algorithmus der mehrstufigen quasi-spärlichen Interpolation ist in Algorithmus 1 gegeben. Bei der Implementierung der mehrstufigen quasi-spärlichen Interpolation berechnen wir nach anfänglichen Prüfungen und der Erstellung eines spärlichen Punkterasters, falls notwendig, die Quasi-Interpolationsnäherung mithilfe der Funktion QSIK **für Ebene** n = **1. Für alle anderen Ebenen** i > **1 bewerten wir die quasi-spärliche Interpolationsnäherung an allen spärlichen Rasterpunkten und subtrahieren diese dann vom ursprünglichen Funktionswert, um die Residuenfunktion zu berechnen und berechnen dann erneut die quasi-spärliche Näherung für die Residuenfunktion auf Ebene** i **und addieren diese Schätzung zur Funktionsnäherung, die wir bereits bis Ebene i haben .**
Wir fahren mit der Berechnung der Restfunktionen fort und aktualisieren unsere Näherung auf jeder Ebene, bis die maximale Auswertungsebene n **erreicht ist. Diese mehrstufige Näherung gibt die Funktionsnäherungen auf allen Ebenen 1 ÿ** i **ÿ n zurück. Obwohl sie viele quasi-sparse Interpolationsnäherungen auf allen Ebenen erfordert, können wir die Rechenzeit reduzieren, indem wir die Funktionsnäherungen auf allen Ebenen zusammen berechnen, anstatt die Funktion für jede Ebene separat aufzurufen.**

Algorithmus 1: Mehrstufiger quasi-spärlicher Interpolationsalgorithmus.

Daten: Zerlegung spärlicher Gitterdaten.
Ergebnis: Die mehrstufige quasi-spärliche Interpolation Sn,d f(x).
1: Initialisieren Sie den ersten Interpolationswert auf Null, d. h. S0,d f(x) = **0.; 2. Konstruieren Sie die verschachtelten dünnen Gitter als G˜ j,d ÿ G˜ j+1,d .; 3. für** j = **1, . . . ,**
n **berechnen Sie** rj(x) = f(x) **ÿ Sjÿ1,d** f(x) **für alle** x **ÿ G˜ j,d ;**
Berechnen Sie ÿj(x) = **Qj,d** rj(x) **unter Verwendung des in Abschnitt 4 beschriebenen Algorithmus; aktualisieren Sie Sj,d** f(x) = **Sjÿ1,d** f(x) + ÿj(x).
Ende

Machine Translated by Google

6. Numerische Experimente zur Quasi-Sparse-Interpolation mit d = 2

Wir veranschaulichen nun die Leistung der vorgeschlagenen quasi-sparse-kernelbasierten Interpolation für folgende Testfunktionen:

2d • F **1** (x, y) **(Franke-Funktion)**

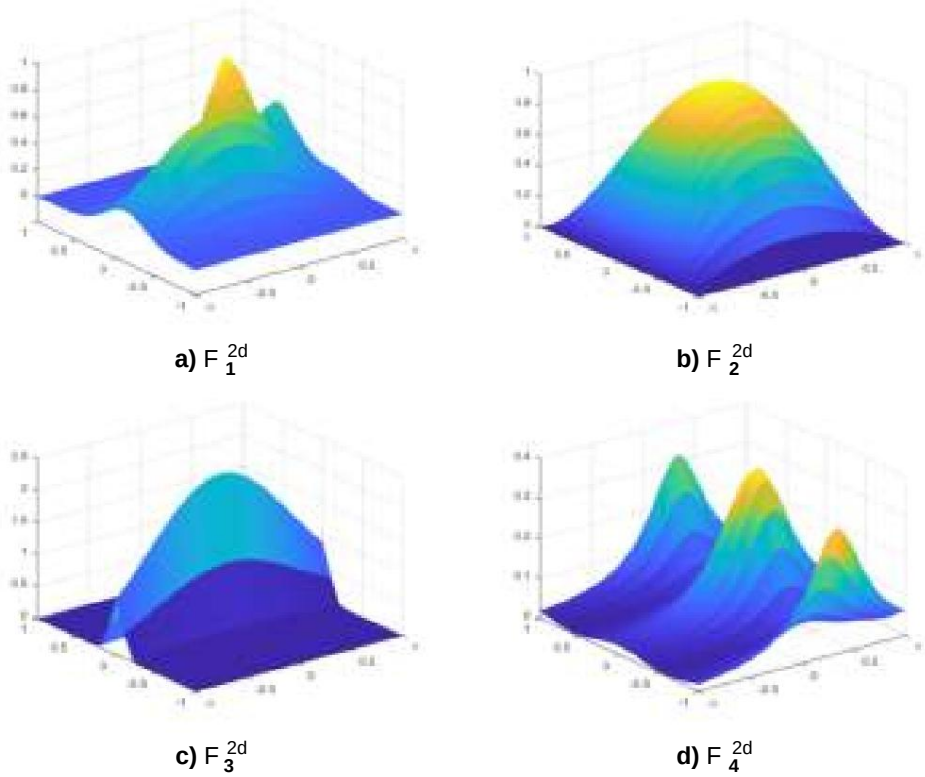
$$F_1^{2d}(x,y) = \mathbf{0{,}75e}\,\ddot{y}((9x\ddot{y}2)^2+(9y\ddot{y}2)^{\mathbf{2}}+\mathbf{0{,}5e}\,\ddot{y}^{)/4} + \mathbf{0{,}75e}\,\ddot{y}(9x+1)^{2}/49\ddot{y}(9y+1)^{\mathbf{2/10}} - ((9x\ddot{y}7)^2+(9y\ddot{y}3)^{\mathbf{2}})/4\,\ddot{y}\,\mathbf{0{,}2e}\,\ddot{y}((9x\ddot{y}4)^2+(9y\ddot{y}7)^{\mathbf{2}}).$$

2d • F **2** (x, y) = **(1 ÿ** x **2**)(1 ÿ y ÿ **2**)**.**

2d • F **3** (x, y) = $\frac{1}{18\,e^{\ddot{y}}}$ (x **2+81y 2**)**.**

2d • F **4** (x, y) = $\frac{1{,}25+\cos(5{,}4\ \text{Jahre})}{6+6(3x\ddot{y}1)^{\mathbf{2}}}$.

Die Franke-Funktion wird in der Interpolationsliteratur **mit RBF-Kerneln sehr häufig als Testfunktion verwendet [11].** Die anderen sind in **[12–14] zu finden . Diese Testfunktionen sind in Abbildung 5 dargestellt.**



a) F_1^{2d} **b)** F_2^{2d}

c) F_3^{2d} **d)** F_4^{2d}

Abbildung 5. Testfunktionen in zwei Dimensionen.

Bei all diesen numerischen Experimenten haben wir ein gleichmäßiges 50 × 50-Punkteraster im Rechteck [ÿ1, 1] × [ÿ1, 1] verwendet. Der Näherungsfehler wird als maximaler Modulfehler angegeben, d. h. ÿ f **ÿ Qn,d** f **ÿ, und der quadratische Mittelwertfehler wird v**

$$\sqrt{\frac{1}{Ne}\sum_{i=1}^{N}\ddot{y}\,(f(xi)\,\ddot{y}\,\mathbf{Qn,d}\,f(xi))^2},$$

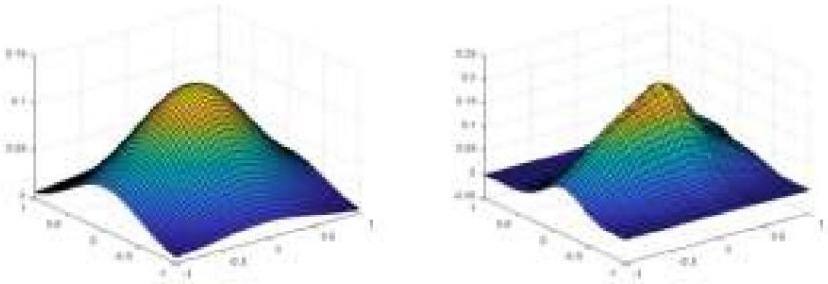
wobei xi i = **1, . . . ,** Ne **die Bewertungspunkte sind und** Ne **die Gesamtzahl der Bewertungspunkte ist . Wir geben auch die Anzahl der Punkte im dünn besetzten Gitter G˜ n,d an (oder G˜** c **die) als** SGnode **und n,d Anzahl der Punkte, die tatsächlich in der Berechnung verwendet werden, da einige der Punkte in den dünn besetzten Gitterberechnungen als** DoF erneut aufgerufen werden.

Machine Translated by Google

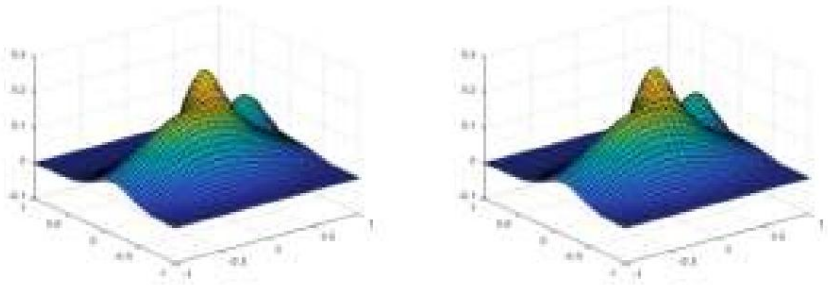
Abbildung 6 zeigt die Näherung mit unserem vorgeschlagenen quasi-sparse-kernelbasierten Interpolation mit einem gleichmäßig verteilten Raster $G_{n,2}$ für verschiedene Werte von n. Tabelle 1 zeigt auch die Fehlerschätzungen. Wir beobachten, dass der maximale Fehler oder der RMS-Fehler nicht abnimmt wesentlich, wenn wir das spärliche Gitterniveau n erhöhen, aber die Diagramme zeigen, dass Näherungen sind sehr nahe an der wahren Funktion F_1^{2d} für n > 6. Bei Tschebyscheff-Punkten beobachten wir viel bessere Näherungen, wobei sowohl der maximale Fehler als auch der RMS-Fehler abnehmen mit der Anstieg des Niveaus n. Die Diagramme der Interpolationsfunktion, ausgewertet im 50 × 50-Raster Punkte für den Algorithmus mit Tschebyscheff-Punkten sind in Abbildung 7 dargestellt. Auch hier beobachten wir dass die Näherungen für n > 6 recht gut sind.

Tabelle 1. Quasi-dünne Interpolation mit einem Gaußschen Kernel unter Verwendung gleichmäßig verteilter Gitter und Tschebyscheff-Punktrasterergebnisse für die Testfunktion F_1^{2d}.

SGnodes-Freiheitsgrade		Gleich			Tschebyscheff		
		Max Fehler	Effektivwert Fehler	Zeit	Max Fehler	Effektivwert Fehler	Zeit
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



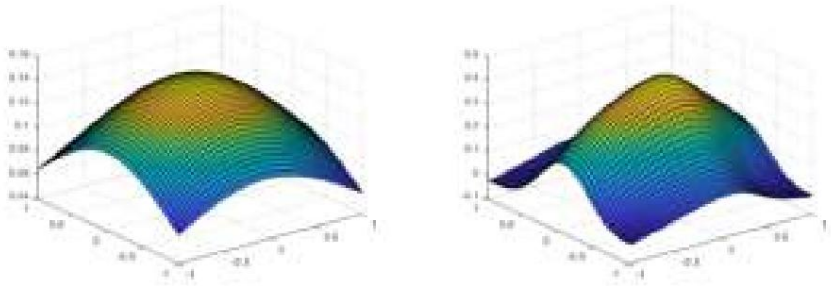
(a) n = **1** **(b)** n = **4**



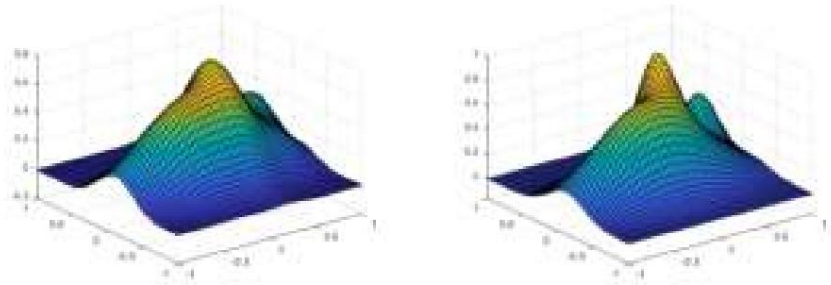
(c) n = **7** **(d)** n = **10**

Abbildung 6. Näherungen mit einem gleichmäßig verteilten dünnen Gitter mit Ebene n **und einem Gauß-Kernel für die Testfunktion F_1^{2d}.**

Machine Translated by Google



(a) n = **1** **(b)** n = **4**



(c) n = **7** **(d)** n = **10**

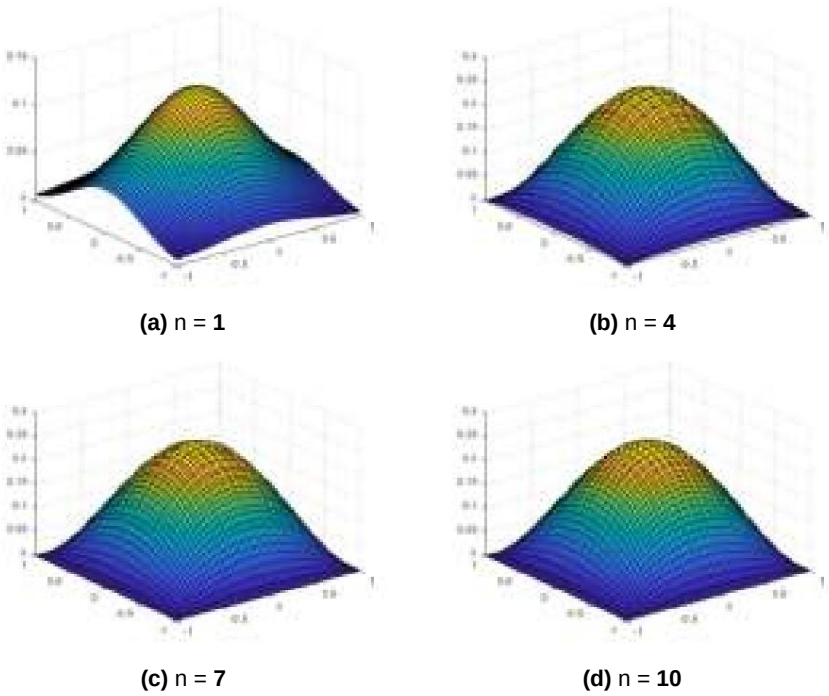
Abbildung 7. Näherungen mit Chebyshev-Dünngittern mit Niveau n **und einem Gaußschen Kernel für die Testfunktion** F_1^{2d}.

Abbildung 8 zeigt die Näherungen unter Verwendung unseres vorgeschlagenen quasi-sparse-kernelbasierten Interpolation mit gleichmäßig verteilten Gittern $G_{n,2}$ für verschiedene Werte von n **für die Testfunktion** $F_2^{2d}(x, y)$. **Tabelle 2 zeigt auch die Fehlerschätzungen. Wir beobachten, dass der maximale Fehler oder der RMS-Fehler nimmt nicht wesentlich ab, wenn wir das Gitterniveau n erhöhen, aber Die Diagramme zeigen, dass die Näherungen sehr nahe an der wahren Funktion** F liegen $_2^{2d}$ **für** n > **2 wenn wir gleichmäßig verteilte Gitter verwenden. Mit Tschebyscheff-Punkten beobachten wir viel bessere Näherungen, wobei sowohl der maximale Fehler als auch der RMS-Fehler mit dem Pegel abnehmen n. Die Diagramme der Interpolationsfunktion, ausgewertet an 50 × 50 Gitterpunkten für den Algorithmus mit Tschebyscheff-Punkten sind in Abbildung 9 dargestellt. Für** n = **1 sind die Näherungen schlecht, aber es approximiert gut, wenn** n **zunimmt. Andererseits, wenn es gleichmäßig verteilte Gitter, der Interpolant beginnt, die Oberfläche zu überanzupassen und es fehlt an Glätte für größere Werte von n. Durch die Erhöhung der Anzahl der Gitterebenen verschlechtert sich die Näherung tatsächlich für gleichmäßig verteilte Gitter.**

Tabelle 2. Quasi-dünne Interpolation mit einem Gaußschen Kernel unter Verwendung gleichmäßig verteilter Gitter und Tschebyscheff-Punktrasterergebnisse für die Testfunktion F_2^{2d}.

SGnodes-Freiheitsgrade		Gleich			Tschebyscheff		
		Max Fehler	RM SFehler	Zeit	Max Fehler	Effektivwert Fehler	Zeit
		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

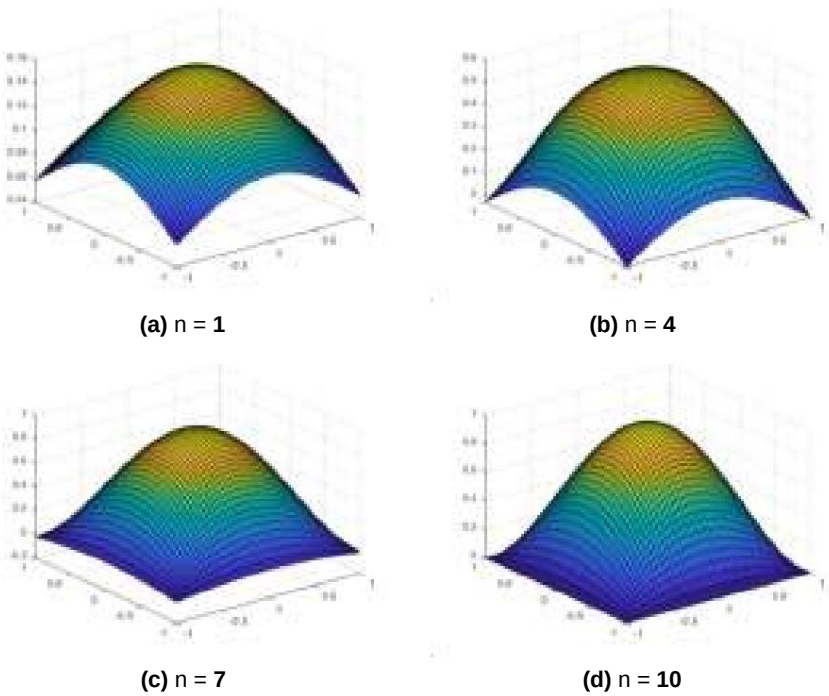
Machine Translated by Google



(a) n = **1** **(b)** n = **4**

(c) n = **7** **(d)** n = **10**

Abbildung 8. Näherungen mit einem gleichmäßig verteilten, dünnen Gitter mit Ebene n **und einem Gauß-Kernel für** 2d **der Testfunktion** F **2 .**



(a) n = **1** **(b)** n = **4**

(c) n = **7** **(d)** n = **10**

Abbildung 9. Näherungen mit einem dünnen Tschebyscheff-Gitter mit Ebene n und **einem Gauß-Kernel für die** zweidimensionale **Testfunktion** F2 .

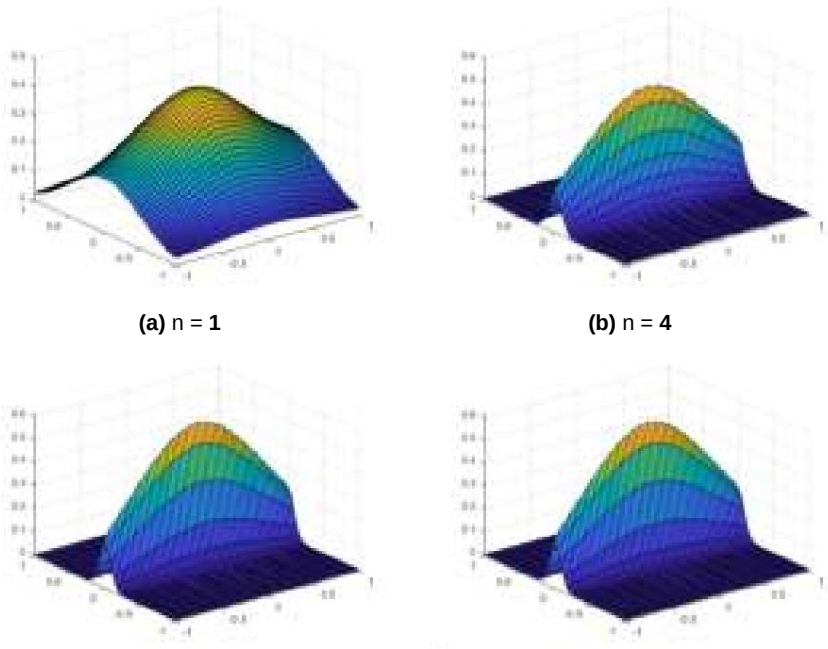
Abbildung 10 zeigt die Näherungen unter Verwendung unseres vorgeschlagenen quasi-sparse-kernelbasierten Interpolation mit gleichmäßig verteilten Gittern $G_{1,2}^{n}$ Ansatzes für verschiedene Werte von n **für die Testfunktion** $F_3^{2d}(x, y)$. **Tabelle 3 zeigt die Fehlerschätzungen. Wir beobachten, dass der maximale Fehler oder der RMS-Fehler nicht wesentlich abnimmt, wenn wir das Gitterniveau n erhöhen, aber die Diagramme zeigen ,** dass die Näherungen sehr nahe an der wahren Funktion F_3^{2d} **für** n > 4 **liegen, wenn wir gleichmäßig verteilte Gitter verwenden. Mit Tschebyscheff-Punkten beobachten wir viel besser**

Machine Translated by Google

sowohl der maximale Fehler als auch der RMS-Fehler nehmen mit dem Pegel n ab. Die Diagramme der Interpolationsfunktion ausgewertet bei 50 × 50 Gitterpunkten für den Algorithmus mit Chebyshev Punkte sind in Abbildung 11 dargestellt. **Für** n = **1 sind die Näherungen schlecht, und die Gesamt Die Form ähnelt nicht der Form der Funktion, nähert sich aber mit** zunehmendem n gut an . **Wenn andererseits gleichmäßig verteilte Gitter vorhanden sind, beginnt der Interpolant, die Oberfläche und es fehlt die Glätte für größere Werte von n. Durch die Erhöhung der Anzahl der Gitter Ebenen verschlechtert sich die Näherung bei gleichmäßig verteilten Gittern tatsächlich.**

Tabelle 3. Quasi-dünne Interpolation mit einem Gaußschen Kernel unter Verwendung gleichmäßig verteilter Gitter und Tschebyscheff-Punktrasterergebnisse für die Testfunktion F_3^{2d}.

SGnodes-Freiheitsgrade		Gleich			Tschebyscheff		
		Max Fehler	Effektivwert Fehler	Zeit	Max Fehler	Effektivwert Fehler	Zeit
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

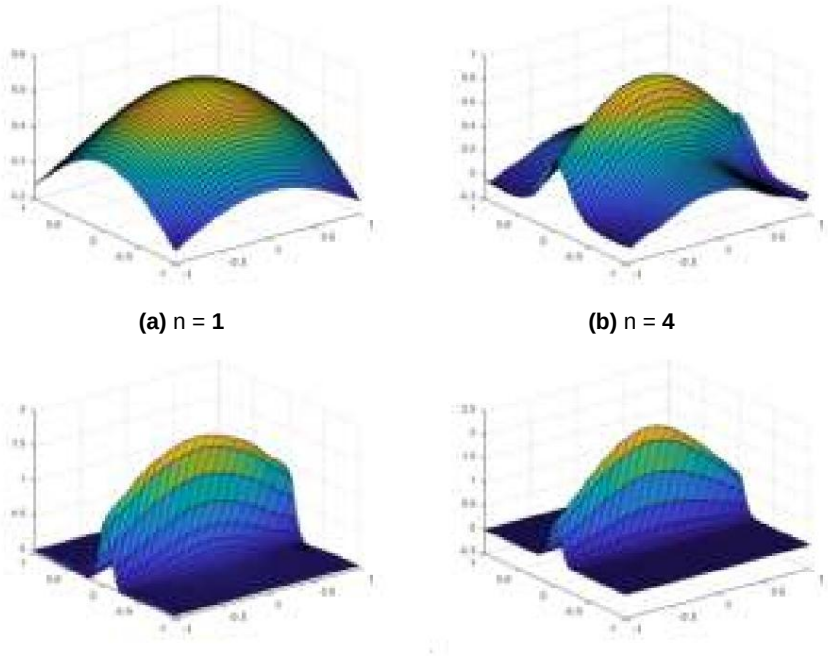


(a) n = **1** **(b)** n = **4**

(c) n = **7** **(d)** n = **10**

Abbildung 10. Näherungen mit einem gleichmäßig verteilten dünnen Gitter mit Ebene n **und einem Gaußschen Kernel für die Testfunktion** F_3^{2d}.

Machine Translated by Google



(a) n = **1** **(b)** n = **4**

(c) n = **7** **(d)** n = **10**

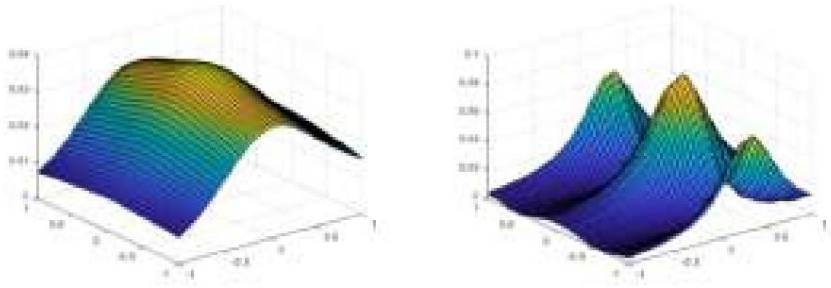
Abbildung 11. Näherungen mit einem Chebyshev-Dünngitter mit Niveau n **und einem Gaußschen Kernel für die Testfunktion** F_3^{2d}.

Abbildung 12 zeigt die Näherungen unter Verwendung unseres vorgeschlagenen quasi-sparse-kernelbasierten Interpolation mit gleichmäßig verteilten Gittern $G_{n,2}$ für verschiedene Werte von n **für die Testfunktion** $F_4^{2d}(x, y)$. **Tabelle 4 zeigt die Fehlerschätzungen. Wir beobachten, dass der maximale Fehler oder die Der RMS-Fehler nimmt nicht wesentlich ab, wenn wir das Gitterniveau n erhöhen, aber die Diagramme zeigen dass Näherungen sehr nahe an der wahren Funktion** F liegen F_4^{2d} **für** n > **4, wenn wir gleichmäßig verwenden Gittern mit unterschiedlichen Abständen. Mit Tschebyscheff-Punkten beobachten wir viel bessere Näherungen, mit sowohl der maximale Fehler als auch der RMS-Fehler nehmen mit dem Pegel n ab. Die Diagramme der Interpolationsfunktion ausgewertet bei 50 × 50 Gitterpunkten für den Algorithmus mit Chebyshev Punkte sind in Abbildung 13** dargestellt. **Für** n = **2 sind die Näherungen schlecht, und die Gesamt Die Form ähnelt nicht der Form der Funktion, nähert sich aber mit** zunehmendem n gut an .

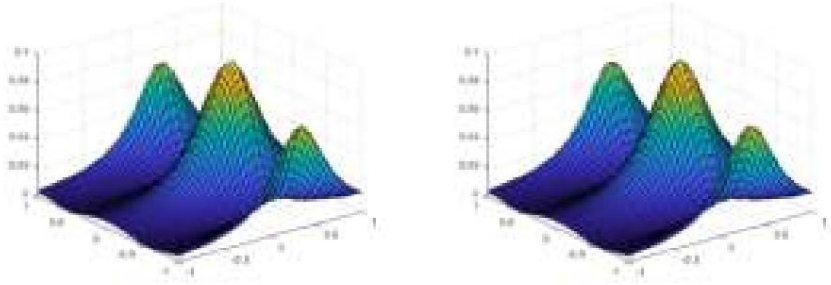
Tabelle 4. Quasi-dünne Interpolation mit einem Gaußschen Kernel unter Verwendung gleichmäßig verteilter Gitter und Tschebyscheff-Punktrasterergebnisse für die Testfunktion F_4^{2d}.

SGnodes-Freiheitsgrade		Gleich			Tschebyscheff		
		Max Fehler	Effektivwert Fehler	Zeit	Max Fehler	Effektivwert Fehler	Zeit
	9	0,33863	0,08989	0,019	0,2952	0,07502	0,019
9	39	0,31804	0,08456	0,023	0,3350	0,08348	0,021
21	109	0,29950	0,08309	0,059	0,2294	0,05323	0,044
49	271	0,29077	0,08263	0,091	0,1873	0,04437	0,073
113	641	0,28290	0,08220	0,146	0,1491	0,03358	0,146
257	1475	0,28154	0,08200	0,299	0,1084	0,02364	0,299
577	3333	0,28141	0,08192	0,615	0,0671	0,01448	0,748
1281	7431	0,27816	0,08187	1,372	0,0396	0,00817	1.339
2817	16.393	0,27869	0,08187	2,632	0,0305	0,00467	2.664
6145	13.313 35.851	0,27887	0,08187	5,023	0,0265	0,00315	5.177

Machine Translated by Google

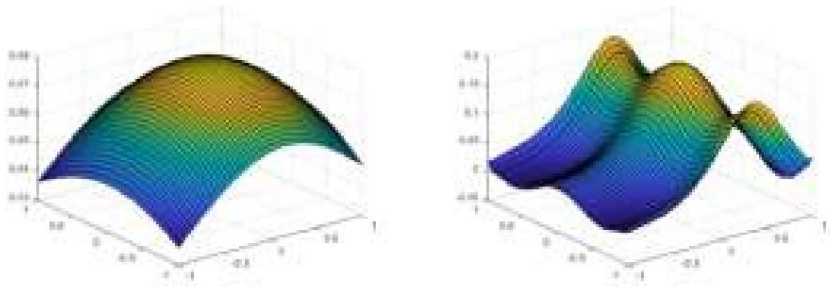


(a) n = **1** **(b)** n = **4**

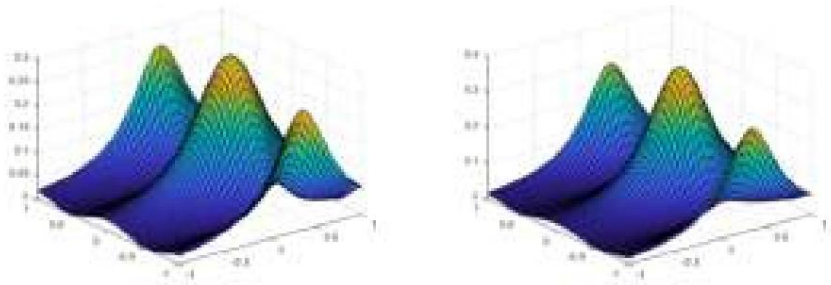


(c) n = **7** **(d)** n = **10**

Abbildung 12. Näherungen mit einem gleichmäßig verteilten , **dünnen Gitter mit Ebene** n **und einem Gauß-Kernel** 2d **für die Testfunktion** F4 .



(a) n = **1** **(b)** n = **4**



(c) n = **7** **(d)** n = **10**

Abbildung 13. Näherungen mit einem dünnen Tschebyscheff-Gitter mit Ebene n und **einem Gauß-Kernel für die** zweitdimensionale **Testfunktion** F4 .

In diesen Ergebnissen erreicht die quasi-sparse Interpolation mit gleichmäßig verteilten Gittern einen stabilen maximalen absoluten Fehler und quadratischen Mittelwertfehler auf einem niedrigeren Niveau mit einer kleinen Anzahl von spärlichen Gitterpunkten. Die quasi-sparse Interpolation mit Tschebyscheff-Punkten erreicht jedoch viel kleinere Werte für maximale Fehler und RMS-Fehler für alle Testfunktionen und stabilisiert sich für größere Werte des Niveaus n. Da außerdem die Fehler stabil bleiben, wenn die Anzahl der Gitterpunkte zunimmt, passt die quasi-sparse Interpolation gut zu

Machine Translated by Google

der mehrstufige quasi-sparse Algorithmus, der in einem späteren Unterabschnitt untersucht wird. Die wichtigste Beobachtung bei diesen Ergebnissen ist, dass die quasi-sparse Interpolation nicht konvergiert für gleichmäßig verteilte Gitter, aber es konvergiert für Tschebyscheff-Gitterpunkte. Die Rate der Konvergenz hängt von der Testfunktion ab.

7. Numerische Experimente für quasi-sparse Interpolationen mit d = 3

In diesem Abschnitt präsentieren wir die Leistungsanalyse für einige Testfunktionen mit Definitionsbereich ÿ = [ÿ1, 1] 3 **in der Dimension** d = **3. Als Test werden folgende Funktionen verwendet Funktionen:**

- F 3D-Modell 1 (x, y) **(Franke-Funktion)**

$$F_1^{\text{3D-Modell}}(x,y) = \mathbf{0{,}75e}\,\ddot{y}((9x\ddot{y}2)\,2+(9y\ddot{y}2)\,2+(9z\ddot{y}2)\,\mathbf{2}\qquad)/4 + \mathbf{0{,}75e}\,\ddot{y}(9x+1)\,2/49\ddot{y}(9y+1)\,2/10\ddot{y}(9z+1)\,\mathbf{2/10}$$
$$\mathbf{+0{,}5e}\,\ddot{y}((9x\ddot{y}7)\,2+(9y\ddot{y}3)\,2+(9z\ddot{y}5)\,\mathbf{2}\quad)/4\ \ddot{y}\ \mathbf{0{,}2e}\,\ddot{y}((9x\ddot{y}4)\,2+(9y\ddot{y}7)\,2+(9z\ddot{y}5)\,\mathbf{2}\qquad).$$

- F 3D-Modell 2 (x, y) = **(1 ÿ** x **2)(1 ÿ** y **2)(1 ÿ** z **2).**
- F 3D-Modell 3 (x, y) = $\frac{\mathbf{18}}{\ddot{y}}$ t ÿ(x **2+81y** 2+z **2**) **.**
- F 3D-Modell 4 (x, y) = cos(6z) $\frac{\mathbf{1{,}25+\cos(5{,}4\ Jahre)}}{\mathbf{6+6(3x\ddot{y}1)}}$ **2 .**

Die Leistung unseres quasi-sparse-kernelbasierten Interpolanten wird in einem Raster ausgewertet von 20 × 20 × 20 gleichmäßig verteilten Punkten im Würfel [ÿ1, 1] **3 Die Ergebnisse sind zusammengefasst in Tabellen 5–8. Aufgrund der langen Rechenzeit und der fehlenden Verfügbarkeit einer parallelen Rechenmaschine Umgebung werten wir nur** n = **7 Ebenen für den Multilevel-Algorithmus aus. Die Ergebnisse sind ähnlich unserer Beobachtung für die numerischen Experimente in** d = **2, da wir nicht beobachten jede Konvergenz der quasi-sparse Interpolation mit gleichmäßig verteilten Gittern, aber die Näherungen konvergieren für Tschebyscheff-Punkte in allen Testfunktionen.**

Tabelle 5. Quasi-dünne Interpolation mit einem Gaußschen Kernel unter Verwendung gleichmäßig verteilter Gitter und Tschebyscheff-Punktrasterergebnisse für die Testfunktion F 3D-Modell **1 .**

SGnodes-Freiheitsgrade		Gleich			Tschebyscheff		
		Max Fehler	Effektivwert Fehler	Zeit	Max Fehler	Effektivwert Fehler	Zeit
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	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

Tabelle 6. Quasi-dünne Interpolation mit einem Gaußschen Kernel unter Verwendung gleichmäßig verteilter Gitter und Tschebyscheff-Punktrasterergebnisse für die Testfunktion F 3D-Modell **2 .**

SGnodes-Freiheitsgrade		Gleich			Tschebyscheff		
		Max Fehler	Effektivwert Fehler	Zeit	Max Fehler	Effektivwert Fehler	Zeit
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	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

Tabelle 7. Quasi-dünne Interpolation mit einem Gaußschen Kernel unter Verwendung gleichmäßig verteilter Gitter und Tschebyscheff-Punktrasterergebnisse für die Testfunktion $F_{3}^{3D\text{-Modell}}$.

SGnodes-Freiheitsgrade		Gleich			Tschebyscheff		
		Max Fehler	Effektivwert Fehler	Zeit	Max Fehler	Effektivwert Fehler	Zeit
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	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

Tabelle 8. Quasi-dünne Interpolation mit einem Gaußschen Kernel unter Verwendung gleichmäßig verteilter Gitter und Tschebyscheff-Punktrasterergebnisse für die Testfunktion $F_{4}^{3D\text{-Modell}}$.

SGnodes-Freiheitsgrade		Gleich			Tschebyscheff		
		Max Fehler	Effektivwert Fehler	Zeit	Max Fehler	Effektivwert Fehler	Zeit
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	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. Numerische Experimente zur mehrstufigen quasi-spärlichen Interpolation

In diesem Abschnitt veranschaulichen wir die Leistungsfähigkeit unseres vorgeschlagenen mehrstufigen quasi-sparsen Kernel-b-sed-Interpolationsmethode für die gleichen Testfunktionen, F_{1}^{2d}, F_{2}^{2d}, F_{3}^{2d}, F_{4}^{2d} und F^{2d} als Wir werten die Interpolationen auf einem Raster von 50 × 50 Punkten im Rechteck aus [ÿ1, 1] × [ÿ1, 1]. Die Ergebnisse sind in den Tabellen 9–12 für die Testfunktionen in d = 2 dargestellt. Die Näherungsfunktionen sind ebenfalls in den Abbildungen 14–21 dargestellt. Für beide gleich verteilten dünn besetzte Gitter und Tschebyscheff-punktbasierte dünn besetzte Gitter beobachten wir, dass das Maximum Fehler und der quadratische Mittelwert des Fehlers nehmen mit zunehmender Stufe n ab. Die mehrstufige Die quasi-sparse Interpolationsergebnisse sind mit Tschebyscheff-Punkten sogar noch besser als mit gleichmäßig verteilten

Raster mit unterschiedlichen Abständen.

Tabelle 9. Mehrstufige quasi-sparse Interpolation mit einem Gauß-Kernel unter Verwendung gleichmäßig verteilter Gitter und Tschebyscheff-Gitter-Ergebnisse für die Testfunktion F_{1}^{2d}.

SGnodes-Freiheitsgrade		Gleich			Tschebyscheff		
		Max Fehler	Effektivwert Fehler	Zeit	Max Fehler	Effektivwert Fehler	Zeit
		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

Tabelle 10. Mehrstufige quasi-spärliche Interpolation mit einem Gauß-Kernel unter Verwendung gleichmäßig verteilter Gitter und Tschebyscheff-Gitter-Ergebnisse für die Testfunktion F_2^{2d}.

SGnodes-Freiheitsgrade		Gleich			Tschebyscheff		
		Max Fehler	Effektivwert Fehler	Zeit	Max Fehler	Effektivwert Fehler	Zeit
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

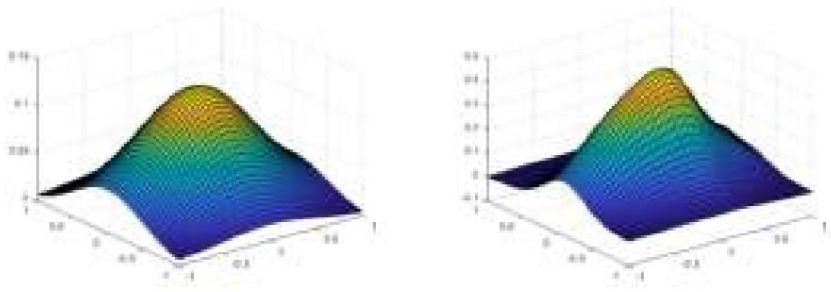
Tabelle 11. Mehrstufige quasi-spärliche Interpolation mit einem Gauß-Kernel unter Verwendung gleichmäßig verteilter Gitter und Tschebyscheff-Gitter-Ergebnisse für die Testfunktion F_3^{2d}.

SGnodes-Freiheitsgrade		Gleich			Tschebyscheff		
		Max Fehler	Effektivwert Fehler	Zeit	Max Fehler	Effektivwert Fehler	Zeit
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

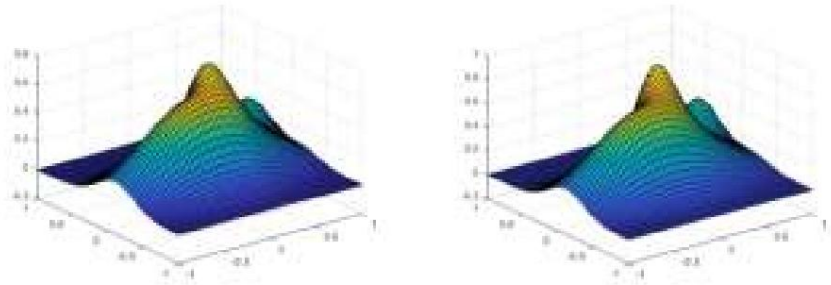
Tabelle 12. Mehrstufige quasi-spärliche Interpolation mit einem Gauß-Kernel unter Verwendung gleichmäßig verteilter Gitter und Tschebyscheff-Gitter-Ergebnisse für die Testfunktion F_4^{2d}.

SGnodes-Freiheitsgrade		Gleich			Tschebyscheff		
		Max Fehler	Effektivwert Fehler	Zeit	Max Fehler	Effektivwert Fehler	Zeit
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

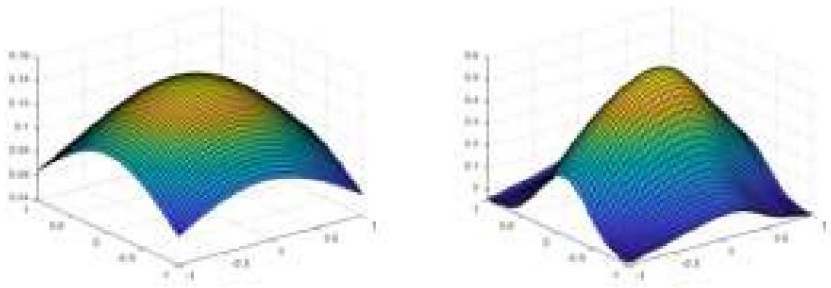


(a) n = **1** **(b)** n = **4**

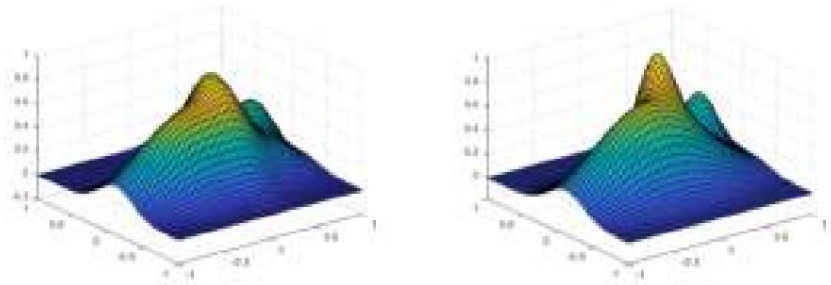


(c) n = **7** **(d)** n = **10**

Abbildung 14. Mehrstufige quasi-spärliche Näherungen unter Verwendung eines gleichmäßig verteilten Gitters mit Ebene n **und einem** 2d- Gauß-Kernel **für die Testfunktion** F1 .



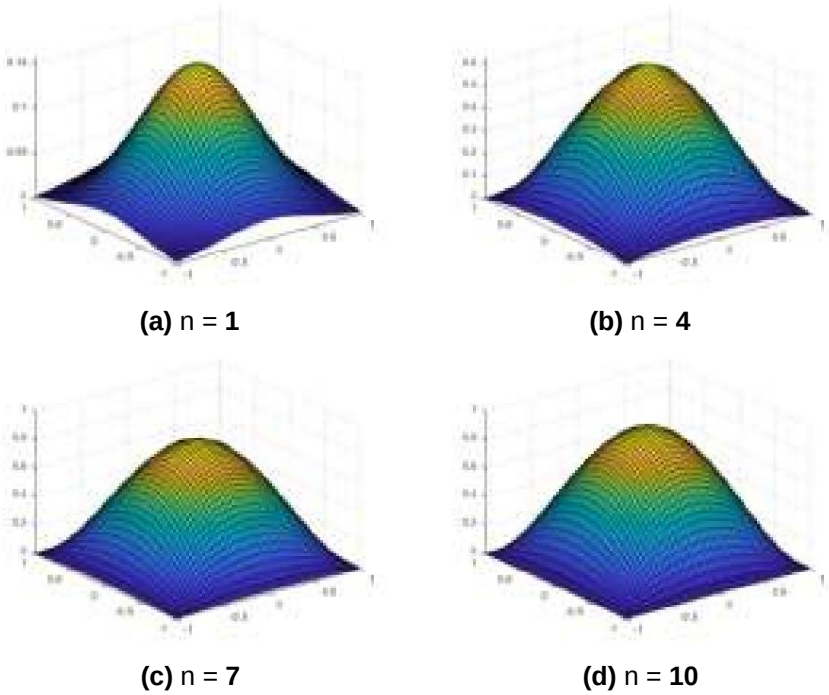
(a) n = **1** **(b)** n = **4**



(c) n = **7** **(d)** n = **10**

Abbildung 15. Mehrstufige quasi-spärliche Näherungen unter Verwendung eines Tschebyscheff-Gitters mit Ebene n **und eines** 2d- Gauß-Kernels **für die Testfunktion** F1 .

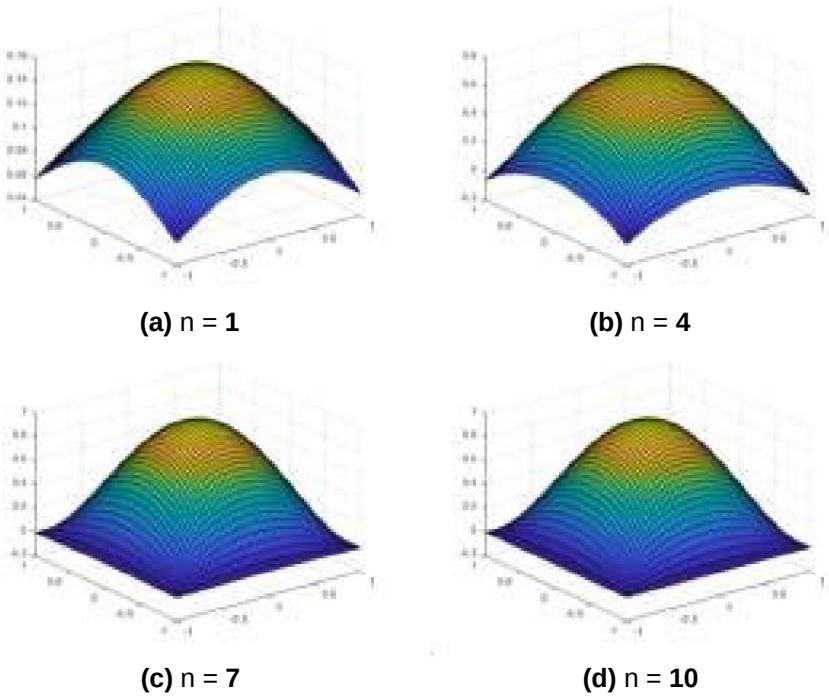
Machine Translated by Google



(a) n = **1** **(b)** n = **4**

(c) n = **7** **(d)** n = **10**

Abbildung 16. Mehrstufige quasi-spärliche Näherungen unter Verwendung eines gleichmäßig verteilten Gitters mit Ebene n **und einem** 2d- **Gauß-Kernel für die Testfunktion** F **2 .**

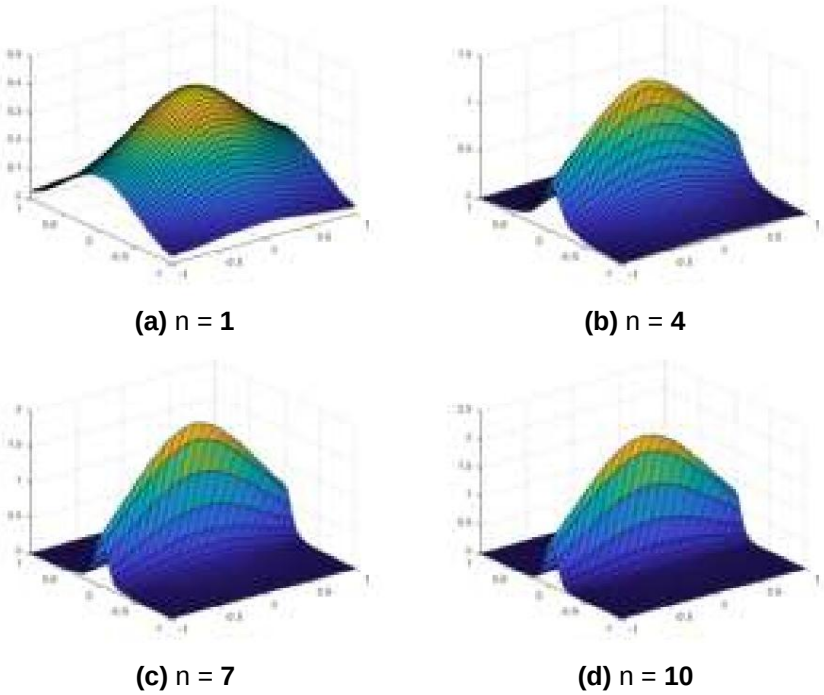


(a) n = **1** **(b)** n = **4**

(c) n = **7** **(d)** n = **10**

Abbildung 17. Mehrstufige quasi-spärliche Näherungen unter Verwendung eines Tschebyscheff-Gitters mit Ebene n **und eines** 2d- **Gauß-Kernels für die Testfunktion** F **2 .**

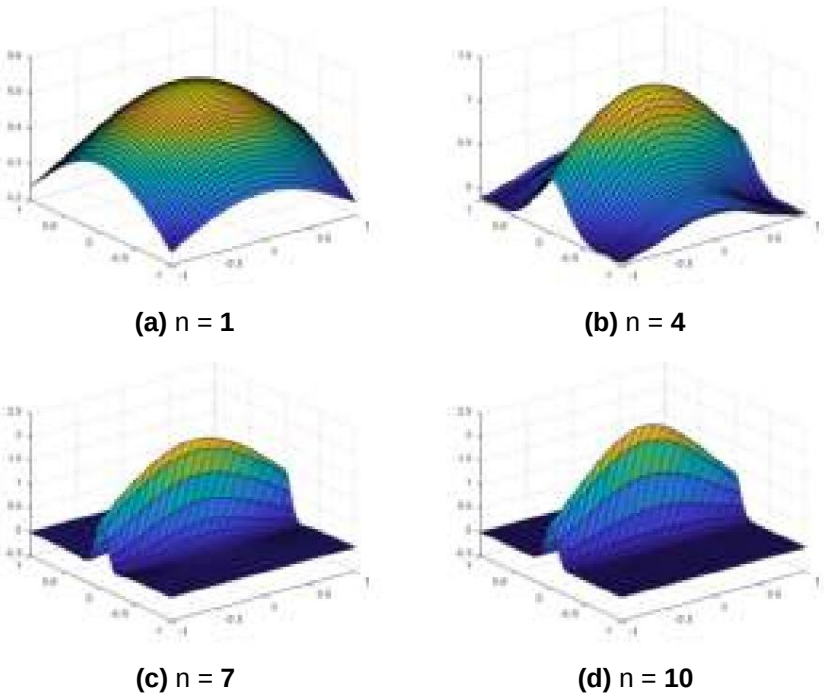
Machine Translated by Google



(a) n = **1** **(b)** n = **4**

(c) n = **7** **(d)** n = **10**

Abbildung 18. Mehrstufige quasi-spärliche Näherungen unter Verwendung eines gleichmäßig verteilten Gitters mit Ebene n **und einem** 2d- **Gauß-Kernel für die Testfunktion** F **3 .**

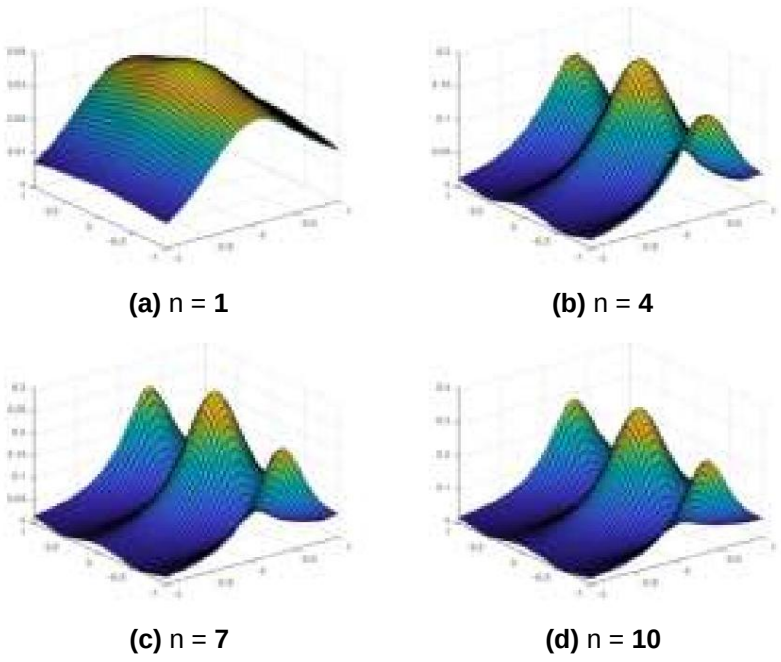


(a) n = **1** **(b)** n = **4**

(c) n = **7** **(d)** n = **10**

Abbildung 19. Mehrstufige quasi-spärliche Näherungen unter Verwendung eines Tschebyscheff-Gitters mit Ebene n **und eines** 2d- **Gauß-Kernels für die Testfunktion** F **3 .**

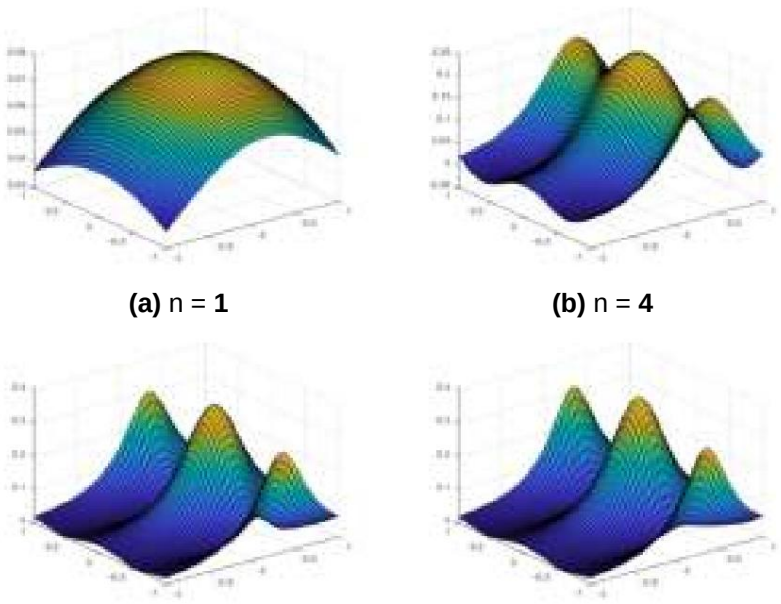
Machine Translated by Google



(a) n = **1** **(b)** n = **4**

(c) n = **7** **(d)** n = **10**

Abbildung 20. Mehrstufige quasi-spärliche Näherungen unter Verwendung eines gleichmäßig verteilten Gitters mit Ebene n **und einem** 2d- **Gauß-Kernel für die Testfunktion** F **4 .**



(a) n = **1** **(b)** n = **4**

(c) n = **7** **(d)** n = **10**

Abbildung 21. Mehrstufige quasi-spärliche Näherungen unter Verwendung eines Tschebyscheff-Gitters mit Ebene n **und eines** 2d- **Gauß-Kernels für die Testfunktion** F **4 .**

Als nächstes veranschaulichen wir die Anwendung unserer mehrstufigen quasi-sparse Interpolation mit 3d 3d 3d FF **und** F **in der Dimension** 3d **, d = 3, wie 2 , 3 , 4 zuvor einen Gauß-Kernel für die Testfunktionen** F **1 , eingeführt. Für** d = **3 bewerten wir die mehrstufige Interpolation unter Verwendung eines Rasters von 20 × 20 × 20 Punkten im Würfel [ÿ1,** 1] , **dem maximalen absoluten Fehler und den mittleren quadratischen Fehlern für das vorgeschlagene Interpolant für Ebenen bis zu** n = **7. Wieder beobachten wir, dass die 3. Die Tabellen 13–16 zeigen die Fehlerschätzungen mit Fehler mit der Ebene** n **für das mehrstufige Verfahren sowohl für gleichmäßig verteilte Raster als auch für Tschebyscheff-Punkte abnehmen. Die Fehler sind jedoch für Tschebyscheff-Punkte auf höheren Ebenen viel kleiner.**

Machine Translated by Google

Tabelle 13. Mehrstufige quasi-spärliche Interpolation mit einem Gauß-Kernel unter Verwendung gleichmäßig verteilter Gitter und Tschebyscheff-Gitter-Ergebnisse für die Testfunktion $F_{1}^{3D\ Model}$.

SGnodes-Freiheitsgrade		Gleich			Tschebyscheff		
		Max Fehler	Effektivwert Fehler	Zeit	Max Fehler	Effektivwert Fehler	Zeit
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	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

Tabelle 14. Mehrstufige quasi-spärliche Interpolation mit einem Gauß-Kernel unter Verwendung gleichmäßig verteilter Gitter und Tschebyscheff-Gitter Ergebnisse für die Testfunktion $F_{2}^{3D\ Model}$.

SGnodes-Freiheitsgrade		Gleich			Tschebyscheff		
		Max Fehler	Effektivwert Fehler	Zeit	Max Fehler	Effektivwert Fehler	Zeit
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	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

Tabelle 15. Mehrstufige quasi-sparse Interpolation mit einem Gaußschen Kernel unter Verwendung gleichmäßig verteilter Gitter und Tschebyscheff-Gitter-Ergebnisse für die Testfunktion $F_{3}^{3D\ Model}$.

SGnodes-Freiheitsgrade		Gleich			Tschebyscheff		
		Max Fehler	Effektivwert Fehler	Zeit	Max Fehler	Effektivwert Fehler	Zeit
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	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

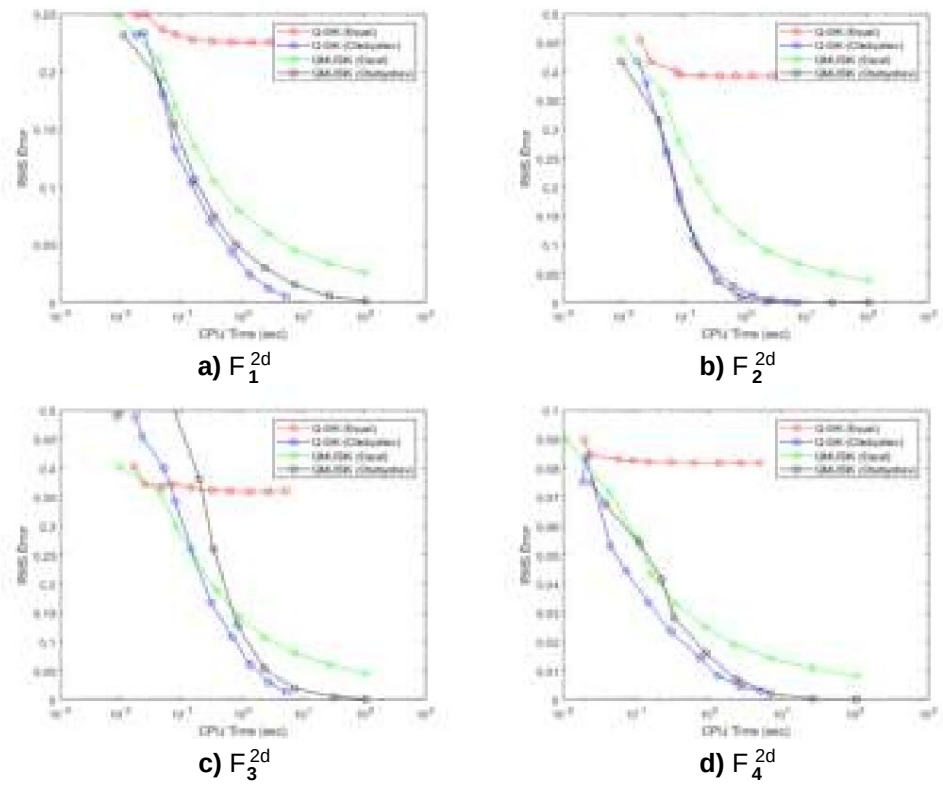
Tabelle 16. Mehrstufige quasi-spärliche Interpolation mit einem Gauß-Kernel unter Verwendung gleichmäßig verteilter Gitter und Tschebyscheff-Gitter-Ergebnisse für die Testfunktion $F_{4}^{3D\ Model}$.

SGnodes-Freiheitsgrade		Gleich			Tschebyscheff		
		Max Fehler	Effektivwert Fehler	Zeit	Max Fehler	Effektivwert Fehler	Zeit
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	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. Konvergenz mit Rechenzeit

In Abbildung 22 ist der quadratische Mittelwertfehler (RMS) gegenüber der Rechenzeit für dieselben Testfunktionen in d = **2 aufgetragen, und ähnliche Diagramme des RMS-Fehlers gegenüber der Zeit für die Testfunktionen in** d = **3 sind in Abbildung 23** aufgetragen. **Diese Abbildungen zeigen, dass die quasi-sparse Interpolation mit gleichmäßig verteilten Gittern nicht im Fehler konvergiert, wenn die Rechenzeit zunimmt. Andererseits nehmen die Fehler bei der quasi-sparse Interpolation mit Tschebyscheff-Punkten ziemlich schnell ab und konvergieren. Die mehrstufige quasi-sparse Interpolation mit einem gleichmäßig verteilten Gitter verbessert die Näherungsfehler und zeigt eine gewisse Konvergenz. Dennoch liefern Tschebyscheff-Punkte viel bessere Konvergenzergebnisse als gleichmäßig verteilte Punkte. Es ist auch interessant festzustellen, dass bei einer ähnlichen Rechenzeit (in Sekunden) die quasi-sparse Interpolation mit Tschebyscheff-Punkten bessere Ergebnisse liefert als die mehrstufige Methode, obwohl mehrstufige Methoden bei vergleichbarer Zeit nur auf**



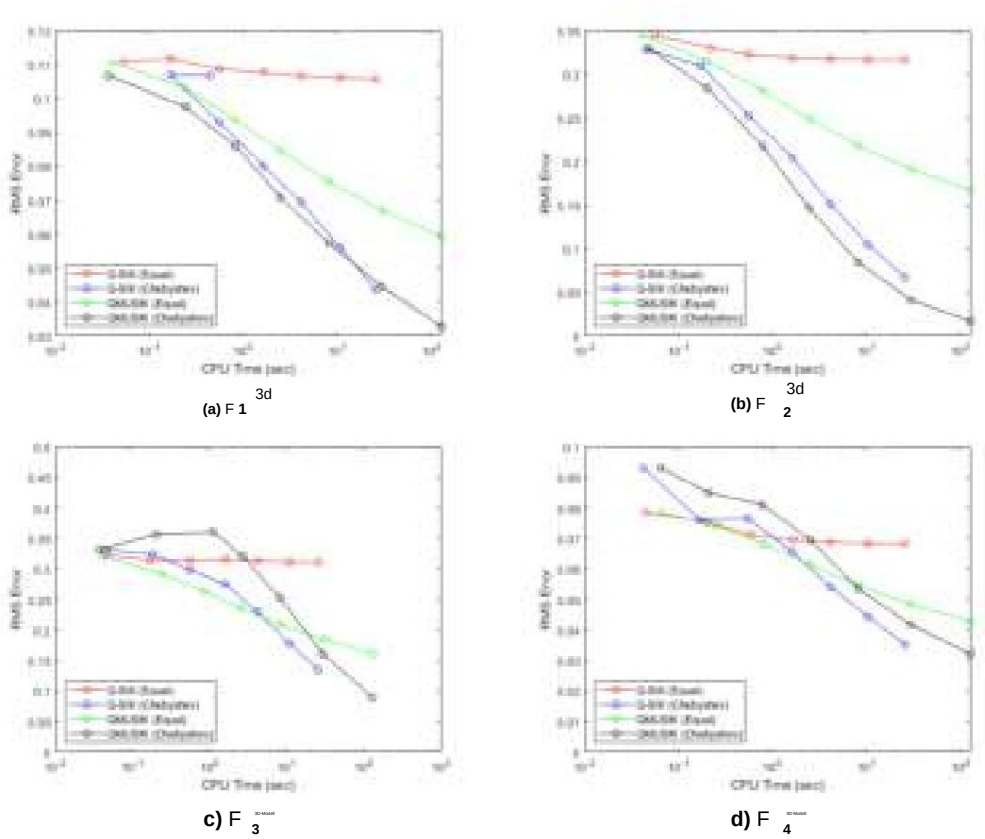
a) F_1^{2d} **b)** F_2^{2d}

c) F_3^{2d} **d)** F_4^{2d}

Abbildung 22. RMS-Fehler gegenüber der Rechenzeit für die Testfunktionen in d = **2.**

Abbildung 23 zeigt den RMS-Fehler in der Näherung gegenüber der Rechenzeit (in Sekunden) für die Testfunktionen in der Dimension d = **3. Hier beobachten wir in keinem der Algorithmen Konvergenz, da alle außer gleichmäßig verteilten Punkten mit quasi- spärlicher Interpolation einen abnehmenden Fehlertrend mit zunehmender Rechenzeit aufweisen. Hier wird auch eine bessere Leistung für Tschebyscheff-Punkte und Tschebyscheff-Punkte mit nur quasi-spärlicher Interpolation erzielt ,** die bei ähnlicher **Rechenzeit mit mehrstufigen Algorithmen konkurrieren** und besser sind als mehrstufige Algorithmen mit gleichmäßig verteilten Punkten.

Machine Translated by Google



(a) F **1** 3d **(b)** F **2** 3d

c) F **3** **d)** F **4**

Abbildung 23. RMS-Fehler gegenüber der Rechenzeit für die Testfunktionen in d = **3.**

10. Diskussion und Ergebnisse

In diesem Artikel haben wir einen Algorithmus für Quasi-Interpolation mit einem Gauß-Kernel auf Basis dünner Gitter untersucht. Wir haben festgestellt, dass die auf einem quasi-dünnen Kernel basierende Interpolation zwei- und dreidimensionale Funktionen recht gut approximiert. Allerdings ist die Konvergenz der Quasi-Interpolation nicht garantiert. Wir haben festgestellt, dass selbst bei großen Werten der Ebene n **der Gitter der mittlere quadratische Fehler der Approximation nicht gegen 0 konvergiert, wenn wir dünner Gitter mit gleichmäßigen Abständen verwenden. Wenn wir jedoch Tschebyscheff-Punkte verwenden, nimmt der mittlere quadratische Fehler der Approximation mit der Ebene n stetig ab. Bei größeren Werten von n erhalten wir mit Tschebyscheff-Punkten eine viel besse Allerdings sind die Tschebyscheff-Punkte entlang der Grenzen der Domäne dichter und in der Mitte spärlicher. Aus diesem Grund liefern Tschebyscheff-Punkte für kleinere n-Werte eine sehr schlechte Näherung in der Mitte ,** was aus den Diagrammen mit Tschebyscheff- **Näherungen mit** n = **1 oder** n = **2 ersichtlich ist .**

Aufgrund der Art und Weise, wie die Gitter Gÿ **aufgebaut sind, ist es möglich, den Algorithmus parallel zu implementieren,** um ihn schneller zu machen. Andernfalls **verlangsamt die wiederholte Auswertung des anisotropen Interpolanten an vielen Gitterpunkten für verschiedene** n -Werte die Ausführung. Wir können sehen, dass für d = **2 die Ebene** n = **10 nur 13313 verschiedene Punkte hat, diese Punkte aber viele Male wiederaufgerufen werden, was eine Gesamtzahl von 35851 Punkten ergibt, die für die Berechnung verwendet werden. Dies erhöht die Funktionsauswertung um fast das Dreifache. Für** d = **3 und die Ebene** n = **7 beträgt die Anzahl der eindeutigen Gitterpunkte nur 8961, aber die für die Berechnung verwendeten Punkte erreichen 38868. Dadurch erhöht sich die Zeitkomplexität des Algorithmus um ein Vielfaches; man sollte den Algorithmus entweder nur für parallele Berechnungen implementieren oder den Algorithmus verbessern, um das erneute Aufrufen von Gitterpunkten für verschiedene M**

In diesem Artikel haben wir auch mehrstufige quasi-spärliche kernelbasierte Interpolation auf der Basis gleichmäßig verteilter Gitter sowie spärlicher Gitter auf der Basis von Tschebyscheff-Punkten vorgeschlagen. Wir haben unsere vorgeschlagenen Methoden anhand einiger numerischer Testfunktionen veranschaulicht. Wir haben festgestellt, dass das vorgeschlagene mehrstufige Quasi-Verfahren besser abschneidet

Machine Translated by Google

Methode der spärlichen Interpolation. Allerdings ist die Rechenzeit für die Multilevel-Methode erheblich höher als für die einfache quasi-spärliche Interpolation. Dies liegt daran, dass bei der Multilevel-Methode an jedem spärlichen Gitterpunkt Restfunktionen ausgewertet werden müssen und mit zunehmender Ebene n **auch die Anzahl der spärlichen Gitterpunkte exponentiell zunimmt, was zu einer enormen Erhöhung der Rechenzeit führt. Positiv möchten wir erwähnen, dass es aufgrund der Natur der spärlichen Gitterkonstruktion möglich ist, den Algorithmus für parallele Berechnungen zu imp**

Darüber hinaus erfordert der mehrstufige quasi-sparse Algorithmus wesentlich weniger Rechenzeit als andere in der Literatur vorgeschlagene mehrstufige Methoden, da er nicht das Lösen eines linearen Gleichungssystems auf jeder Ebene der Näherungen mit den Restfunktionen erfordert . Aufgrund der Implementierung des quasi-sparse Algorithmus auf jeder Ebene weist die vorgeschlagene mehrstufige quasi-sparse Methode eine lineare Zeitkomplexität mit der Ebene n auf.

11. Schlussfolgerungen

In diesem Artikel wurde die Durchführbarkeit und die Vorteile der Verwendung mehrstufiger Quasi-Interpolationstechniken auf dünn besetzten Tschebyscheff-Gittern erfolgreich demonstriert. Im Vergleich zu herkömmlichen Methoden zeigte die mehrstufige quasi-dünn besetzte Interpolation mit Gauß-Kerneln vielversprechende Leistungskennzahlen. In diesem Artikel wurden auch die Komplexität und Herausforderungen der Implementierung erläutert und eine effiziente Möglichkeit zur Konstruktion dünn besetzter Gitter und zur Berechnung anisotroper Quasi-Interpolationen bereitgestellt. Während die Methode in niedrigeren Dimensionen, d. h. zwei und drei Dimensionen, effektiv war, traten mit zunehmender Rechenzeit und Komplexität Einschränkungen auf , was auf Bereiche für zukünftige Forschung und Optimierung hinweist.

Die numerischen Experimente lieferten aufschlussreiche Daten zur Leistungsfähigkeit dieser Technik und zeigten ihre Fähigkeit zu schnellerer Konvergenz mit Rechenzeit in bestimmten Umgebungen. Die Studie dient als grundlegende Ressource für zukünftige Forschungen, die darauf abzielen, mehrstufige Quasi-Interpolationstechniken für verschiedene Anwendungen einzusetzen, insbesondere bei hochdimensionalen Rechenproblemen.

Finanzierung: Diese Forschung erhielt keine externe Finanzierung.

Datenverfügbarkeitserklärung: Die Daten sind im Artikel enthalten.

Danksagungen: Der Autor dankt der University of Leicester für die Bereitstellung des akademischen Umfelds und der Ressourcen. Darüber hinaus gilt sein aufrichtiger Dank seinen Betreuern Ruslan Davidchack und Jeremy Levesley für ihre unschätzbare Anleitung und Betreuung. Besonderer Dank gilt auch der Taibah University für ihre großzügige finanzielle Unterstützung während seines Doktoratsstudiums.

Interessenkonflikte: Der Autor erklärt, dass kein Interessenkonflikt besteht.

Verweise

1. **Alsharif, F. Mehrstufige Quasi-Interpolation mit einem Gaußschen Kernel unter Verwendung von Tschebyscheff-Punkten – Numerische und theoretische Studien unter Verwendung des Ansatzes der radialen Basisfunktion. Dissertation, University of Leicester, Leicester, Großbritannien, 2023. [CrossRef]**
2. **Alsharif, F. Quasi-Interpolation auf Tschebyscheff-Gittern mit Randkorrekturen.** Computation **2024,** 12, **100. [CrossRef]**
3. **Franz, T.; Wendland, H. Mehrstufige Quasi-Interpolation.** IMA J. Numer. Anal. **2022,** 43, **2934–2964. [CrossRef]**
4. **Georgoulis, E.; Levesley, J.; Subhan, F. Multilevel Sparse Kernel-basierte Interpolation.** SIAM J. Sci. Comput. **2013,** 35, **815–832. [Querverweis]**
5. **Beatson, R.; Powell, M. Univariate multiquadrische Approximation: Quasi-Interpolation auf gestreute Daten.** Constr. Approx **1992, 8, 275–288. [CrossRef]**
6. **Wu, Z.; Robert, S. Formerhaltende Eigenschaften und Konvergenz der univariaten multiquadrischen Quasi-Interpolation.** Acta Math. Appl. Sin. **1994,** 10, **441–446. [CrossRef]**
7. **Wu, Z.; Liu, J. Verallgemeinerte Strang-Fix-Bedingung für Quasi-Interpolation gestreuter Daten.** Adv. Comput. Math. **2005,** 23, **201–214. [Querverweis]**
8. **Floater, MS; Iske, A. Mehrstufige Interpolation gestreuter Daten unter Verwendung kompakt unterstützter radialer Basisfunktionen.** J. Comput. Appl. Math **1996,** 73, **65–78. [CrossRef]**
9. **Hales, SJ; Levesley, J. Fehlerabschätzungen für mehrstufige Approximation mit polyharmonischen Splines.** Numer. Algorithms **2002,** 30, **1–10. [Querverweis]**
10. **Hubbert, S.; Levesley, J. Konvergenz der mehrstufigen stationären Gaußschen Quasi-Interpolation.** arXiv **2017, arXiv:1609.02457.**
11. **Franke, R. Interpolation gestreuter Daten: Tests einiger Methoden.** Math. Comput. **1982,** 38, **181–200.**

Machine Translated by Google

12. **Fasshauer, GE** Meshfree Approximation Methods with MATLAB of Interdisciplinary Mathematical Sciences; **World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd.: Hackensack, NJ, USA, 2007; Band 6.**
13. **Beatson, R.; Davydov, D.; Levesley, J. Fehlergrenzen für anisotrope rbf-Interpolation.** J. Approx. Theory **2010,** 162, **512–527.** [Querverweis]
14. **Casciola, G.; Montefusco, LB; Morigi, S. Die regularisierenden Eigenschaften anisotroper radialer Basisfunktionen.** Angewandte Mathematik, Computer. **2007,** 190, **1050–1062.** [CrossRef]

Haftungsausschluss/Anmerkung des Herausgebers: Die in allen Veröffentlichungen enthaltenen Aussagen, Meinungen und Daten sind ausschließlich die der einzelnen Autoren und Mitwirkenden und nicht die von MDPI und/oder den Herausgebern. MDPI und/oder die Herausgeber lehnen jegliche Verantwortung für Personen- oder Sachschäden ab, die aus den im Inhalt erwähnten Ideen, Methoden, Anweisungen oder Produkten resultiere

Machine Translated by Google

Berechnung

MDPI

Artikel

Mithilfe von Machine-Learning-Algorithmen eine prädiktive Modell zur Berechnung der maximalen Auslenkung horizontal Gebogene Stahl-I-Träger

Elvis Ababu 1,*, George Markou 1,2,* und Sarah Skorpen[1]

[1] Fakultät für Bauingenieurwesen Hatfield Campus, Universität Pretoria, Pretoria 0028, Südafrika;
[2] sarah.skorpen@up.ac.za Fakultät für Bauingenieurwesen, Neapolis University Pafos, Danais Avenue, Paphos
* Korrespondenz: u17061785@tuks.co.za (EA); george.markou@up.ac.za (GM)

Zusammenfassung: Horizontal gekrümmte Stahl-I-Träger zeigen ein kompliziertes mechanisches Verhalten, da sie einer Kombination aus Biegung, Scherung und Torsion ausgesetzt sind, die je nach Geometrie des jeweiligen Trägers variiert. Das Verhalten dieser Träger ist daher ziemlich schwer vorherzusagen, da sie aufgrund von Biegung, Scherung, Torsion, seitlichem Torsionsknicken oder einer Kombination dieser Arten von Versagen versagen können. Dies erfordert daher die Verwendung komplizierter nichtlinearer Analysen, um ihr Verhalten genau zu modellieren. Derzeit bieten internationale Konstruktionsnormen nur wenig Anleitung in Bezug auf die Gebrauchstauglichkeitsgrenzzustände horizontal gekrümmter Stahl-I-Träger. Im Rahmen dieser Forschung wurde ein experimentell validierter Datensatz erstellt und zum Trainieren zahlreicher Algorithmen für maschinelles Lernen (ML) zum Vorhersagen der Durchbiegung in der Spannweite bei Versagen sowie der Versagenslast zahlreicher horizontal gekrümmter Stahl-I-Träger verwendet. Laut der experimentellen und numerischen Untersuchung erwies sich das Modell des tiefen künstlichen neuronalen Netzwerks als das genaueste, wenn es zur Vorhersage des Validierungsdatensatzes verwendet wurde, wobei ein mittlerer absoluter Fehler von 6,4 mm (16,20 %) beobachtet wurde. Diese Genauigkeit übertraf die des zweiten Satzes von Castigliano bei weitem, bei dem der mittlere absolute Fehler 49,84 mm (126 %) betrug . Das tiefe künstliche neuronale Netzwerk war auch in der Lage, die Bruchlast mit einem mittleren absoluten Fehler von 30,43 kN (22,42 %) abzuschätzen . Dieses Vorhersagemodell, das das erste seiner Art in der internationalen Literatur ist, kann von professionellen Ingenieuren

Schlüsselwörter: Baustatik, Baustahl, gebogene Träger, maschinelles Lernen, Finite-Elemente -Modellierung

check for updates

Zitat: Ababu, E.; Markou, G.; Skorpen, S. Entwicklung eines prädiktiven Modells zur Berechnung der maximalen Durchbiegung horizontal gekrümmter Stahl-I-Träger mithilfe von Algorithmen des maschinellen Lernens. Computation **2024,** 12, **151. https://doi.org/ 10.3390/ calculation12080151**

Wissenschaftliche Herausgeber: Manolis Georgioudakis, Vagelis Plevris und Mahdi Kioumarsi

Erhalten: 6. März 2024
Überarbeitet: 26. Mai 2024
Akzeptiert: 27. Mai 2024
Veröffentlicht: 24. Juli 2024

Copyright: © 2024 bei den Autoren. Lizenznehmer MDPI, Basel, Schweiz.

Dieser Artikel ist ein Open Access-Artikel vertrieben unter den Bedingungen und Bedingungen der Creative Commons Namensnennungslizenz (CC BY) (https:// creativecommons.org/licenses/by/ 4.0/).

1. Einleitung

Obwohl es gekrümmte Träger schon seit Jahrhunderten gibt, gab es nur wenige Richtlinien **für die Konstruktion gekrümmter Stahlelemente. Die Herstellung gekrümmter Stahlträger begann im 19. Jahrhundert, als Stahlbauteile in gekrümmte Profile gegossen oder aus Komponenten zu gekrümmten Profilen zusammengesetzt wurden .** Die Fertigung wurde weiterentwickelt und **in Situationen, in denen die Restspannungen besonders groß waren oder kleinere Radien erforderlich waren, wurde Dreiwalzenpressen oder Induktionsbiegen eingesetzt [1]. Der Großteil des im Bauwesen verwendeten Stahls wird jedoch durch Rollenbiegen geformt, was ein Kaltverfahren ist. Beim Biegen offener Profile im Kaltverfahren üben die Flansche eine erhebliche Kraft auf den Steg aus, was zu lokalem Beulen führen kann .** Daher werden für **Profile, die anfällig für lokales Beulen sind, zusätzliche Rollen**

Horizontal gekrümmte Träger unterliegen aufgrund ihrer Formgebung erheblichen Eigenspannungen. Ein bei Raumtemperatur gewalztes Stahlbauteil erfährt mechanische Eigenspannungen (Druck- und Zugspannungen), die die Zugfestigkeit des Bauteils durch Erhöhung seiner Flexibilität verringern, was wiederum zu einer Verringerung der Knickfestigkeit führt [2]. Zugeigenspannungen sind be

Machine Translated by Google

von Ermüdungsbrüchen und Spannungsrisskorrosion, während Druckeigenspannungen einen gewissen Nutzen haben können, da sie die Entstehung und Ausbreitung von Rissen vermindern können [3].

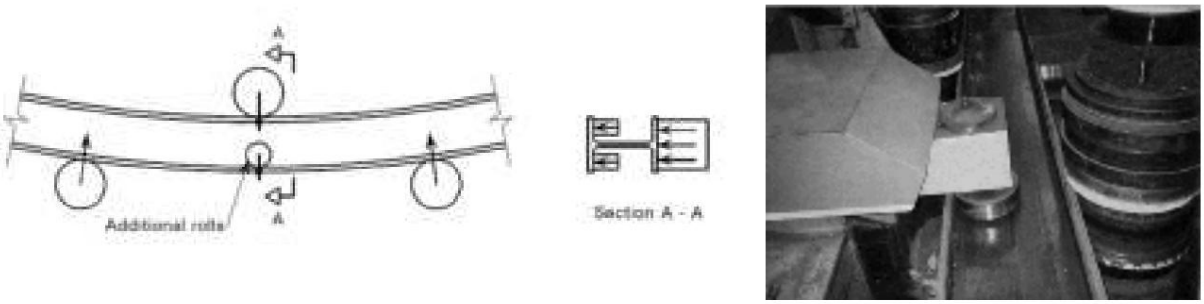


Abbildung 1. Zusätzliche Rollen zur Vermeidung von Stegbeulen an einem I-Profil [4].

Die größte Herausforderung bei horizontal gekrümmten Trägern besteht darin, dass der Träger aufgrund seiner Geometrie bei Anwendung normaler Lasten gleichzeitig einer komplexen Kombination aus Biegung, Scherung und Torsion ausgesetzt ist. Torsionsmomente lassen sich anhand der ausgelenkten Form visualisieren, da der Druckflansch dazu neigt, seitlich vom Krümmungsmittelpunkt weg auszulenken **[5]. Wenn Biege- und Torsionsmomente gleichzeitig auf einen Träger angewendet werden, neigt die Kopplung dieser Kräfte dazu, die Tragfähigkeit des Bauteils zu verringern .** Untersuchungen haben ergeben, dass das Verhalten horizontal gekrümmter Träger vom R/L -Verhältnis **abhängt , das auch als Spannwinkel dargestellt werden kann. Es wurde festgestellt, dass der Träger bei einem Spannwinkel von weniger als** 1° **ähnlich wie ein gerader Träger reagiert und von Biegung dominiert wird. Bei einem Spannwinkel von mehr als 20° wird das Trägerverhalten des Trägers hauptsächlich von Torsion dominiert. Bei einem , Die Spannwinkel zwischen** 1° **und 20° wirken sich sowohl Biegung als auch Torsion erheblich auf das Verhalten des Trägers** aus **[6].**

Bei geraden I-Trägern lässt sich seitliches Drillknicken leicht anhand der seitlichen Verschiebung und Drehung des Bauteils erkennen. Bei gekrümmten I-Trägern ist dieses Verhalten jedoch aufgrund der auftretenden Torsionsmomente immer vorhanden. Dieses Verhalten wurde von Lee et al. [7] als seitliches Torsionsvertikalverhalten bezeichnet . Aufgrund der anfänglichen Krümmung, die der anfänglichen Geradheit bei Stützen ähnelt, kann daher bei gekrümmten Stahl-I-Trägern möglicherweise kein seitliches Drillknicken vom Gabelungstyp beobachtet werden. Es wurde jedoch beobachtet, dass wie bei geraden Trägern die Biegefestigkeit gekrümmter Träger bei Bauteilen abnimmt, die anfällig für seitliches Drillknicken sind [6]. Der Effekt des seitlichen Drillknickens ist vernachlässigbar, wenn der Winkel zwischen den Torsionsbeschränkungen weniger als 22,5° beträgt . Sollte dieser Winkel größer als 22,5° sein, empfiehlt das American Institute of Steel Construction (AISC), den Träger als geraden Träger mit einem angepassten Biegedrillknickmodifizierungsfaktor zu behandeln, der die Krümmung berücksichtigt.

Im Laufe der Jahre haben zahlreiche Forscher versucht, analytische Formeln für horizontal gekrümmte Bauteile zu entwickeln . Allerdings haben sich nur wenige auf Gleichungen für Durchbiegung und Drehung konzentriert. Wong [8] modifizierte Castiglianos zweiten Satz, der ursprünglich für gerade Balken entwickelt wurde, und machte ihn auf Der zweite Satz von Castigliano ist eine Dehnungsenergiemethode, mit der die Durchbiegung berechnet wird. Die generierte Gleichung ist in Gleichung (1) zu sehen. Cd kann aus Abbildung 2 berechnet werden. **Dabei ist zu beachten, dass Gleichung (1) auf Balken beschränkt ist, die beidseitig eingespannt sind und im Mittelpunkt eine Punktlast ansetzen. Dahlberg [9] hat verschiedene Gleichungen erstellt, die für verschiedene Rand- und Lastbedingungen verwendet werden können. Diese Gleichungen sind jedoch recht schwierig umzusetzen und werden daher in der Praxis selten verwendet. Darüber hinaus hat Dahlberg [9] die Formel nicht mit experimentellen oder Finite-Element-Ergebnissen verglichen.**

$$\ddot{y}0{,}5\ddot{y} = \frac{Pr^3}{EI}Cd \qquad (1)$$

Machine Translated by Google

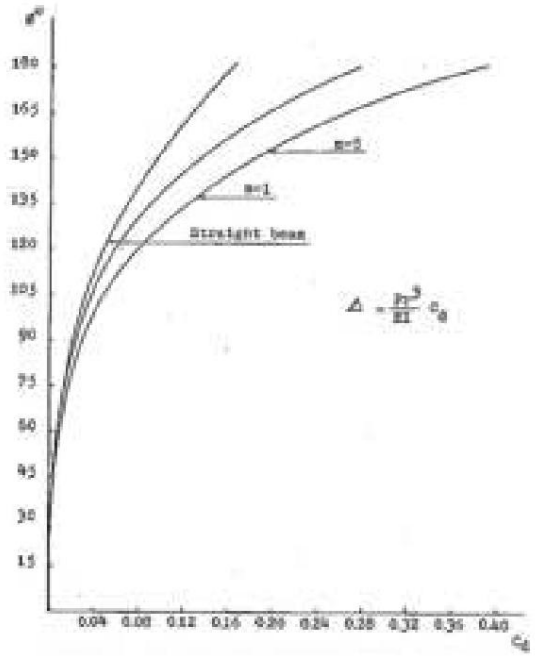


Abbildung 2. Variation der Durchbiegungskoeffizienten mit dem Spannweitenwinkel für gekrümmte Träger, die mit einer konzentrierten Last belastet sind **[8].**

Der zweite Satz von Castigliano kann auch zur Ermittlung der Drehung gekrümmter Balken angewendet werden . Dies ist jedoch oft noch aufwändiger als die Gleichungen, die für die Durchbiegung erforderlich sind . Eine vereinfachte Gleichung wird jedoch von AISC bereitgestellt (Gleichung (2)). Das Symbol h0 stellt die Höhe des Stabes dar und ymax die maximale Verschiebung des Stabes [6].

Diese Gleichung wird mithilfe der M/R-Methode abgeleitet, die häufig bei der Konstruktion horizontal gekrümmter Balken verwendet wird. Dabei wird der gekrümmte Balken als gerader Balken mit einer Länge modelliert, die der Länge des gekrümmten Elements entspricht. Das Torsionsmoment wird dann durch eine separate Gleichung berücksichtigt:

$$\text{ymax} = \tan\text{y1} \quad \frac{2\text{ymax}}{\text{h0}} \qquad (2)$$

Bei der Herleitung dieser Formel wurden verschiedene Annahmen getroffen, unter anderem, dass die Dicke jedes Plattenelements im Verhältnis zur Breite klein ist, die wiederum im Verhältnis zur Spannweite klein ist. Die Spannungen aufgrund von Verzug werden als vernachlässigbar angenommen.

Die Modellierung gekrümmter Balken in FEM führt zu weiteren Komplexitäten. Die meisten kommerziell erhältlichen Softwareanwendungen modellieren gekrümmte Balken als eine Reihe gerader Balken, was für die meisten Konstruktionszwecke eine ausreichende Genauigkeit bietet. Wenn das Modell ein signifikantes nichtlineares Verhalten aufweist, ist eine Konvergenzstudie erforderlich, um die Anzahl der erforderlichen Elemente zu optimieren, während die Entwicklung von Torsion den Analyseprozess weiter verkompliziert. Herkömmliche finite Elemente (FE) für Balken können nicht Dies sind gekrümmte Stahl-I-Träger, die aufgrund der Existenz einer Wölbkraft eine Torsion erfahren. Herkömmliche Balken-FEs berücksichtigen nur die St.-Venant-Steifigkeit, was zu numerischen Fehlern bei der Berechnung der Torsionsverformung führt. Aktuelle Balken-FEs, die die Wölbungssteifigkeit berücksichtigen, sind verfügbar; diese werden jedoch selten in kommerziell erhältliche verfügbare Software und sind auch tendenziell weniger genau. Dreidimensionale FEs wie Schale oder Festkörperelemente werden häufig von Forschern verwendet, die versuchen, das Verhalten gekrümmter Balken zu modellieren. Diese Elemente stellen das Torsionsverhalten genau dar, ohne dass zahlreiche Torsionskonstanten erforderlich sind. Frühere Forscher fanden heraus, dass die Verwendung von Festkörper-FEs in Verbindung mit nichtlinearen Analysen zu genauen Schätzungen der experimentellen Ergebnisse sowohl für die Bruchlast als auch für die Durchbiegung in der Spannweite führte **([10–13]).**

Machine Translated by Google

Die Kombination aus Biegung und Scherung sowie Verschiebungen und Verdrehungen verursacht Biegewirkungen zweiter Ordnung in der Ebene eines gekrümmten I-Trägers. Mit zunehmender Belastung nehmen diese Wechselwirkungen schnell zu und können letztendlich zu frühem nichtlinearen Verhalten und Nachgeben führen, was zu einer Verringerung der maximalen Tragfähigkeit des Trägers führt. Dies macht daher die Verwendung nichtlinearer Analysen bei der Analyse horizontal gekrümmter Träger erforderlich, im Gegensatz zu allgemeinen statischen (linearen) Analysen. Angesichts der Komplexität des Problems wird auch die Verwendung von FEs empfohlen, die in 3D-numerische Materialmodelle integriert sind, wie in dieser Forschungsarbeit.

2. Algorithmen des maschinellen

Lernens In diesem Abschnitt werden kurz die verschiedenen Verwendungsmöglichkeiten des maschinellen Lernens (ML) zur Entwicklung von Formeln vorgestellt, die die Konstruktion oder mechanische Untersuchung von Bauwerken des Tiefbaus ermöglichen. ML und künstliche Intelligenz (KI) wurden in den letzten Jahrzehnten in verschiedenen Bereichen als effiziente Tools zur Vorhersage von Analyseergebnissen für technische Probleme eingesetzt, die als rechenintensiv und analytisch sehr kompliziert gelten. Der Einsatz von ML hat die Notwendigkeit umfangreicher numerischer Analysen weitgehend überflüssig gemacht, da es die Fähigkeit bietet, angemessene Schätzungen der gewünschten Ergebnisse zu liefern. Das Hauptproblem besteht jedoch darin, dass zum Trainieren eines ML-Algorithmus ein ausre

Daher besteht die Hauptaufgabe der meisten Forschungsarbeiten in dieser Phase darin, Datensätze für verschiedene Probleme im Zusammenhang mit Stahlbeton und Stahl zu generieren, und zwar entweder mithilfe physikalischer oder validierter numerischer Experimente. Eine Metaanalyse verschiedener Fallstudien wurde von Markou et al. [14] vorgestellt. Das vorliegende Dokument konzentrierte sich jedoch auf ein einzelnes mechanisches Reaktionsproblem, um eine Lösung für ein Problem zu finden, das in der Vergangenheit noch nie gelöst wurde . Es ist wichtig zu beachten, dass alle ML-Algorithmen, die zum **Training, Testen und Validieren für die Anforderungen dieser Forschungsarbeit verwendet wurden,** auf **GitHub** zu finden sind **(https://github.com/nbakas/nbml/, abgerufen am 21. Juni 2023), durch Herunterladen** der Freeware nbml. Darüber hinaus sind die Datensätze, die für die Zwecke **dieser Forschungsarbeit entwickelt wurden,** unter folgendem Link zu finden **(https://github.com/nbakas/ nbml/tree/a0d27c94dd590688815180ebf6428963a24ca245/Datensätze, abgerufen am 1. Juli 2024), während die vorgeschlagenen Modelle direkt vom Leser entwickelt werden können.**

In dieser Forschung wurden verschiedene ML-Algorithmen verwendet, nämlich lineare Regression (LR), polynomische Regression mit Hyperparameter-Tuning (POLYREG-HYT), Hyperparameter-Tuning von extremem Gradient Boosting (XGBoost-HYT-CV) und parallele Deep-Learning-künstliche neuronale Netze mit Hyperparameter-Tuning (DANN-MPIH-HYT). Die LR-Methode wurde als Vergleichspunkt für die anderen ML-Algorithmen verwendet (Markou, Bakas, Papadrakakis und Chatzichristofis [14]).

POLYREG-HYT eignet sich zur Generierung relativ genauer Formeln in geschlossener Form und wird zur Entwicklung von Vorhersagemodellen in Klassen höherer Ordnung verwendet. Diese relativ einfache Methode liefert eine Formel, die auf der nichtlinearen Kombination aller unabhängigen Variablen basiert [14]. Dieses Modell basiert auf der Erstellung nichtlinearer Terme, die auf den unabhängigen Variablen bis zum dritten Grad basieren. Der Algorithmus wählt dann die nichtlinearen Merkmale aus, die dem minimalen Fehler entsprechen. Ursprünglich wurde diese Methode von Gravett et al. [15] verwendet, die einen vereinfachten Ansatz zur Bestimmung der Anzahl der während des Trainings zu verwendenden Merkmale verwendeten. Anschließend wurde dieser Algorithmus verbessert und die Verwendung von Hyperparameter-Tuning eingeführt, wie in Markou, Bakas, Papadrakakis und Chatzichristofis [14] gezeigt, die den vorgeschlagenen ML-Algorithmus vorführen, der für die Anforderungen dieser Fors

XGBoost-HYT-CV ist eine Modifikation des derzeit Open-Source -Algorithmus Extreme Gradient Boosting. Das ursprüngliche XGBoost ist eine Gradient-Boosting-Bibliothek für ML-Probleme wie Klassifizierung und Regression. Der Algorithmus implementiert das Gradient-Boosting-Framework , das schnell und skalierbar sein soll und sich daher für große Datensätze eignet [1

Zur Verbesserung des aktuellen XGBoost-Algorithmus wurde Hyperparameter-Tuning verwendet. Dieses Tuning lieferte im Vergleich zu Deep Learning genaue Ergebnisse und erfordert

Machine Translated by Google

geringerer Rechenaufwand [14]. Ein Vorteil dieses Algorithmus ist seine Fähigkeit, fehlende Werte in den Trainings- und Testdatensätzen zu finden und zu ersetzen.

Algorithmus 1: Merkmalsauswahlalgorithmus für die polynomische Regression [14]

Daten: X, y, mf (maximale Anzahl an Merkmalen)
Ergebnis: Initialisiere [o] = 1 mit dem konstanten Term ÿ [p]
Lösen Sie das lineare System **×** a = y, wobei **X** ÿ X, mit [o] Spalten.
X. Berechnen Sie Regressionsfehler e1.
Als optimaler Fehler wird eˆ ÿ e1 festgelegt.
Setze als optimale Indizes [oˆ] ÿ [o]. **für**
i ÿ [1, 2, . . . , l] **wiederhole**
Wähle
einen Index d ÿ [p] nach dem Zufallsprinzip.
wenn d ÿ [o]
dann r ÿ U(0,
1) **wenn**$r_1 r_2$<
dann Wähle zufällig od ÿ [p] : od ÿÿ [o] [o]
ÿ ([o] \ d) ÿ od ; **sonst**
[o] ÿ [o] \ d;
Ende
anders
wenn o < mf **dann**
[o] ÿ [o] ÿ d;
anders
Wählen Sie zufällig od ÿ [o] [o]
ÿ ([o] \ od) ÿ d;
Ende
Ende
bis Rang (X).) ÿ o;
Lösen Sie das lineare System **X × a** = y.
Berechnen Sie den Regressionsfehler
ei . **if** ei < eˆ
then eˆ
ÿ ei [oˆ] ÿ
[o]
else [o] ÿ
[oˆ]
end end

Der letzte verwendete Algorithmus war DANN-MPIH-HYT, der durch die Verwendung paralleler Verarbeitung sowohl mit kleinen als auch mit großen Datensätzen trainieren kann. Der Algorithmus wurde so programmiert, dass er sowohl mit Computerprozessoren (CPUs) als auch mit Grafikprozessoren (GPUs) trainiert werden kann, und die Verwendung verteilter Berechnungen wurde ebenfalls ermöglicht. Dies führte zu schnelleren Trainings- und Testzeiten bei der Verwendung des Algorithmus, da Deep Learning bei Trainingsprozessen bekanntermaßen besonders langsam ist, insbesondere in Fällen, in denen große Datensätze verwendet werden [14]. Eine Kombination aus Horovod und MPI wurde verwendet, um das numerische Verfahren zu optimieren. Die Mit Horovod kann man ein einzelnes GPU-Trainingsskript nehmen und es parallel auf mehreren GPUs laufen lassen. Durch die Verwendung von Message-Passing-Interface-Befehlen (MPI) wird jeder Prozess auf einfache Weise initialisiert und erhält seinen MPI-Rang zugewiesen, was im Vergleich zu anderen Ansätzen mit weniger Codeänderungen erreicht wird. Verschiedene experimentelle Algorithmen wurden von Markou, Bakas, Papadrakakis und Chatzichristofis **[14] auf dem** Cyclone-Supercomputer **getestet , wobei PyTorch für Computer Vision sowie Regressionsaufgaben verwendet wurde, was die Effizienz der Datenparallelität hervorho**

Machine Translated by Google

ML in Kombination mit FEM-Modellierung wurde in den letzten Jahren verwendet, um genaue Formeln für verschiedene technische Anwendungen zu erstellen. Markou und Bakas [16] erstellten Formeln zur Bestimmung der Scherkapazität von schlanken Betonträgern ohne Bügel. In ihrer Forschungsarbeit wurden insgesamt 35.849 Träger erstellt und vier ML-Algorithmen verwendet, nämlich lineare Regression, polynomische Regression, XGBoost und Deep-Learning-Neuralnetze. In dieser Studie wurde festgestellt, dass der XGBoost-Algorithmus mit einem Fehler von 5,82 % der genaueste war. Eine ähnliche Methodik wurde in [17–20] verfolgt, wo Entwurfsformeln und Vorhersagemodelle in Bezug auf Stahlbeton- und Stahlbauprobleme entwickelt wurden.
In diesem Zusammenhang validiert die aktuelle Forschungsarbeit numerische Modelle anhand von Ergebnissen aus Experimenten, die an gekrümmten Stahl-I-Trägern in den Laboren der Universität Pretoria durchgeführt wurden. Anschließend wird die Entwicklung eines relativ großen Datensatzes durch nichtlineare Analysen beschrieben. Der nächste Schritt umfasst die Entwicklung der vorgeschlagenen Vorhersagemodelle, die im vorliegenden Dokument validiert und vorgestellt werden.

3. Experimentelle Untersuchung

Es wurden experimentelle Studien durchgeführt, um die Finite-Elemente-Modelle zu validieren , die zur Entwicklung der Datensätze für die Anforderungen dieser Forschungsarbeit verwendet wurden. Experimente wurden auch verwendet, um den geeigneten Finite-Element-Typ zu bestimmen, der die genauesten Ergebnisse hinsichtlich der Durchbiegung und Drehung des I-Trägers liefern würde. Die Experimente umfassten die Untersuchung eines horizontal gekrümmten Stahl-I-Trägers (IPE 100), bei dem die beiden Enden vollständig fixiert waren und in der Mitte eine vertikal nach oben gerichtete Last aufgebracht wurde. Die gemessenen Ergebnisse waren vertikale Durchbiegung in der Mitte, Drehung in der Mitte und an Viertelpunkten sowie Dehnungen in der Mitte und a

Der analysierte Balken war ein 3,5 m langer IPE100-Balken. Dieser Balken wurde ausgewählt, um die angewandten Kräfte zu minimieren und so eine sichere Arbeitsumgebung zu gewährleisten. Abbildung 3 zeigt eine vereinfachte schematische Darstellung, wie der Balken gestützt und belastet wurde.

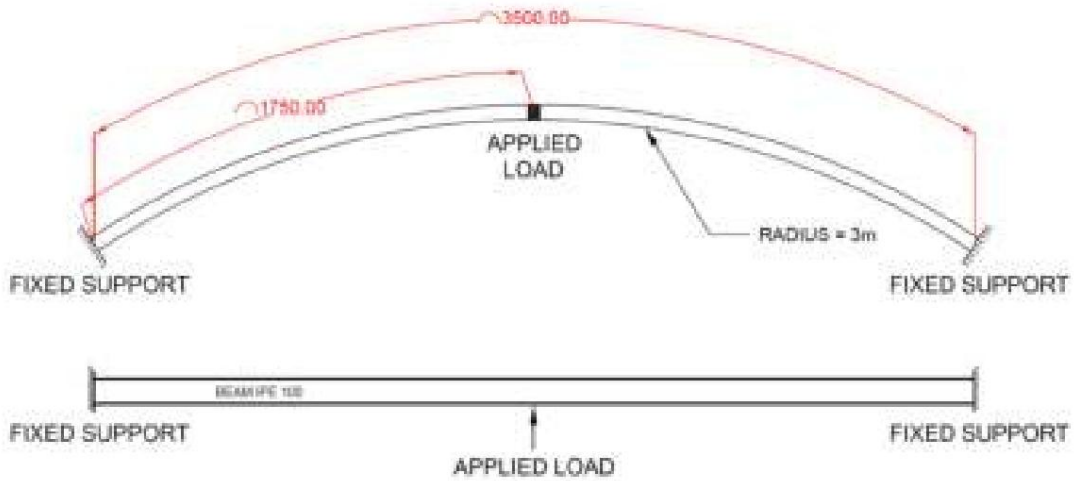


Abbildung 3. Grundlegendes Schema des Versuchsaufbaus mit gebogenem Balken (alle Abmessungen sind in Millimetern angegeben).

Um eine vollständig feste Stütze zu schaffen, wurde der Querschnitt des IPE 100-Trägers auf zwei 12 mm dicke Platten geschweißt. Diese 12 mm dicken Platten wurden dann auf einen steifen Träger geschweißt, der dann mit M24 Gr8.8-Schrauben auf dem Testboden verschraubt wurde. Das gesamte System wurde als starr angenommen und an dieser Stelle wurden minimale Auslenkungen und Drehungen erwartet. Zusätzliche lineare variable Differentialtransformatoren (LVDTs) wurden an den Stützen angebracht. Eine schematische Darstellung der Stützbedingungen sowie ein Foto sind in den

Machine Translated by Google

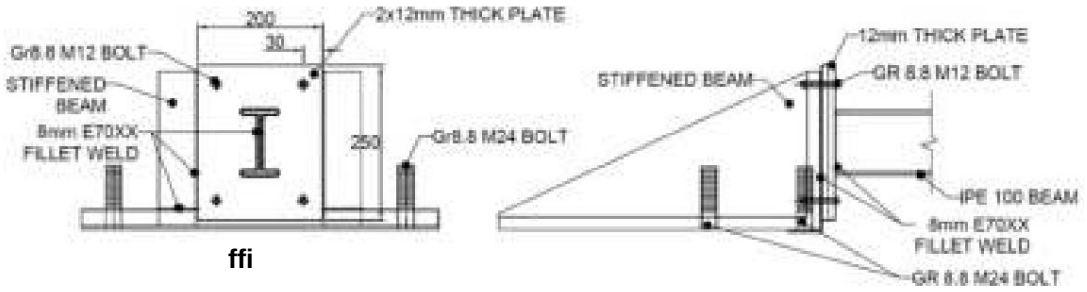


Abbildung 4. Schematische Darstellung des Experiments mit fester Unterstützung (alle Abmessungen sind in Millimetern angegeben).



Abbildung 5. Experiment mit fester Unterstützung.

Es wurde ein einfacher Lastanwendungsmechanismus verwendet, der einen schnelleren und einfacheren Testaufbau ermöglichte. Der Balken wurde mit einer 40 mm dicken Stahlstange mit flacher Kante belastet. Diese flache Kante wurde mithilfe eines Brückenkrans auf den Balken geladen. Die Lastmesszelle berechnete dann alle 100 Millisekunden die auf den Balken einwirkende Last, was als ausreichende Daten für Analysezwecke angesehen wurde. Die Belastungsvorrichtung hatte eine Kapazität von 50 Tonnen, was für die erwartete Bruchlast des Balkens ausreichend war. Die Stahlstange ermöglichte es dem Balken außerdem, sich am Punkt der Lastanwendung frei zu drehen, was angesichts der erwarteten großen Drehungen dieses horizontal gekrümmten Balkens erforderlich

LVDTs wurden verwendet, um die Strahlauslenkung nur in vertikaler Richtung zu messen. Es wurden zwei verschiedene LVDT-Typen verwendet, einer mit einer Reichweite von 250 mm, der an den Stützen platziert wurde, und der andere mit einer Reichweite von 1000 mm, der in der Mitte der Spannweite platziert wurde. Der LVDT in der Mitte der Spannweite wurde 160 mm vom Punkt der Lastanwendung entfernt platziert, sodass Messungen an derselben Position wie die Dehnungsmessstreifen durchgeführt werden konnten. Die Dehnungsmessstreifen wurden versetzt, um nicht von der angewendeten Punktlast beeinflusst zu werden. LVDTs wurden aufgrund ihrer hohen Genauigkeit und guten Langzeitstabilität im Gegensatz zu Potentiometern verwendet, die eine geringere Genauigkeit und Präzision aufweisen, aber normalerweise vielseitiger sind. Eine schematische Darstellung der Platzierung der LVDTs ist in Abbildung 6 zu seh

Neigungsmesser wurden verwendet, um die Drehung entlang des Strahls sowie quer zum Strahl zu messen. Es wurden zwei zweiachsige Neigungsmesser verwendet. Die verwendeten Neigungsmesser nutzten einen elektrolytische Wasserwaage, die die Neigung entlang zweier Achsen (Nick- und Rollwinkel) messen konnte . Ein Neigungsmesser wurde 100 mm vom Punkt der Lastanwendung entfernt, aber auf der gegenüberliegenden Hälfte des Balkens platziert, wo der LVDT und die Dehnungsmessstreifen platziert waren, und der andere wurde am Viertelpunkt derselben Hälfte platziert. Eine schematische Darstellung der Position der Neigungsmesser ist in Abbildung 7 zu sehen.

Machine Translated by Google

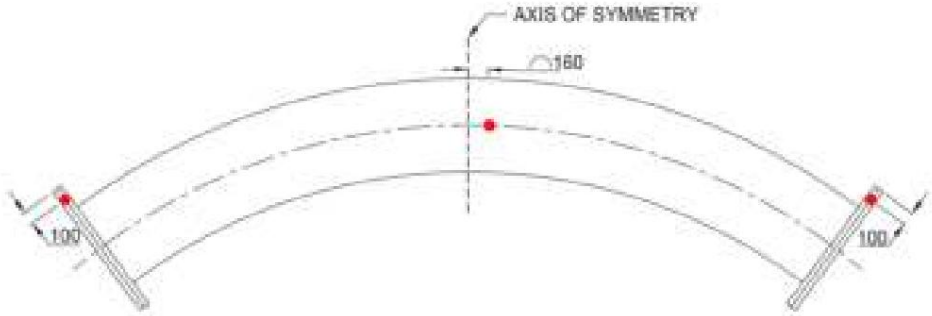


Abbildung 6. Schematische Darstellung der Punkte der Verschiebungsmessung (alle Abmessungen sind in Millimetern angegeben).

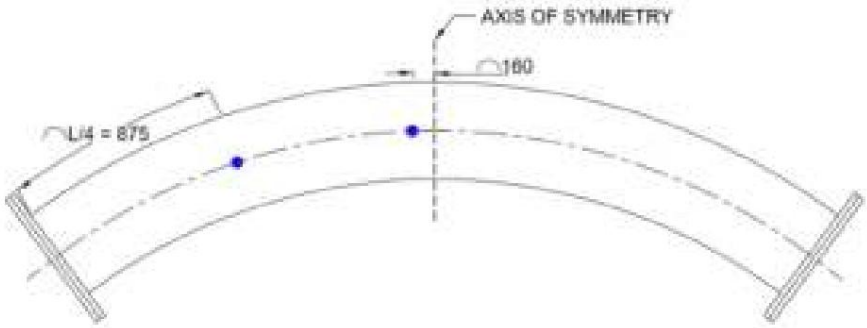


Abbildung 7. Schematische Darstellung der Rotationsmesspunkte (alle Maße sind in Millimetern angegeben).

Der Großteil des Aufbaus der Instrumente bestand darin, die Dehnungsmessstreifen genau zu platzieren . Dehnungsmessstreifen sind sehr empfindlich. Daher muss die Oberfläche, auf der ein Dehnungsmessstreifen angebracht wird, vor der Platzierung **des Dehnungsmessstreifens extrem glatt und frei von allen Verunreinigungen sein .** Die Platzierung dieser Dehnungsmessstreifen war entscheidend, damit der Vergleich **zwischen dem Dehnungsmessstreifen und der FE-Analyse so genau wie möglich sein konnte. Dies galt insbesondere für, die im 45°-Winkel platzierten Dehnungsmessstreifen, die zur genauen Messung der Torsionsspannung im Träger erforderlich waren . Insgesamt wurden 16 Dehnungsmessstreifen verwendet, um die Spannung an verschiedenen Punkten auf einer Hälfte des Trägers zu messen. In der Mitte der Spannweite wurden nur Längsdehnungsmessstreifen am oberen und unteren Flansch angebracht. Diese Längsflansche wurden am äußersten Rand des Trägers platziert, um die maximale Längsdehnung in der Mitte der Spannweite abzulesen. Derselbe Aufbau wurde an der Stütze befolgt, was dazu führte, dass an dieser Stelle weitere vier längs platzierte Dehnungsmessstreifen platziert wurden. Zwei Dehnungsmessstreif Weitere zwei vertikale Dehnungsmessstreifen wurden auf beiden Seiten des Stegs angebracht, um den Scherfluss des Balkens über den Steg zu messen. Vier diagonale Dehnungsmessstreifen wurden angebrac die an diesen Punkten auftretenden Torsionsspannungen. Eine schematische Darstellung der Position der Dehnungsmessstreifen ist in Abbildung 8 zu sehen.**

Alle Instrumente waren an einen HBX Quantum-Logger angeschlossen. Dieser Logger ermöglichte nach der Kalibrierung die Umrechnung von Spannung in die entsprechenden Einheiten für die verschiedenen Instrumente (z. B. Millimeter für den LVDT, Kilonewton für die Lastzelle und Mikrometer/ Meter für die Dehnungsmessstreifen). Während des Experiments wurde die Last schrittweise auf den Balken ausgeübt, bis die endgültige Bruchlast über den Streckpunkt hinaus erreicht war. Während der Belastung wurde ein Video aufgenommen, um das Experiment aufzuzeichnen, das zur Überprüfung bei der Analyse der Ergebnisse verwendet wurde. Nachdem die endgültige Last aufgebracht worden war und das Streckverhalten festgestellt worden war, wurden zur weiteren Analyse auch Fotos aufgenommen (Abbildu

Machine Translated by Google

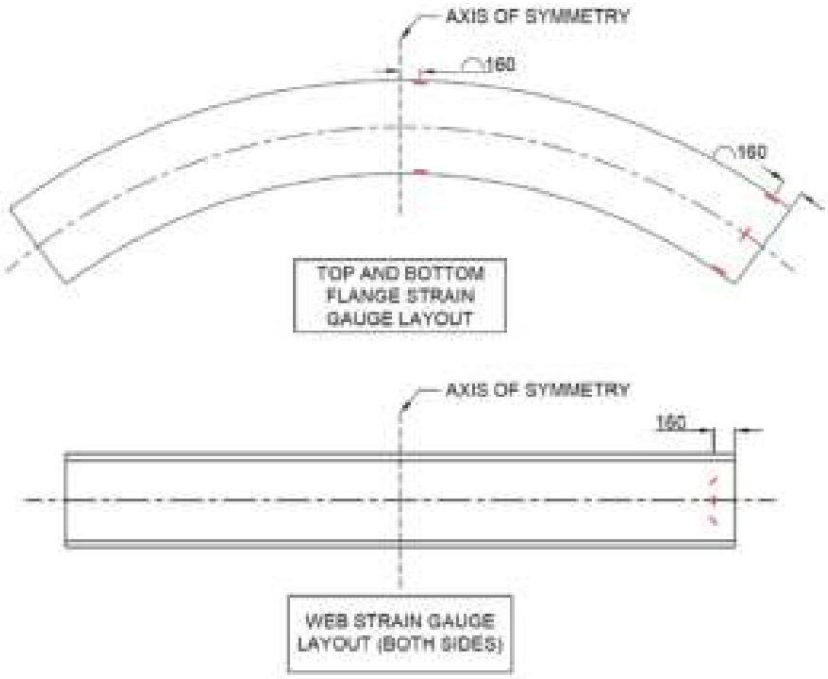


Abbildung 8. Schematische Darstellung der Dehnungsmesspunkte (alle Abmessungen in Millimetern).



Abbildung 9. Abgelenkte Form des Balkens während der Belastungsphase.

4. Analyse der Versuchsergebnisse

Während des Tests wurden insgesamt fünf Variablen gemessen. Diese Variablen waren die in der Mitte aufgebrachte Last, die Verschiebung, die Neigung/Drehung und die Belastung. Die ersten Messwerte vor der Belastung wurden als Referenzpunkt für alle weiteren Mess Wie bereits erwähnt, wurde die Last schrittweise in Schritten von 3 kN aufgebracht. Dies wurde durchgeführt, um genau bestimmen zu können, bei welcher Last eine Verformung auftrat (durch Messen der bleibenden Verformung). Es wurde festgestellt, dass nach dem Entfernen der 12 kN-Last eine bleibende Verformung in der Mitte des Balkens auftrat. Die Durchbiegung bei dieser Last betrug ungefähr 55 mm.

Machine Translated by Google

Die an den Stützen gemessene Durchbiegung war vernachlässigbar und erreichte bis zu 0,07 mm (nach oben). Dies wurde als vernachlässigbar angesehen und daher nicht in die Berechnungen einbezogen der Durchbiegung in der Mitte der Spannweite. Abbildung 10 zeigt die Last-Durchbiegungs-Kurve des Trägers. Ergebnisse zeigte, dass der Balken bei einer Last von 12,42 kN linear bis zu 55,05 mm durchgebogen wurde. Das Experiment wurde genau am Punkt der Streckung abgebrochen; daher ist in diesem Diagramm, was ein weiterer Hinweis darauf wäre, dass ein Nachgeben stattgefunden hat.

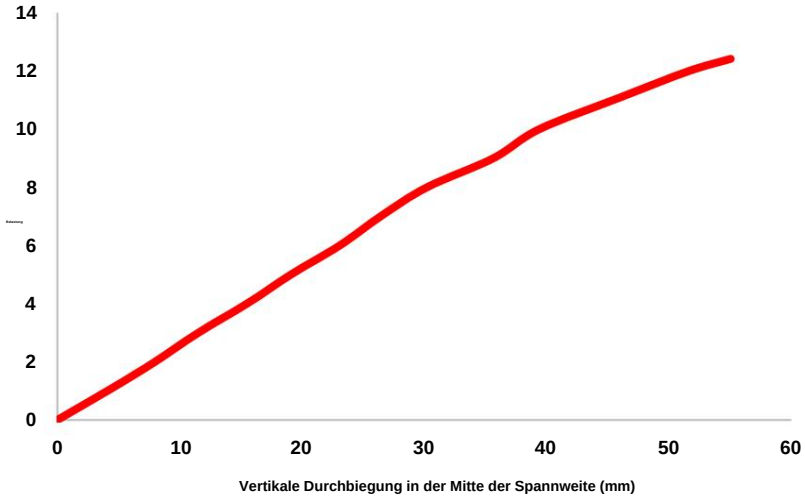


Abbildung 10. Experimentelle Last-Durchbiegungskurve des Balkens (Spannweitenmitte).

Bei der Untersuchung der Neigungsergebnisse wurden Fehler festgestellt. Die Ergebnisse zeigten, dass die Neigung nicht konstant mit zunehmender Belastung zunahm. An einigen Stellen war eine Verringerung der Neigung gemessen mit zunehmender Last. Dies ist in Abbildung 11 zu sehen, wo zu sehen ist, dass Bei einer Erhöhung der Last von 2 kN auf 4 kN wurde eine leichte Verringerung der Neigung gemessen. In der Praxis ist dies nicht möglich. Es wird angenommen, dass dieser Fehler auf die falsche Verwendung von das Messgerät. Das Gerät zur Messung der Neigung verwendete einen elektrolytischen Niveau. Elektrolytische Niveaus sind typischerweise schlecht, wenn es um dynamische/zyklische Belastung geht, aufgrund der leitfähigen Flüssigkeit im versiegelten Glas. Diese Ergebnisse können daher verwendet, um eine grobe Schätzung zu erhalten, wie die Neigung mit zunehmender Last zunimmt; diese Die Ergebnisse können nicht zur Bestimmung der Genauigkeit von FE-Modellen oder analytischen Formeln verwendet werden. Zur weiteren Interpretation wurde in Abbildung 11 eine Ausgleichsgerade eingefügt , die zeigt, dass Die Neigung nahm mit zunehmender Last zu.

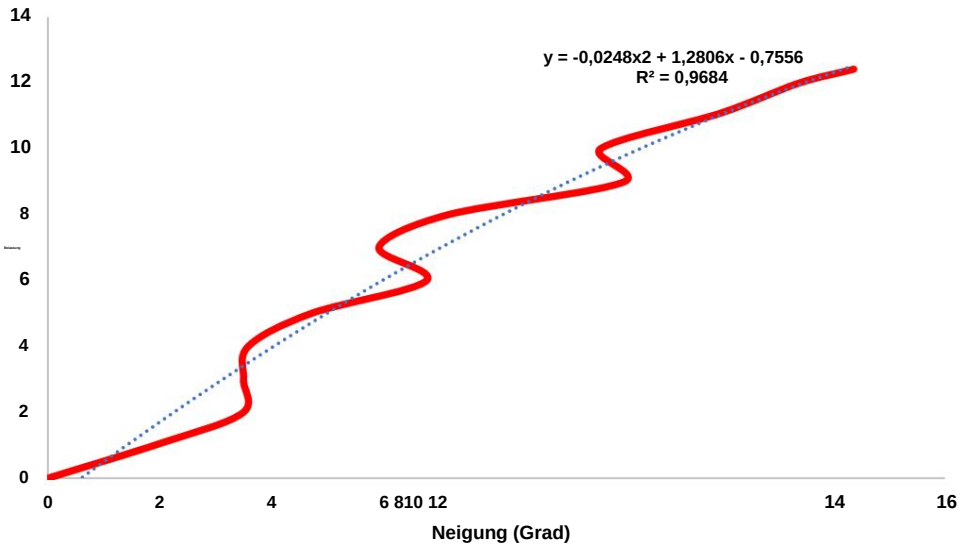


Abbildung 11. Experimentelles Balkenlast-Neigungsdiagramm.

Machine Translated by Google

Die Ergebnisse der Belastung waren sehr interessant und zeigten die Bedeutung der Unterstützung Bedingungen verwendet. Die Unterstützung sollte vollständig fixiert sein; in der Praxis jedoch Die Lagerung verhielt sich zwischen der einer vollfesten Verbindung und einer torsionssteifen festgesteckte Verbindung, wie man bei den Dehnungsmessstreifen-Ergebnissen sehen konnte. Das Dehnungsmessstreifen-Muster war symmetrisch zum Querschnitt (sowohl vertikal als auch horizontal); die Ergebnisse nicht als perfekt symmetrisch angesehen. Der Hauptgrund für die Diskrepanzen war wahrscheinlich auf Ungenauigkeiten bei der Auslegung der Dehnungsmessstreifen zurückzuführen. und geometrische Unvollkommenheiten spielten ebenfalls eine Rolle. Die Ergebnisse der Dehnungsmessstreifen sind zu sehen aus Abbildungen 12–14.

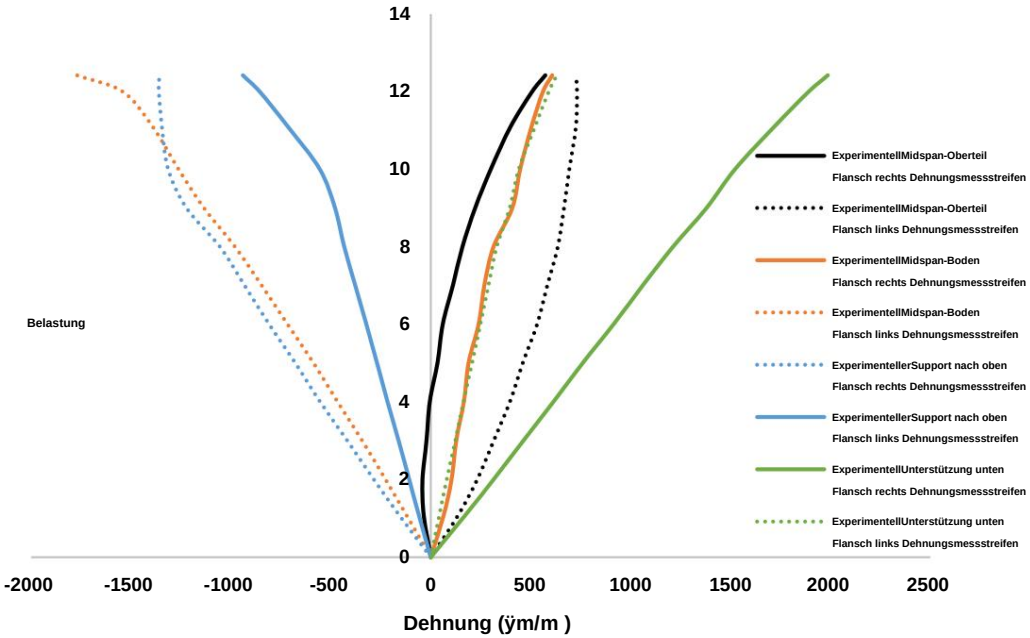


Abbildung 12. Grafische Zusammenfassung der Ergebnisse des experimentellen Längsdehnungsmessstreifens für Balkenflansche.

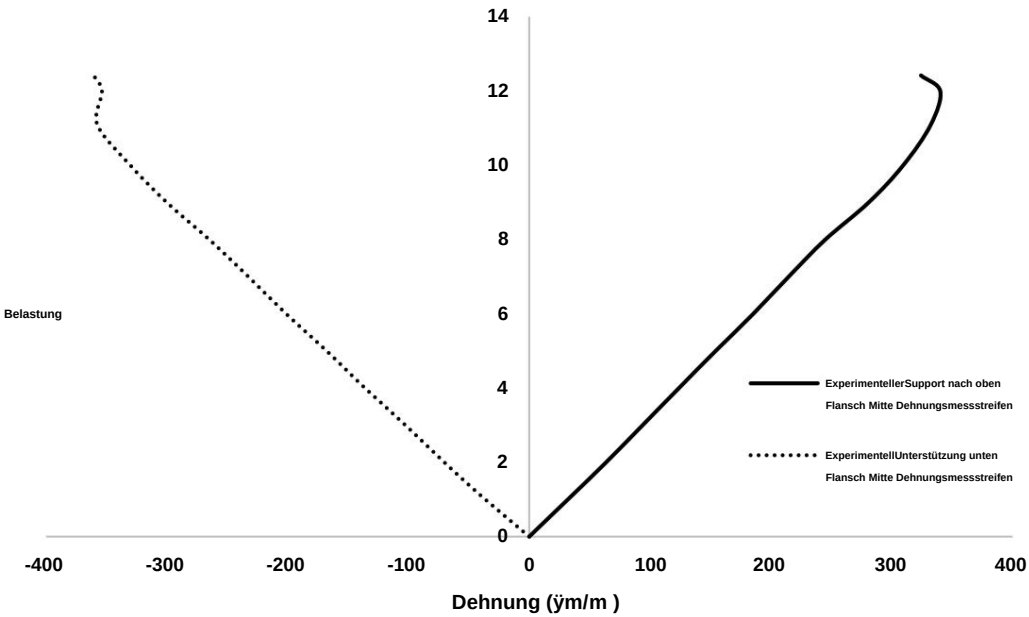
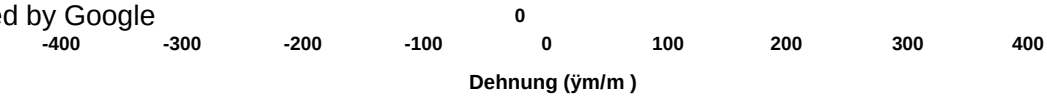


Abbildung 13. Grafische Zusammenfassung der experimentellen Ergebnisse der Querdehnungsmessung mit Balkenflanschen.



Machine Translated by Google



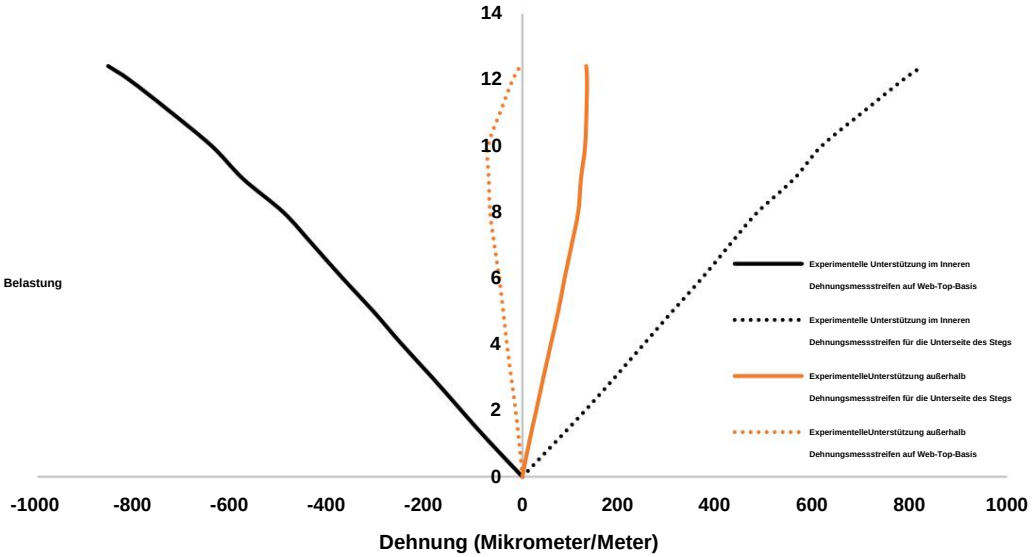


Abbildung 14. Grafische Zusammenfassung der experimentellen Ergebnisse des Dehnungsmessstreifens für Balkenstege mit 45°.

5. Vergleich experimenteller Daten mit Ergebnissen der Finite-Elemente-Analyse

Es wurden verschiedene FE-Modelle verwendet und verglichen, um zu bestimmen, welches Modell das Verhalten des Versuchsträgers am genauesten darstellt. Der Schwerpunkt lag auf der Bestimmung der optimales FE-Modell, das für die Entwicklung der Datensätze verwendet werden soll. Die Datensätze wurden verwendet verschiedene ML-Algorithmen für die Entwicklung der vorgeschlagenen Vorhersagemodelle zu trainieren im Zusammenhang mit der Berechnung der Zugfestigkeit von gekrümmten Stahl-I-Trägern, die an deren Enden und der jeweiligen Auslenkung.

CivilFEM 2021 wurde zur Entwicklung der zahlreichen FE-Netze verwendet, die verwendet wurden, um den Datensatz zu konstruieren. Diese Software wurde aufgrund ihrer Schnittstelle ausgewählt, die es ermöglichte, Erstellung von gekrümmten Stahl-I-Trägernetzen in automatisierter Form. Volumen- und Schalen-FEs wurden In dieser Forschungsarbeit wurde die Maschenweite anhand einer vorherigen Forschungsstudie, in der die Autoren eine Netzsensitivitätsanalyse durchführten [21]. Linear und quadratische Elemente wurden auch für jedes der FEs berücksichtigt, die zur Reproduktion der experimentelle Ergebnisse. An dieser Stelle ist es wichtig anzumerken, dass [21] experimentelle Ergebnisse verwendete in der Literatur gefunden, um ihr Modell zu kalibrieren, das Stahl-I-Träger mit unterschiedlichen Stützsystem im Vergleich zu den hier untersuchten Festträgern. Das Pilotprojekt zeigte, dass hexaedrische isoparametrische FEs in der Lage waren, experimentelle Ergebnisse [21].

Daher wurden für die Bedürfnisse dieser Forschungsarbeit insgesamt vier Modelle erstellt, nämlich ein lineares Volumenelement, ein quadratisches Volumenelement, ein lineares Schalenelement und ein quadratisches Schalenelement. Alle materialbezogenen Parameter wurden zwischen den vier Modelle, um die Konsistenz zu wahren. Ein typisches nichtlineares Materialmodell mit erwarteten Es wurde bilineares Verhalten angenommen. Der gewählte Verfestigungstyp war isotrop, was bedeutet dass das Fließen eintrat, wenn die effektive oder äquivalente Spannung gleich dem angegebenen Fließgrenze. Als Fließkriterium wurde das von Mises gewählt. Außerdem Die Materialeigenschaften wurden als die eines S355-Stahlmaterials angenommen (355 MPa Streckgrenze Spannung, 210 GPa Elastizitätsmodul, eine Poissonzahl von 0,3 und eine Dichte von 7850 kg/m3). Die Die experimentelle Auslenkung und Drehung in der Mitte der Spannweite wurden dann mit der Mitte der Spannweite verglichen. Durchbiegung und Rotation berechnet mit den verschiedenen FE-Modellen. Analytische Formeln wurden zu Vergleichszwecken ebenfalls enthalten.

Abbildung 15 zeigt, dass die lineare Festkörper-FE die schlechteste Vorhersage lieferte bei der Schätzung von Durchbiegung in der Mitte der Spannweite. Die analytische Methode, Castiglianos zweiter Satz, war ebenfalls nicht in der Lage, das Verhalten des Strahls genau darzustellen und schnitt im Vergleich ziemlich schlecht ab mit den fortgeschritteneren FE-Modellen. Das quadratische Volumenmodell berechnet am genauesten

Machine Translated by Google

die Durchbiegung in der Mitte der Spannweite, mit einem durchschnittlichen Fehler von nur 1,83 mm. Eine Zusammenfassung der berechneten Der mittlere absolute Fehler (MAE) ist in Tabelle 1 zu sehen.

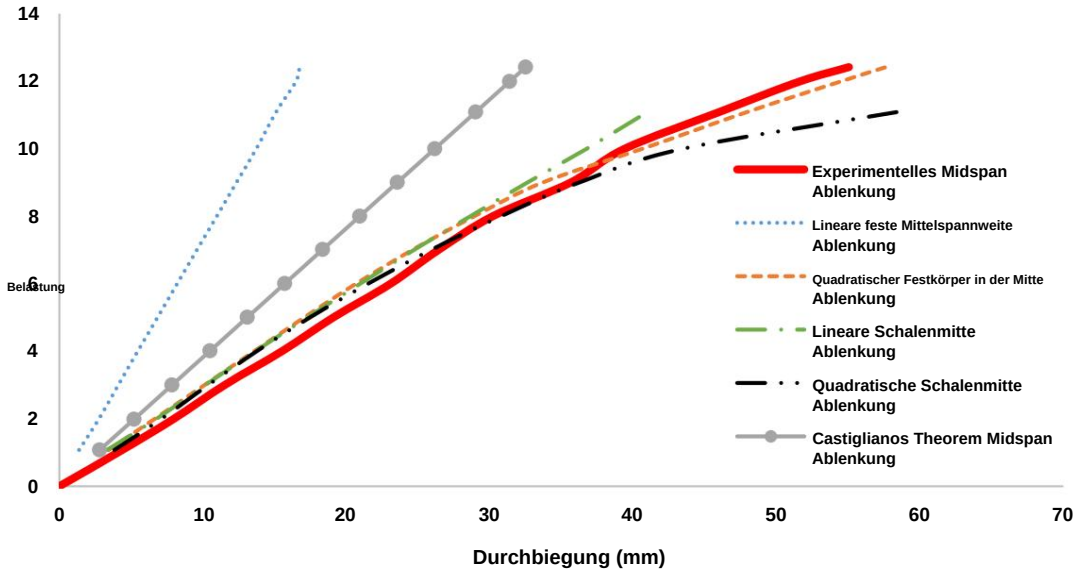


Abbildung 15. Last-Durchbiegungsdiagramm mit experimentellen Durchbiegungsergebnissen, FE-Ergebnissen und Ergebnissen erhalten mit der analytischen Formel.

Tabelle 1. Mittlerer absoluter Fehler der FEM-Ablenkungsschätzung und des Castigliano-Theorems im Vergleich mit den experimentellen Daten.

Methode zur Ablenkungsschätzung	MAE
Lineares Festkörper-Finite-Elemente-Modell	18,64 mm
Quadratisches Festkörper-Finite-Elemente-Modell	1.83 mm
Lineares Schalen-Finite-Elemente-Modell	2,12 mm
Quadratisches Schalen-Finite-Elemente-Modell	2,33 mm
Satz von Castigliano	9,91 mm

Darüber hinaus sind die resultierenden Schnittrotationen in Abbildung 16 zu sehen. Ähnlich wie Die Ergebnisse der Durchbiegung, die experimentellen Daten und die Ergebnisse aus FE-Analysen wurden verglichen mit denen einer häufig verwendeten Analysemethode, wie bereits diskutiert (Gleichung (2)). Die experimentelle Auslenkung wurde als Eingangsgröße verwendet, um die höchste Genauigkeit bei der Durchführung der analytischen Methode möglich. Aufgrund der Tatsache, dass feste FEs enthalten keine Rotationsfreiheitsgrade, die Rotation wurde aus dem ersten Prinzipien durch Nutzung der vertikalen Ablenkung an gegenüberliegenden Enden des Bodens Flansch und Verwendung der Trigonometrie zur Berechnung der Rotation. Diese Methode gilt nur, wenn der Querschnitt verzieht sich nicht wesentlich. Aus der Grafik ist ersichtlich, dass die lineare Feste FEs lieferten die geringste Genauigkeit und unterschätzten die Neigung in der Spannweitenmitte erheblich.

Die M/R-Werte schnitten im Vergleich zu den linearen festen Fes etwas besser ab. Diese Ergebnisse waren im Vergleich zu den fortgeschritteneren FE immer noch äußerst konservativ Modelle. Die fortgeschritteneren FE-Modelle korrelierten gut mit der Regressionsgerade der experimentelle Daten. Es scheint jedoch, dass das quadratische Schalenmodell genauer war bis etwa 10 kN. Von 10 kN bis zum Versagen sind die lineare Schale und der quadratische Volumenkörper Modelle zeigten beide geringere Fehler im Vergleich zu den experimentellen Daten. Eine Zusammenfassung der Fehlermetriken (MAE) sind in Tabelle 2 zu sehen.

Machine Translated by Google

tt

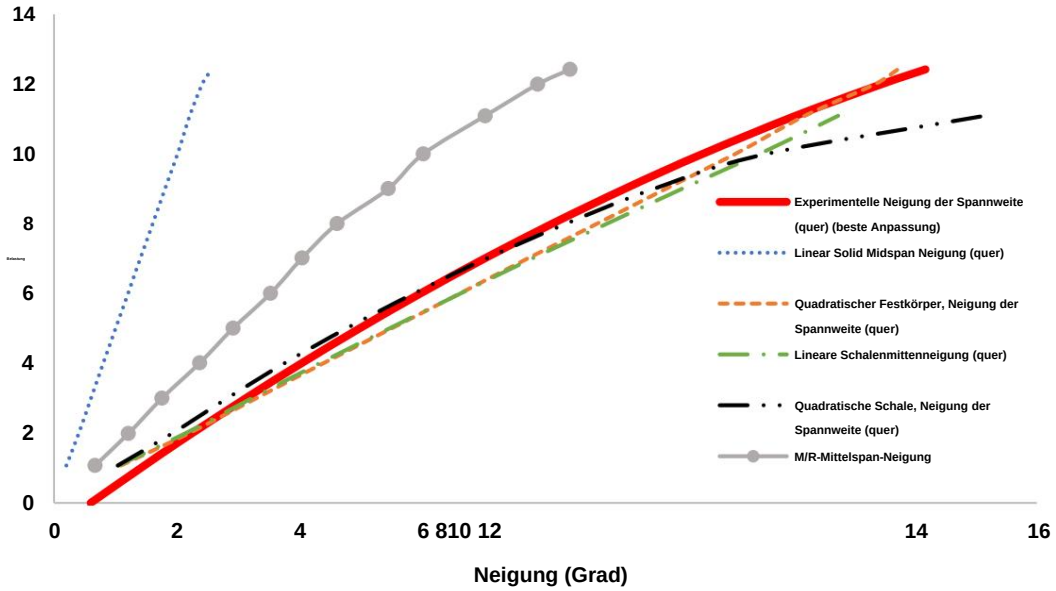


Abbildung 16. Last-Rotations-Diagramm mit den Ergebnissen aus Experimenten, FE und der M/R-Analyseformel.

Tabelle 2. Mittlerer absoluter Fehler der FEM-Rotationsschätzung und analytische Formel für experimentelle Daten. tt

Rotationsschätzungsmethode	MAE
Lineares Festkörper-Finite-Elemente-Modell	4,98ÿ
Quadratisches Festkörper-Finite-Elemente-Modell	1,31ÿ
Lineares Schalen-Finite-Elemente-Modell	1,52ÿ
Quadratisches Schalen-Finite-Elemente-Modell	1,33ÿ
M/R-Methode	2.31ÿ

Daher wird der Schluss gezogen, dass FE-Modelle mit der in diesem Abschnitt beschriebenen numerischen Modellierungstechnik das Verhalten horizontal gekrümmter Stahl-I-Träger genau darstellen können. Es hat sich auch gezeigt, dass diese Modelle die vorhandenen analytischen Formeln zur Schätzung von Durchbiegung und Drehung deutlich übertreffen. Es wurde festgestellt, dass von allen FE-Modellen das quadratische Festkörper-FE sowohl bei der Schätzung von Durchbiegung als auch Drehung am besten abschnitt . Daher wurde die in diesem Abschnitt beschriebene numerische Modellierungstechnik zur Entwicklung eines großen Datensatzes verwendet, wie i

6. Numerische Kampagne

Mithilfe von CivilFEM wurde ein relativ großer Datensatz mit 864 Modellen erstellt. Insgesamt wurden sechs Abschnitte berücksichtigt, nämlich IPE100, IPE200, IPE300, IPE400, IPE500 und IPE600. Dies wurde getan, um die gesamte IPE-Abschnittsliste gemäß europäischen Normen abzudecken. Die berücksichtigten Variablen waren das Trägheitsmoment um die x- **Achse** (Ixx), **das Trägheitsmoment um die** y **-Achse** (Iyy), **das polare Trägheitsmoment (J), Abschnittshöhe (h), Abschnittsbreite (b), Abschnittsfläche (A), gekrümmte Balkenlänge (L), Krümmungsradius des Balkens (R), Streckgrenze des Materials** (fy), **Elastizitätsmodul des Materials (E), Poisson- Zahl** des Materials **(v) und Schermodul des Materials (G). Für jeden betrachteten Abschnitt wurden drei Streckgrenzen angenommen (235 MPa, 275 MPa und 355 MPa), um die verschiedenen Festigkeiten des in Südafrika handelsüblichen Baustahls zu berücksichtigen. Drei Elastizitätsmodule wurden berücksichtigt, nämlich 190 GPa, 200 GPa und 210 GPa, um die Unterschiede in der Materialsteifigkeit zu berücksichtigen. Die** Poisson-Zahl wurde auf 0,28 festgelegt und die Gleichung von G wurde basierend auf E **und v berechnet . Pro Abschnitt wurden vier Längen und vier Radien berücksichtigt, um den breiten Bereich an Geometrien abzudecken, für die die vorgeschlagenen Vorhersagemodelle anwendbar sin**

Machine Translated by Google

Zur Steuerung des Verhaltens gekrümmter Balken wurden vier spezifische R/L -Verhältnisse **an allen Balken berücksichtigt, nämlich** R/L **= 1, 2, 4 und 8. Alle Balken waren an beiden Enden und in der Mitte wurde eine Last senkrecht nach unten ausgeübt.**

Um die Konsistenz zu wahren, wurden die Modelle automatisch mit einem Python-Skript in CivilFEM. Dadurch wurde sichergestellt, dass alle Material- und Geometrieeigenschaften erhalten blieben und nur eine einzige Variable geändert wurde, was eine automatische Netzgenerierung ermöglicht. Das Python-Skript wurde entwickelt und optimiert, um Konsistenz zu gewährleisten und die Ausführung zu minimieren Zeit durch Verringerung der Anzahl der Variablen und der Gesamtleistung des Codes. Die Modelle verwendeten alle quadratische Festkörperelemente mit einer Maschenweite von bis zu 50 mm. Es wurde ein typisches nichtlineares Materialmodell mit vorhergesagtem bilinearem Verhalten angenommen. Der gewählte Härtungstyp war isotrop, was bedeutet, dass das Fließen auftrat, wenn die effektive oder äquivalente Spannung gleich der angegebenen Streckgrenze war. Diese ausgewählte Streckgrenze Als Kriterium wurde das von Mises-Prinzip festgelegt.

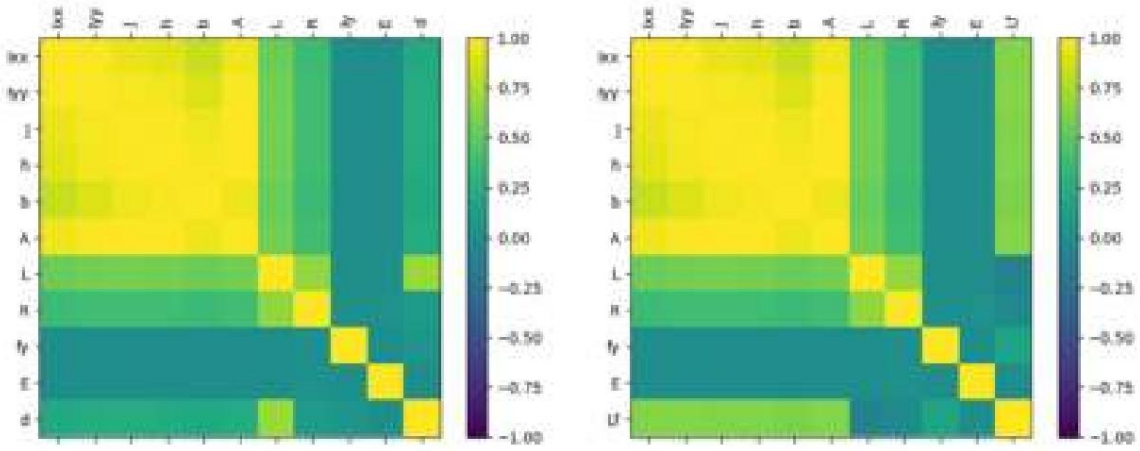
Tabelle 3 zeigt verschiedene statistische Parameter, einschließlich der Schiefe. Ein Wert von 0 zeigt an, dass der Datensatz keine Schiefe enthielt und eine vollkommen normale Verteilung hatte. Nach Aminu und Shariff [22] kann **ein Bereich von ÿ3 bis 3 als Grenzwert betrachtet werden. und auf dieser Grundlage zeigen die Ergebnisse, dass die Daten nicht signifikant verzerrt waren. Kurtosis ist ein weiterer Parameter, der dabei hilft zu bestimmen, ob ein Datensatz normalerweise verteilt oder nicht. Dies geschieht, indem festgestellt wird, ob ein Datensatz „schwer tailliert“ ist oder „leicht tailliert“. „Schwer tailliert“ bedeutet, dass ein Datensatz zahlreiche Datenpunkte enthält in Ausreißerpositionen, während ein „Light-Tail“-Datensatz nur minimale bis keine Ausreißer enthält. Sobald Auch hier gibt es keine akzeptierte Konvention darüber, was als „schwerschwänzig“ gilt. Aminu und Shariff [22] geben an, dass ein Bereich von +10 bis ÿ10 als leichtschwänzig gilt und minimale Ausreißer. In diesem Zusammenhang wurde festgestellt, dass der Datensatz, der für die Bedürfnisse von Diese Forschungsarbeit enthielt minimale Ausreißer mit einer guten Verteilung.**

Tabelle 3. Beschreibende Statistik des Datensatzes horizontal gekrümmter Balken.

	Bedeuten	Mittlere	Geschlechtsstraiebeites	Mindest	Max	Schiefe	Kurtosis
Ixx (mm4)	291.198.612	231.300.000	326.514.119	1.710.000	920.800.000	0,977	ÿ0,455
Iyy (mm4)	12.720.819	13.180.000	1.1960.328	159.000	33.870.000	0,625	ÿ0,960
J (mm4)	692.957	841.000	553.277	12.100	1.540.000	0,142	ÿ1,343
Hmm)	349,80	400	172,05	100	600	ÿ0,011	ÿ1,284
b (mm)	150,59	180	58,02	55	220	ÿ0,472	ÿ1,181
A (mm2)	7490	8450	5048	1030	15.600	0,285	ÿ1,223
Länge (m)	7,48	4	6.44	1	24	1.346	0,953
R (m)	27,99	16	35,26	1	192	2.653	8.242
Fy (MPa)	289,37	275	50,23	235	355	0,343	ÿ1,543
E (GPa)	199,93	200	8.14	190	210	0,012	ÿ1,491

Die Korrelationsmatrix für den Verschiebungsdatensatz finden Sie in Abbildung 17a und für der Datensatz mit der Versagenslast in Abbildung 17b. Aus den Ergebnissen der Korrelationsmatrix ging klar hervor, dass Alle Querschnittseigenschaften wiesen eine starke positive Korrelation mit der Durchbiegung in der Mitte auf. und die Bruchlast. Es war auch klar, dass von allen Eigenschaften die gekrümmte Länge die größte Korrelation mit der vertikalen Durchbiegung in der Mitte der Spannweite. Dies impliziert das Potenzial, zu positiven Ergebnissen in der Sensitivitätsanalyse führen; dies wird in Abschnitt 7 erörtert.

Machine Translated by Google

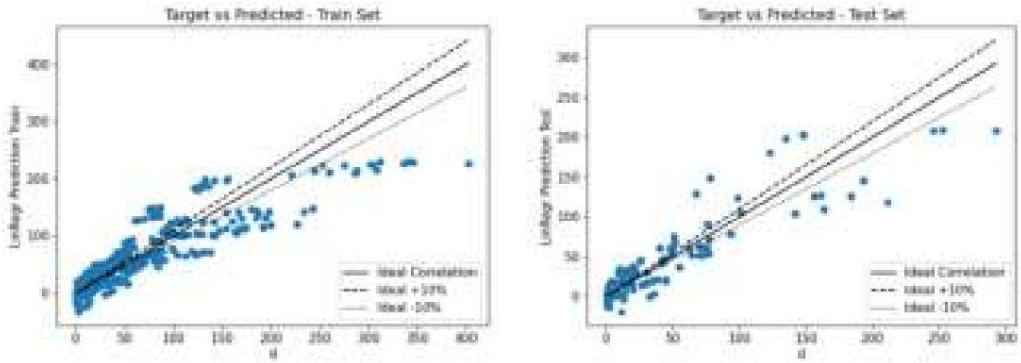


(A) **(B)**

Abbildung 17. Korrelationsmatrix von (a) Datensatz zur Durchbiegung in der Spannweite und (b) Datensatz zur Bruchlast.

7. Training und Testen von maschinellem Lernen

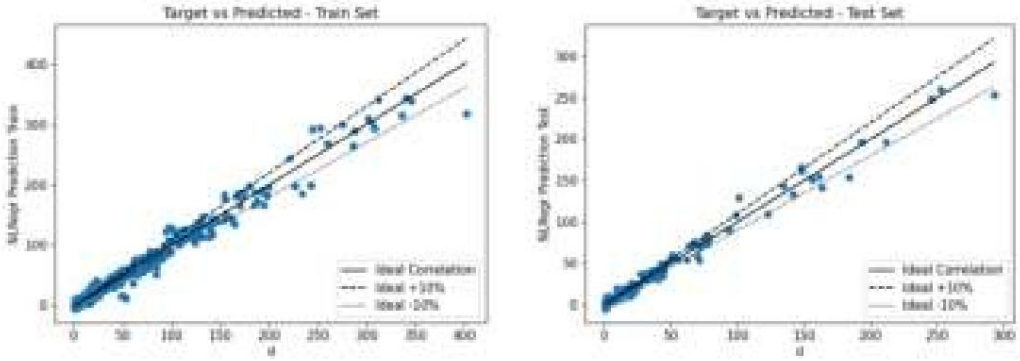
D 2.9147 10E 08 Dieser 6,085 10 7.153 ÿÿ
Abschnitt beschreibt, wie zahlreiche ML-Algorithmen angewendet wurden, um
8.6563 10 ÿ 6.7409 10 1.496 10
Formeln, die aktuelle analytische Methoden zur Schätzung der Durchbiegung von
1.1562 10 1,1261 5,1585 10
horizontal gekrümmte Stahl-I-Träger. Die betrachteten ML-Algorithmen waren lineare Regression
6.87948 10
(LR), polynomische Regression mit Hyperparameter-Tuning (POLYREG-HYT), tiefe künstliche
neuronale Netze mit MPI, Horovod und Hyperparameter-Tuning (DANN-MPIH-HYT),
D 1,10850 10 5,54753 2,50341 10 und extremes Gradientenboosting
mit Hyperparametertuning und Kreuzvalidierung (XGBoost-HYT-CV) [14]. Dabei ist zu beachten, dass bei den
8,71342 10 4,36940 10 3,72902 10 7,64167
durchgeführten ML-Analysen 85 % des Datensatzes
10 ÿ 4,14113 10 ÿ 1,20492 10 wurde zum Trainieren des ML-Algorithmus
verwendet und 15 % wurden zum Testen verwendet. Die Leistung von ML
2,10080 10 2,36217 10 Algorithmen variieren; daher 8.06401 10
wurden zur Quantifizierung der Genauigkeit zahlreiche Fehlermetriken berücksichtigt.
3,01987 10 1,61891 2,78160 10
Die in dieser Forschungsarbeit berücksichtigten Fehlermaße waren der mittlere absolute prozentuale Fehler
3,98564 10 4,35591 10 6,98688 10 (MAPE), der mittlere absolute mittlere
prozentuale Fehler (MAMPE), der mittlere absolute Fehler
4,76077 10 9,28207 10 2,05690 10 (MAE) und der mittlere quadratische Fehler (RMSE). Der
ffi
Pearson-Korrelationskoeffizient betrug
2,68695 10 ÿ 1,26135 10 2,50786 10
wird auch berücksichtigt (R) zur Bestimmung der Ähnlichkeit zwischen dem PV (vorhergesagter Wert) und dem
6,68248 10 6,78638 10 1,03722 10 DV (abhängige Variable). Eine ausführliche Diskussion der
Fehlermetriken findet sich in [23].
ÿ 1,76647 10 ÿ 3,55305 10
9,13425 10 ÿ 1.87704 10 7.1.
ÿ 8,00661 10 ÿ
Vorgeschlagene Vorhersagemodelle für den Fall der Ablenkung
4.02981 10 2.62557 10 ÿ1.01188 10 Dieser Abschnitt beschreibt die Vorhersagen der Durchbiegung
in der Mitte der Spannweite durch die verschiedenen 1,18944 10 7,59868 10 ML-
Algorithmen. Die numerisch erhaltenen Fehlermetriken wurden analysiert, um die
Leistung der verschiedenen vorgeschlagenen Vorhersagemodelle. Die Korrelation für den Zug und
Testdatensätze sind in den Abbildungen 18–21 zu sehen.



(A) **(B)**

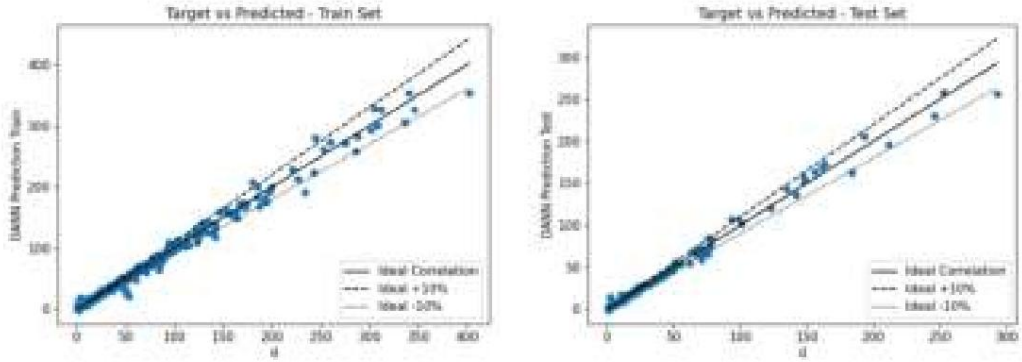
Abbildung 18. Zusammenhang zwischen der mittels FEM ermittelten Auslenkung und der geschätzten Auslenkung
Anwendung von LR (a) auf dem Trainingsdatensatz und (b) auf dem Testdatensatz.

Machine Translated by Google



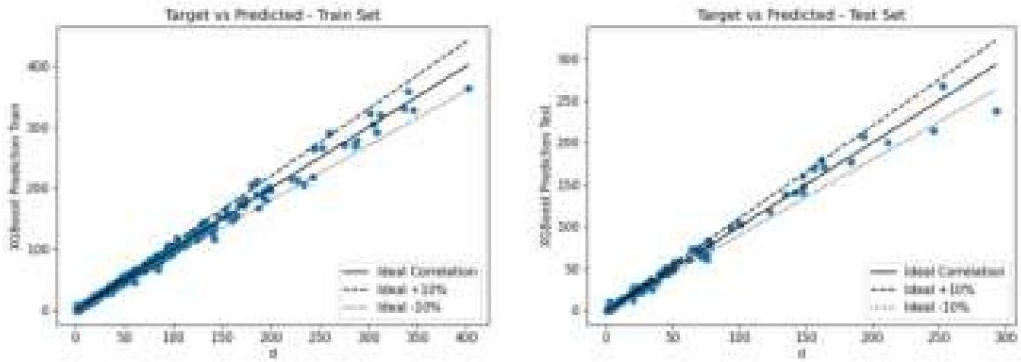
(A) **(B)**

Abbildung 19. Zusammenhang zwischen der mittels FEM ermittelten und der geschätzten Durchbiegung unter Verwendung von POLYREG-HYT (a) auf dem Trainingsdatensatz und (b) auf dem Testdatensatz.



(A) **(B)**

Abbildung 20. Zusammenhang zwischen der mittels FEM ermittelten Auslenkung und der geschätzten Auslenkung Verwendung des DANN-MPIH-HYT-Algorithmus (a) auf dem Trainingsdatensatz (b) beim Testen.



(A) **(B)**

Abbildung 21. Zusammenhang zwischen der mittels FEM ermittelten Auslenkung und der geschätzten Auslenkung Verwendung des XGBoost-HYT-CV-Algorithmus (a) auf dem Trainingsdatensatz (b) auf dem Testdatensatz.

LR und POLYREG-HYT sind die einzigen in dieser Studie betrachteten ML-Algorithmen, die in der Lage, geschlossene Formeln zu liefern. Gleichung (3) zeigt die Formel, die mit der LR-Algorithmus, mit dem die vertikale Durchbiegung in der Mitte der Spannweite geschätzt werden kann, während Gleichung (4) liefert das vorgeschlagene Vorhersagemodell, das mit POLYREG-HYT abgeleitet wurde. Wenn Bei der Umsetzung der Formeln sind alle Querschnittswerte in mm/mm2/mm3/mm4 angegeben. **und die Spannweite wird in m angegeben. Die Streckgrenze wird in MPa angegeben und der Elastizitätsmodul in GPa.**

Machine Translated by Google

$$d = \ddot{y}2{,}9147 \times 10\ddot{y}8E\ \ddot{y}\ 08 \times Ixx + 6{,}085 \times 10\ddot{y}6 \times Iyy + 7{,}153 \times J + 8{,}6563 \times 10\ddot{y}1 \times h\ \ddot{y}\ 6{,}7409 \times 10\ddot{y}1 \times b\ \ddot{y}\ 4{,}496 \times 10\ddot{y}2 \times A + 1{,}1562 \times 101 \times L\ \ddot{y}\ 1{,}1261 \times R + 5{,}1585 \times 10\ddot{y}2 \times fy\ \ddot{y}\ 6{,}87948 \times 10\ddot{y}2E \quad (3)$$

$$d = \ddot{y}1{,}10850 \times 10\ddot{y}2 \times h \times L + 5{,}54753 \times L^2\ \ddot{y}\ 2{,}59341 \times 10\ddot{y}2 \times b \times L\ 2 + 8{,}71342 \times 10\ddot{y}1 \times L + 4{,}36940 \times 10\ddot{y}1 \times R\ \ddot{y}\ 3{,}72902 \times 10\ddot{y}4 \times b^2 + 7{,}64167 \times 10\ddot{y}5 \times h \times R^2 + 4{,}14113 \times 10\ddot{y}7 \times h \times A \times L + 1{,}20492 \times 10\ddot{y}1 \times R\ 2\ddot{y} 2{,}10080 \times 10\ddot{y}9 \times J \times L \times fy + 2{,}36217 \times 10\ddot{y}8 \times A^2 \times R + 8{,}06401 \times 10\ddot{y}3 \times b \times L \times R\ \ddot{y}\ 3{,}01987 \times 10\ddot{y}5 \times A \times L \times R\ \ddot{y}\ 1{,}61891 \times L \times R\ \ddot{y}\ 2{,}78160 \times 10\ddot{y}2 \times L\ 3\ddot{y} 3{,}98564 \times 10\ddot{y}4 \times R^3\ \ddot{y}\ 4{,}35591 \times 10\ddot{y}9 \times b \times A^2\ \ddot{y}\ 6{,}98688 \times 10\ddot{y}4 \times b \times R\ 2 + 4{,}76077 \times 10\ddot{y}3 \times L \times R^2 + 9{,}28207 \times 10\ddot{y}12 \times Iyy \times b \times fy\ \ddot{y}\ 2{,}05690 \times 10\ddot{y}7 \times A \times R \times fy + 2{,}68695 \times 10\ddot{y}7 \times h^3 + 1{,}26135 \times 10\ddot{y}10 \times Iyy \times R^2 + 2{,}50786 \times 10\ddot{y}5 \times R\ 2 \times fy + 8{,}68248 \times 10\ddot{y}4 \times L^2 \times fy + 6{,}78638 \times 10\ddot{y}11 \times Iy \times R \times fy\ \ddot{y}\ 1{,}03722 \times 10\ddot{y}6 \times h \times b \times fy + 1{,}76647 \times 10\ddot{y}5 \times h \times b \times R\ \ddot{y}\ 3{,}55305 \times 10\ddot{y}7 \times A \times E\ 2\ddot{y} 9{,}13425 \times 10\ddot{y}7 \times h \times fy^2 + 1{,}87704 \times 10\ddot{y}7 \times h \times A \times E\ \ddot{y}\ 8{,}00661 \times 10\ddot{y}7 \times h \times A \times R + 4{,}02981 \times 10\ddot{y}6 \times h \times fy \times E\ \ddot{y}\ 2{,}62557 \times 10\ddot{y}4 \times L \times R \times fy\ \ddot{y}\ 1{,}01188 \times 10\ddot{y}2 \times M^2 + 1{,}18944 \times 10\ddot{y}6 \times J \times L^2\ \ddot{y}\ 7{,}59868 \times 10\ddot{y}10 \times Iyy \times L \times E \quad (4)$$

Visuell war es schwierig zu erkennen, welcher ML-Algorithmus die beste Leistung erbrachte. Daher Wie bereits erwähnt wurden zahlreiche Fehlermetriken verwendet, um die Leistung von die verschiedenen Algorithmen. Tabelle 4 fasst die Ergebnisse zusammen. Wie man sehen kann, XGBoost-HYT-CV war das genaueste vorgeschlagene Modell bei der Betrachtung des Trainingsdatensatzes, während bei Vergleicht man die Fehlermetriken aus dem Testdatensatz, war dies nicht der Fall. Das von DANN-MPIH-HYT vorgeschlagene Vorhersagemodell erwies sich als etwas genauer. Es Es sollte auch darauf hingewiesen werden, dass, obwohl DANN-MPIH-HYT die genaueste in der In der Testphase benötigte dieser Algorithmus die längste Rechenzeit (27-mal langsamer).

Tabelle 4. Vergleich der ML-Algorithmen, die anhand des Ablenkungs-Datensatzes trainiert wurden.

Modell	Datensatz	R	MAP	MAMPE	MAE	RMSE	Berechnung Zeit (s)
LR	Zug	0,8934	225,93 %	45,08 %	17,6614	25.6709	0,0013
POLYREG-HYT	Zug	0,9874	69,91 %	13,90 %	5,4447	9,0447	10,91
DANN-MPIH-HYT	Zug	0,9950	39,64 %	7,59 %	2,9731	5,7272	2019.76
XGBoost – HYT-CV	Zug	0,9968	22,97 %	5,92 %	2,3199	4,5566	75,27
LR	Prüfen	0,9064	168,22 %	39,74 %	17.1810	24.4716	0,00
POLYREG-HYT	Prüfen	0,9905	70,38 %	12,49 %	5,3997	7,9865	0,00
DANN-MPIH-HYT	Prüfen	0,9950	35,82 %	8,04 %	3,4776	5,8759	0,0004
XGBoost – HYT-CV	Prüfen	0,9922	23,89 %	8,44 %	3,6504	7,2498	0,0033

Letztendlich war es offensichtlich, dass genaue Formeln mit ML-Algorithmen erstellt werden können . Ein späterer Abschnitt dieses Dokuments vergleicht diese Ergebnisse mit Out-of-Sample-Daten, w Validierung der Fähigkeit der vorgeschlagenen Vorhersagemodelle, unbekannte Ergebnisse zu erfassen.

Für jede der unabhängigen Variablen wurden Sensitivitätsanalysen durchgeführt, um zu bestimmen welche Variable die abhängige Variable am meisten beeinflusst hat. Dies wird zukünftige Studien unterstützen bei der Bestimmung, welche Variablen ausgeschlossen werden sollen, um die Effizienz des vorgeschlagenen prädiktive Modelle. Diese Analyse bietet Ingenieuren auch ein tieferes Verständnis von

Machine Translated by Google

das Verhalten von horizontal gekrümmten Stahl-I-Trägern. Abbildung 22 fasst die Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse zusammen. Wie man sehen kann, waren die drei einflussreichsten Variablen auf die vertikale Durchbiegung in der Mitte die gekrümmte Länge (L), das Trägheitsmoment um die kleine Achse (Iyy) **und der Krümmungsradius (R).** Den erhaltenen Ergebnissen zufolge war L **bei weitem die einflussreichste Variable . Querschnittsfläche, Querschnittsbreite und Querschnittshöhe hatten laut der Sensitivitätsanalyse, die für die Zwecke dieser Forschungsarbeit zur Balkendurchbiegung durchgeführt wurde, praktisch keinen Einf**

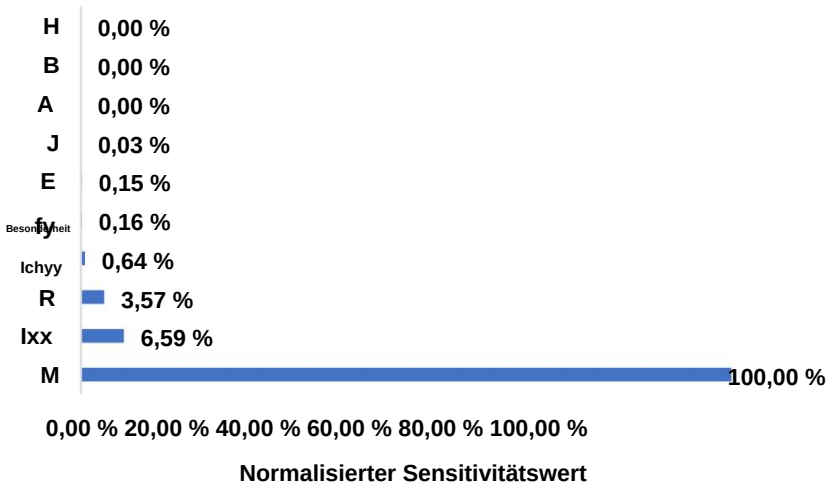


Abbildung 22. Zusammenfassung der Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse (XGBoost-HYT-CV).

Es ist wichtig, hier zu zeigen, dass die Vorhersagemodelle nicht überangepasst waren und dass die durch die ML-Analyse erhaltene Lösung zu einem objektiven Vorhersagemodell führte, das nicht überangepasst war. Zusätzlich zu der in Abschnitt 8 vorgestellten Validierung zeigt Abbildung 23 die abgestimmten **Kreuzvalidierungshistorien für die ML-Algorithmen DANN-MPIH-HYT und** Es zeigte sich, dass die Algorithmen in der Lage waren, durch **das Trainings- und Testverfahren optimierte Modelle abzuleiten .**

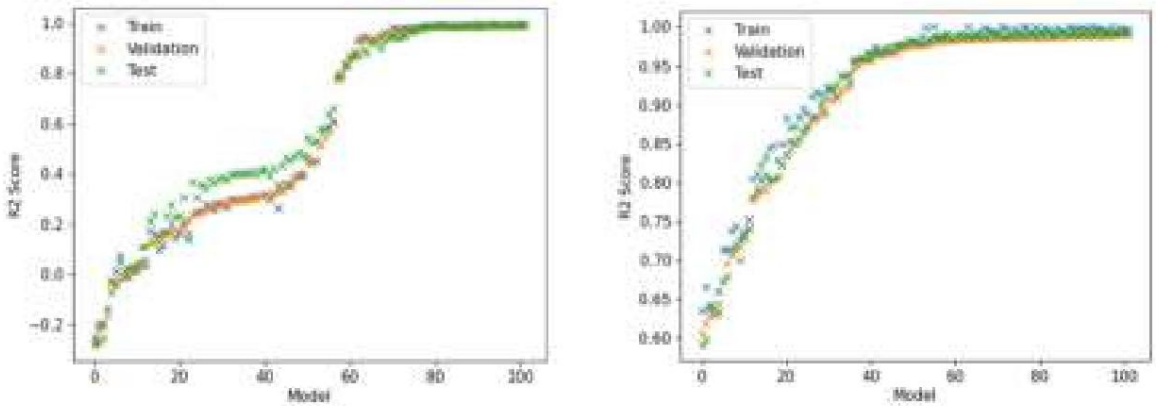


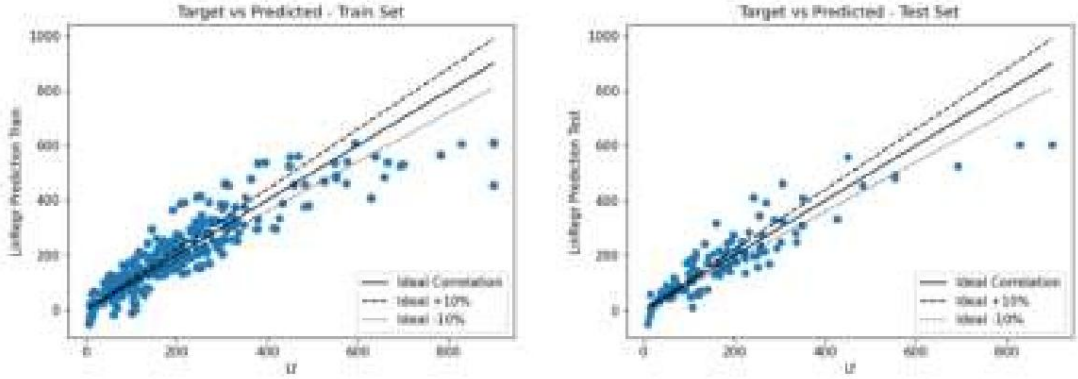
Abbildung 23. Fall der Ablenkung. Angepasster Kreuzvalidierungsverlauf für den Fall von (a) DANN-MPIH-HYT und (b) XGBoost-HYT-CV.

7.2. Vorgeschlagene Vorhersagemodelle für den Fall der Versagenslast

In diesem Abschnitt werden die von den verschiedenen ML-Algorithmen bereitgestellten Vorhersagen der Versagenslast beschrieben. Es wurde eine Analyse durchgeführt, um die Leistung der verschiedenen vorgeschlagenen Vorhersagemodelle zu bestimmen. Die Korrelation für die Trainings- und Testdatensätze ist in den Abbildungen 24–27 zu sehen.

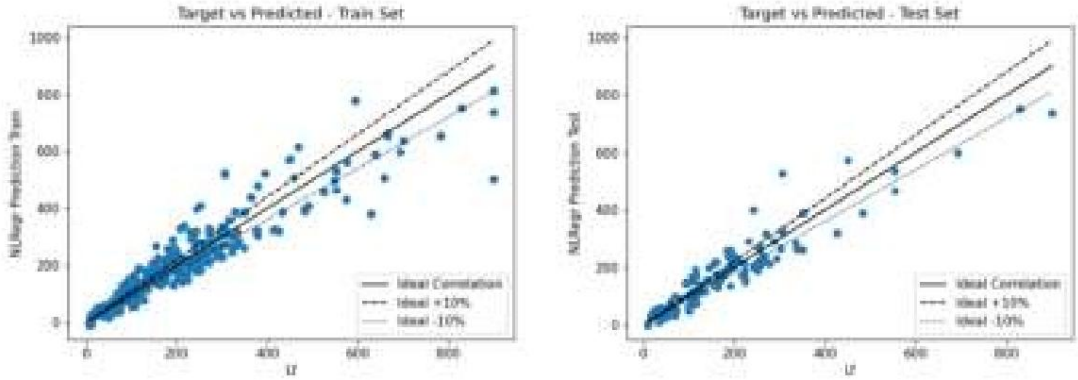
Machine Translated by Google

2,7631 10	6,0399 10 ÿ 6,0399	7,0583 10
2,7631 10	10 ÿ 2,8373 10	7,0583 10
1,36958 10	2,8373 10	
1,36958 10		



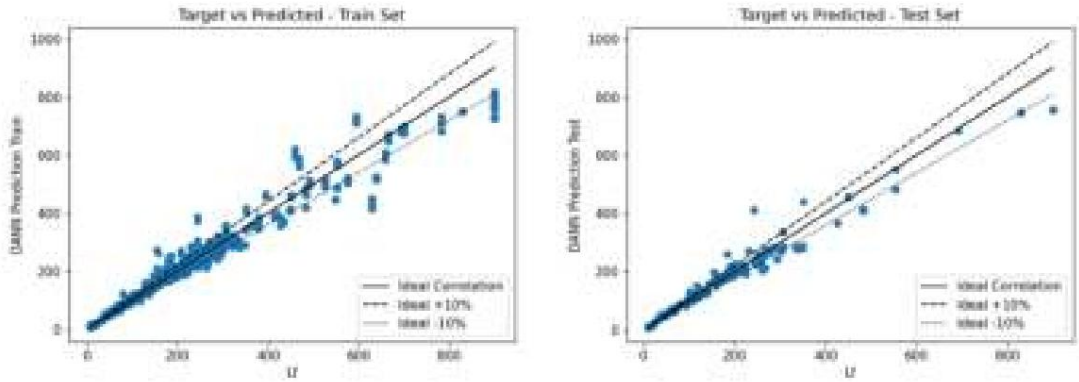
(A) **(B)**

Abbildung 24. Zusammenhang zwischen der mittels FEM ermittelten Versagenslast und der geschätzten Versagenslast unter Verwendung von LR (a) auf dem Trainingsdatensatz (b) auf dem Testdatensatz.



(A) **(B)**

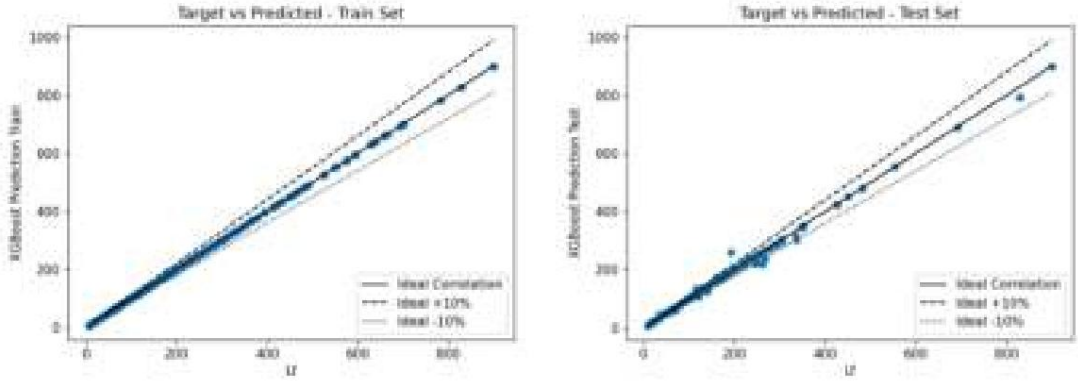
Abbildung 25. Zusammenhang zwischen der mittels FEM ermittelten Versagenslast und der geschätzten Versagenslast unter Verwendung von POLYREG-HYT (a) auf dem Trainingsdatensatz (b) auf dem Testdatensatz.



(A) **(B)**

Abbildung 26. Zusammenhang zwischen der mittels FEM ermittelten Versagenslast und der geschätzten Versagenslast unter Verwendung des DANN-MPIH-HYT-Algorithmus (a) auf dem Trainingsdatensatz (b) auf dem Testdatensatz.

Machine Translated by Google



(A) **(B)**

Abbildung 27. Zusammenhang zwischen der mittels FEM ermittelten Versagenslast und der geschätzten Versagenslast Verwendung des XGBoost-HYT-CV-Algorithmus (a) auf dem Trainingsdatensatz (b) auf dem Testdatensatz.

Wie bereits erwähnt, war es notwendig, Fehlermetriken zu verwenden, um zu bestimmen, welche ML Algorithmus schnitt am besten ab. Eine Zusammenfassung der Fehlermetriken finden Sie daher in Tabelle 5. Wie man sehen kann, war das vorgeschlagene XGBoost-HYT-CV-Modell das genaueste bei der Betrachtung bei den Trainings- und Testdatensätzen. Dies deutet darauf hin, dass kein ML-Algorithmus in der Lage, genaue Ergebnisse für alle Datensätze zu liefern, und verschiedene Algorithmen wurden verwendet in Zuweisung der besten Anpassung an einen bestimmten Datensatz.

Tabelle 5. Vergleich der ML-Algorithmen, die anhand des Datensatzes zur Bruchlast trainiert wurden.

Modell	Datensatz	R	MAP	MAMPE	MAE	RMSE	Berechnung Zeit (s)
LR	Zug	0,8939	53,64 %	27,45 %	54.597	76.468	0,001
POLYREG-HYT	Zug	0,9369	28,10 %	19,26 %	38.308	59.633	11.09
DANN-MPIH-HYT	Zug	0,9811	10,29 %	8,90 %	17.693	34.055	2014.47
XGBoost – HYT-CV	Zug	1,0000	0,00 %	0,00 %	0,0025	0,0041	75,07
LR	Prüfen	0,8909	46,06 %	27,56 %	49.658	67,978	0,00
POLYREG-HYT	Prüfen	0,9412	29,15 %	20,86 %	37.593	50,776	0,00
DANN-MPIH-HYT	Prüfen	0,9791	10,59 %	10,12 %	18.241	32.1723	0,0008
XGBoost – HYT-CV	Prüfen	0,9978	3,79 %	2,61 %	4.694	10.225	0,003

Für die Fälle der geschlossenen Lösungen zeigt Gleichung (5) die Formel mit LR, und Gleichung (6) liefert die vorgeschlagene Vorhersageformel, die durch die POLYREG-HYT ML-Algorithmus:

$$Lf = \mathbf{2{,}0577} \times 10ÿ6 \times Ixx ÿ \mathbf{1{,}5497} \times 10ÿ4 \times Iyy + \mathbf{7{,}7002} \times 10ÿ4 \times J + \mathbf{1{,}9789} \times hÿ \mathbf{8{,}2286} \times b + \mathbf{2{,}1078} \times 10ÿ1 \times A ÿ \mathbf{2{,}0335} \times \mathbf{101} \times L + \mathbf{2{,}5421} \times 10ÿ1 \times R + \mathbf{5{,}8542} \times 10ÿ1 \times fy ÿ \mathbf{9{,}3538} \times 10ÿ2 \times E \quad (5)$$

Machine Translated by Google

$$
\begin{aligned}
Lf = {} & \mathbf{1{,}2526} \times 10^{-3} \times L \times R^{2} - \mathbf{2{,}153} \times 10^{-4} \times Iyy - \mathbf{1{,}455} \times 10^{-3} \times b \times A \\
& + \mathbf{1{,}8898} \times 10^{-5} \times h \times L \times E - \mathbf{1{,}2804} \times 10^{-9} \times Ixx \times h \times L \\
& - \mathbf{7{,}8792} \times 10^{-5} \times h \times R^{2} + \mathbf{1{,}1314} \times 10^{-11} \times Ixx \times h \times R \\
& + \mathbf{6{,}9077} \times 10^{-3} \times L \times fy - \mathbf{1{,}9573} \times 10^{-3} \times R \times fy \\
& + \mathbf{1{,}6174} \times 10^{-8} \times Iyy \times L^{2} + \mathbf{2{,}9069} \times 10^{-11} \times Iyy \times A \times fy \\
& + \mathbf{2{,}2861} \times 10^{-9} \times Iyy \times A \times L - \mathbf{2{,}2406} \times 10^{-9} \times Ixx \times b \times L \\
& + \mathbf{3{,}1524} \times 10^{-8} \times J \times h \times fy + \mathbf{3{,}8102} \times 10^{-4} \times h \times b^{2} \\
& + \mathbf{8{,}3911} \times 10^{-5} \times b \times R \times E - \mathbf{2{,}3274} \times 10^{-6} \times J \times b \\
& - \mathbf{1{,}1303} \times 10^{-2} \times A \times L - \mathbf{6{,}1153} \times 10^{-10} \times Iyy \times R \times E \\
& - \mathbf{4{,}5723} \times 10^{-4} \times b \times L \times fy - \mathbf{1{,}7705} \times 10^{-11} \times J \times fy^{2} \\
& + \mathbf{2{,}7631} \times 10^{-3} \times f_{j}^{2} - \mathbf{7{,}6589} \times 10^{-5} \times J \times f_{j}^{3} + \mathbf{1{,}36958} \times 10^{-10} \times \\
& Ixx \times A - \mathbf{2{,}8373} \times 10^{-9} \times J \times R \times E
\end{aligned}
\tag{6}
$$

Es wurden auch Sensitivitätsanalysen für den Datensatz zur Versagenslast durchgeführt. Eine grafische Zusammenfassung der Ergebnisse ist in Abbildung 28 zu sehen . **Wie man sehen kann, waren die drei einflussreichsten Variablen für die Versagenslast in der Mitte das Trägheitsmoment um die Hauptachse** (Ixx), **die gekrümmte Länge (L) und der Krümmungsradius (R).** Ixx **war bei weitem die einflussreichste Variable, da mit zunehmender Biegesteifigkeit des Trägers eine größere Last erforderlich war, um zum Versagen zu führen. Die Querschnittsfläche (A), Flanschbreite (b), Querschnittshöhe (h), das polare Trägheitsmoment (J) und das Trägheitsmoment um die Nebenachse** (Iyy) **hatten laut dem XGBoost-H**

Diese Erkenntnisse können genutzt werden, um in Zukunft einen verbesserten, einfacheren Datensatz zu erstellen.

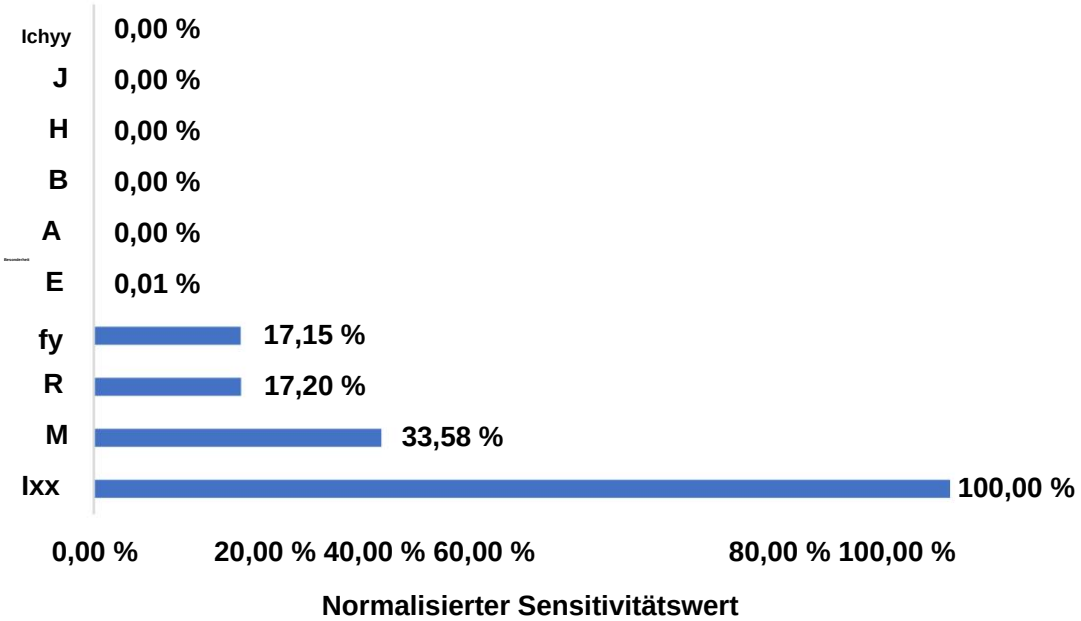
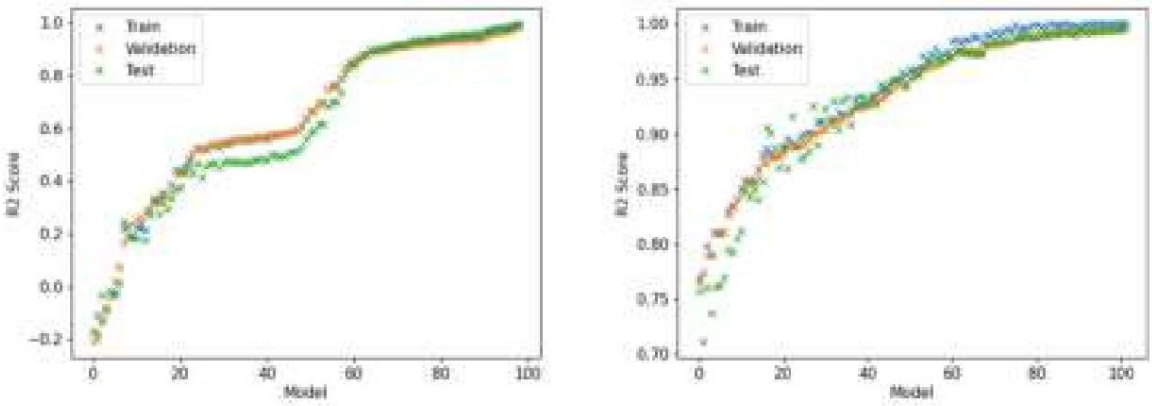


Abbildung 28. Ergebnisse der Sensitivitätsanalyse (XGBoost-HYT-CV).

Bevor wir zum nächsten Validierungsabschnitt übergehen, zeigt Abbildung 29 den angepassten Kreuzvalidierungsverlauf für den Fall der Algorithmen DANN-MPIH-HYT und XGBoost-HYT-CV, die sich aus der Analyse ergeben. Auch hier ist die numerische Antwort der beiden Verläufe, die gegen R2 = 1,0 konvergieren, was die maximale Datenkorrelation darstellt,

Machine Translated by Google



(A) **(B)**

Abbildung 29. Fall der maximalen Belastung. Angepasster Kreuzvalidierungsverlauf für den Fall von (a) DANN-MPIH-HYT und (b) XGBoost-HYT-CV.

8. Validierung

In diesem Abschnitt wird der Validierungsprozess beschrieben, der mithilfe von von Out-of-Sample-FE-Modellen. Ziel der Validierung war die Bewertung der vorgeschlagenen prädiktiven Fähigkeiten der Modelle, Daten zu erfassen, die während des Trainings oder Tests nicht verwendet wurden. Es muss Dabei ist zu beachten, dass die ML-Algorithmen an IPE-Abschnitten (IPE 100, IPE 200, IPE 300, IPE 400, IPE 500 und IPE 600) verschiedener Geometrien. Zur Validierung wurde entschieden, Profile nach dem South African Steel Construction Handbook **(SASCH) zu verwenden. Die betrachteten Abschnitte waren 203 × 133 × 25, 305 × 165 × 40 und 457 × 191 × 67. Daher Die vorgeschlagenen Vorhersagemodelle waren noch nie mit dieser Art von Schnittgeometrie konfrontiert worden. Zusätzlich wurden die R/L-Verhältnisse außerhalb der Stichprobe von 2,5 und 5 berücksichtigt und die Gesamtspanne des Abschnitts variierte je nach Abschnittstiefe. Außerhalb der Stichproben liegende Streckgrenzen von 285 MPa und 325 MPa wurden berücksichtigt und die berücksichtigten Elastizitätsmodulwerte waren 195 GPa und 205 GPa. Dies führte zur Erzeugung von insgesamt 48 Out-of-Sample-Balken für Validierungszwecke. Die deskriptiven Statistiken zum neuen Validierungsdatensatz können siehe Tabelle 6.**

Tabelle 6. Deskriptive Statistik der Validierungsmodelle.

	Bedeuten	Mittlere	Std	Mindest	Max	Schiefe	Kurtosis
Ixx (mm4)	134.333.333	85.500.000	116.928.298	23.500.000	294.000.000	0,58	ÿ1,53
Iyy (mm4)	8.416.667	7.660.000	4.738.358	3.090.000	14.500.000	0,25	ÿ1,53
J (mm4)	194.667	149.000	134.794	59.000	376.000	0,49	ÿ1,53
Hmm)	320,20	303,8	103,97	203.2	453,60	0,24	ÿ1,53
b (mm)	162,8	165.1	23,37	133,4	189,90	ÿ0,15	ÿ1,53
A (mm2)	5643.33	516	2225,95	3220	8550	0,33	ÿ1,53
Länge (m)	9.17	8,5	5	3	18	0,56	ÿ0,75
R (m)	34,38	27,5	22.9	7.5	90	1.11	0,69
fy (MPa)	305	305	20.21	285	325	0,00	ÿ2,09
E (GPa)	200	200	5.05	195	205	0,00	ÿ2,09

8.1. Validierung der Ergebnisse des Deflection-ML

Die vorgeschlagenen Vorhersagemodelle, die entwickelt wurden, um die Abweichung der Strahlen wurden verwendet, um die Auslenkungen der Out-of-Sample-Daten vorherzusagen. Dieser Abschnitt konzentriert sich nur auf den beiden Algorithmen, nämlich DANN-MPIH-HYT und XGBoost-HYT-CV, die

Machine Translated by Google

Es stellte sich heraus, dass es den Rest der von ML generierten Vorhersagemodelle übertrifft. Korrelationsdiagramme der beiden ML-Modelle sind in den Abbildungen 30 und 31 zu sehen . Diese Ergebnisse wurden mit der aktuellen Analysemethode, dem zweiten Castigliano-Theorem, verglichen. Das Diagramm, das die Korrelation des zweiten Castigliano-Theorems zeigt, ist in Abbildung 32 z

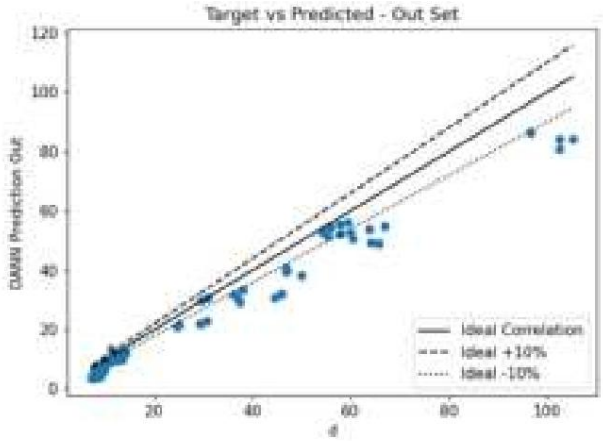


Abbildung 30. Korrelation zwischen der mittels FEM ermittelten und der mittels DANN-MPIH-HYT geschätzten Auslenkung auf dem Validierungsdatensatz.

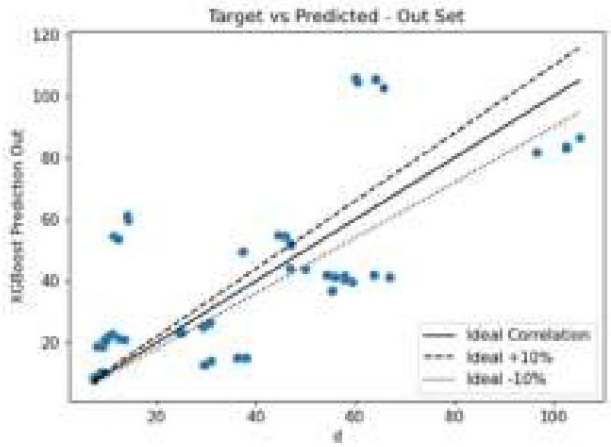


Abbildung 31. Korrelation zwischen der mit FEM ermittelten Auslenkung und der mit XGBoost-HYT-CV im Validierungsdatensatz geschätzten Auslenkung.

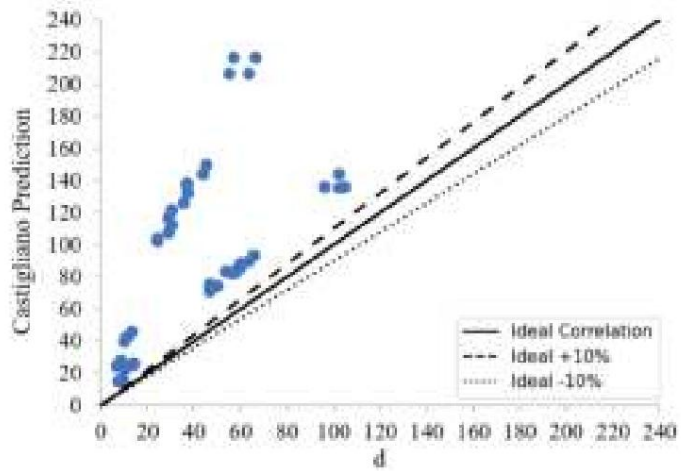


Abbildung 32. Korrelation zwischen der mithilfe von FEM ermittelten Auslenkung und der mithilfe des Castigliano-Theorems auf dem Validierungsdatensatz geschätzten Auslenkung.

tt tt
tt tt

Machine Translated by Google

Eine Zusammenfassung der Fehlermetriken aller ML-Algorithmen finden Sie in Tabelle 7. Der DANN-MPIH-HYT-Algorithmus übertraf alle ML-Algorithmen und die derzeit verwendete analytische Formel. Die POLYREG-HYT-Formel schnitt am schlechtesten ab. Diese schlechte Die Leistung wurde auf Überanpassung zurückgeführt, da die LR-Formel ziemlich genau war. Es sollte Es ist zu beachten, dass diese Ergebnisse zwar mit FEM-Modellen verifiziert wurden, die FE-Modellierung Die verwendete Technik wurde experimentell mit einem experimentellen Strahl überprüft, bei dem der Fehler erfahren war vernachlässigbar.

Tabelle 7. Zusammenfassung der Fehlermetriken im Validierungsdatensatz (Fall der Ablenkung).

Algorithmus	R	MAP	MAMPE	MAE	RMSE
LR	0,9267	82,37 %	51,84 %	20.471	24.426
POLYREG-HYT	0,5174	122,73 %	131,81 %	52.047	72.419
DANN-MPIH-HYT	0,988	19,08 %	16,19 %	6.393	8.389
XGBoost-HYT-CV	0,7007	68,37 %	42,40 %	16.744	21.509
Castigliano	0,6781	155,42 %	126,23 %	49.842	65.574

8.2. Validierung der ML-Ergebnisse für die Bruchlast

Die zuvor diskutierten vorgeschlagenen Vorhersagemodelle wurden verwendet, um den Ausfall vorherzusagen Belastung der Out-of-Sample-Daten. Dieser Abschnitt fasst die Ergebnisse zusammen. Keine analytischen Formeln werden in diesem Abschnitt behandelt, da der Schwerpunkt dieses Artikels eher auf der Ablenkungsschätzung liegt und keine Untersuchung der Ausfallarten. Aufgrund der Komplexität der Ausfallarten von horizontal gekrümmte Balken, wurden zahlreiche Gleichungen herangezogen, und ihre Einbeziehung würde überfordern den Artikel. Der Fokus liegt hier auf DANN-MPIH-HYT und XGBoost-HYT-CV da sie den anderen Vorhersagemodellen überlegen waren. Korrelationsdiagramme können siehe Abbildungen 33 und 34.

Die Ergebnisse zeichnen ein anderes Bild als das, was während des Trainings und der Tests zu sehen war. Der XGBoost-HYT-CV schien keine besseren Ergebnisse zu erzielen als die mit dem DANN-MPIH-HYT-Algorithmus; allerdings war ein genauerer Blick auf die Fehlermetriken erforderlich. Eine Zusammenfassung der Fehlermetriken finden Sie in Tabelle 8.

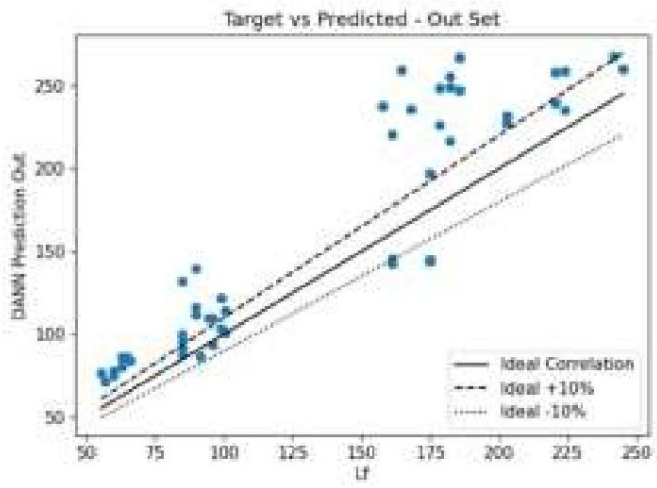


Abbildung 33. Zusammenhang zwischen der mittels FEM ermittelten Versagenslast und der geschätzten Versagenslast Verwendung von DANN-MPIH-HYT auf dem Validierungsdatensatz.

Machine Translated by Google

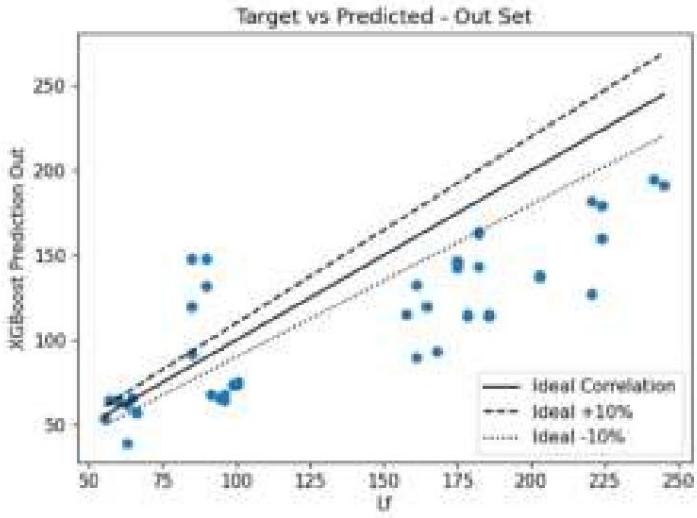


Abbildung 34. Zusammenhang zwischen der mittels FEM ermittelten Versagenslast und der geschätzten Versagenslast Verwenden von XGBoost-HYT-CV im Validierungsdatensatz.

Tabelle 8. Zusammenfassung der Fehlermetriken im Validierungsdatensatz (Fall der Fehlerlast).

Algorithmus	R	MAP	MAMPE	MAE	RMSE
LR	0,1440	478,86 %	403,82 %	548.0527	560.4963
POLYREG-HYT	0,2843	539,71 %	500,12 %	678.7503	885,5885
DANN-MPIH-HYT 0,9235		23,22 %	22,42 %	30,4302	38.4831
XGBoost-HYT-CV	0,7914	26,42 %	26,87 %	36,4645	42,9955

Wie man sieht, war die Korrelation deutlich schlechter und alle Fehlermetriken zeigte, dass die durch den XGBoost-HYT-CV bereitgestellten Vorhersagen weniger genau waren als die Vorhersagen des DANN-MPIH-HYT-Algorithmus. Dies ist das gleiche Phänomen, wie es im Ablenkungs-Datensatz beobachtet wurde, bei dem das DANN-MPIH-HYT Algorithmus schnitt mit den Out-of-Sample-Daten besser ab als alle anderen ML Algorithmen. Daher ist die längere Trainingsdauer des DANN-MPIH-HYT Man kann sagen, dass der Algorithmus zu einer verbesserten Genauigkeit bei der Validierung führt.

9. Schlussfolgerungen und Empfehlungen

Diese Studie zeigte, dass die FE-Modellierung die experimentellen Ergebnisse reproduzieren konnte mit horizontal gekrümmten Stahl-I-Trägern gewonnen. Für die Zwecke dieser Forschungsarbeit wurde ein Es wurde ein Experiment durchgeführt, bei dem ein gebogener IPE100-Stahlträger belastet wurde unter vertikaler Belastung. Die erhaltenen experimentellen Daten wurden dann zur Validierung numerischer Modelle durch den Einsatz der CivilFEM-Software. Die Verwendung von quadratischen Festkörper-FEs mit eine hexaedrische Maschenweite von 50 mm sowie entsprechende Materialkonstituentenmodelle gepaart mit nichtlinearen Analysen führten zu den genauesten Ergebnissen im Vergleich zu den experimentelle Daten.

Es wurde eine parametrische Untersuchung durchgeführt, bei der festgestellt wurde, dass die FE-Modellierung Die in dieser Forschungsarbeit beschriebene Technik war in der Lage, die mittlere Spannweite genau zu schätzen Durchbiegung und Drehung von horizontal gekrümmten Stahl-I-Trägern. Die MAE wurde mit 3,32 % angegeben bei der Schätzung der Ablenkung und 9,17 % bei der Schätzung der Rotation, was weit über dem analytische Methoden, die einen Fehler von 19,80 % bei der Schätzung der Durchbiegung und 16,07 % bei der Schätzung der Rotation.

Das experimentell validierte Modell wurde dann zur Entwicklung zahlreicher FE-Netze verwendet. die unter Lastbedingungen im Grenzzustand der Tragfähigkeit analysiert wurden. Die numerisch erhaltenen Die Ergebnisse wurden verwendet, um einen großen Datensatz zu entwickeln. Insgesamt wurden 864 Modelle erstellt, die

Machine Translated by Google

umfasste die gesamte IPE-Querschnittsliste (IPE100 bis IPE600). In dieser Studie wurden insgesamt 10 unabhängige Variablen berücksichtigt.

Zur Entwicklung der vorgeschlagenen Vorhersagemodelle wurden zahlreiche ML-Algorithmen verwendet, nämlich LR, POLYREG-HYT, DANN-MPIH- HYT und XGBoost-HYT-CV. Während der **Validierungsphase wurden experimentell validierte FE-Modelle außerhalb des Trainingsdatensatzes erstellt, um die verschiedenen in dieser Forschungsarbeit vorgeschlagenen Vorhersagemodelle zu validieren . Um die Genauigkeit der verfügbaren Analysemethoden zur Berechnung der Durchbiegung und Bruchlast gekrümmter Stahl-I-Träger weiter zu bewerten, wurden die Validierungsdaten auch zur Bewertung der analytischen Formeln von Castilgiano verwendet. Den numerischen Ergebnissen zufolge war der DANN-MPIH-HYT-Algorithmus bei der Schätzung sowohl der Durchbiegung als auch der Bruchlast am genauesten. Bei der Schätzung der Durchbiegung hatte das vorgeschlagene Vorhersagemodell von DANN-MPIH-HYT einen MAMPE von 16,19 %. Dies erwies sich als erhebliche Verbesserung im Vergleich zur analytischen Methode, Castiglianos zweitem Theorem, die einen extrem hohen MAMPE-Wert von 126,23 % ergab, was den Bedarf an genaueren und objektiveren Vorhersagemodellen unterstreicht . Basierend auf den Erkenntnissen dieser Dissertation kann man außerdem mit Sicherheit davon ausgehen, dass die vorgeschlagenen, ML-generierten Vorhersagemodelle weitaus genauer sind als die aktuellen analytischen M**

Darüber hinaus erwies sich das von DANN-MPIH-HYT erstellte Modell bei der Schätzung der Bruchlast gekrümmter Stahl-I-Träger als wesentlich genauer als die anderen vorgeschlagenen Modelle. Dies ist höchstwahrscheinlich auf die Komplexität horizontal gekrümmter Stahl-I-Träger und die Art der Datensätze zurückzuführen. Horizontal gekrümmte Stahl-I-Träger weisen verschiedene Brucharten auf, da sie aufgrund von Biegung, Torsion, Scherung oder einer Kombination davon versagen können. Die Träger können auch aufgrund von seitlichem Torsionsknicken ve Daher ist ein größerer Datensatz erforderlich, damit die ML-Algorithmen die Muster ableiten können, die mit den Ausfallmodi der Balken verbunden sind. Derzeit enthält die internationale Literatur zahlreiche Gleichungen für jeden der Ausfallmodi. Daher gibt es keine einzelne Formel, mit der die Schätzungen verglichen werden können. Es wird angenommen, dass der DANN-MPIH-HYT-Algorithmus, der zu einem MAMPE von 22,42 % führte, in Zukunft weiter verbessert werden kann, indem entweder der Datensatz erweitert oder unterschiedliche Formeln für die verschiedenen Ausfallmodi bereitgestellt werden, wie dies derzeit in allen Konstruktionscodes der Fall ist.

Schließlich kann diese Forschungsstudie erstmals in der internationalen Literatur genaue und objektive Vorhersagemodelle vorschlagen, die alle bekannten Formeln zur Berechnung der Durchbiegung gekrümmter Stahl-I-Träger und ihrer maximalen Belastbarkeit übertreffen. Die derzeit größten in der internationalen Literatur verfügbaren Datensätze wurden auch für das Training und Testen der vorgeschlagenen Vorhersagemodelle entwickelt. Dieses Pilotprojekt ebnet den Weg für die Entwicklung zukünftiger Konstruktionsformeln, die **bei unterschiedlichen Randbedingungen genauer auf eine größere Bandbreite von Trägern angewendet werden können .**

Diese Forschung beschränkte sich auf die Bewertung der Durchführbarkeit der Verwendung von FE-Modellen zur Abschätzung der Durchbiegung und Bruchlast in der Spannweitenmitte von horizontal gekrümmten Stahl-I-Trägern mit einer einzigen Punktlast in der Spannweitenmitte und vollständiger Befestigung an beiden Enden. Bei der Entwicklung der Datensätze war die Verwendung von minimalen und maximalen geometrischen Merkmalen vorgesehen. Deshalb sollten die vorgeschlagenen Vorhersagemodelle nicht für Träger verwendet werden, deren Abmessungen größer oder kleiner sind als die jeweiligen maximalen und minimalen geometrischen Werte der Träger in den hier entwickelten Datensätzen.

Empfehlungen für künftige Arbeiten sollten außerdem Folgendes beinhalten: • Durchführung weiterer Experimente an gekrümmten Stahl-I-Trägern zur weiteren Validierung der vorgeschlagenen Vorhersagemodelle; • Berücksichtigen Sie verschiedene Randbedingungen, wie z. B. torsionsgebundene Träger, und bestimmen Theoretisch sollte dies keinen signifikanten Einfluss auf die Bruchlast haben. Es wird jedoch erwartet, dass dies drastische Auswirkungen auf die Spannungsverteilung und Rotation des Abschnit • Berücksichtigen Sie verschiedene Belastungszustände, wie z. B. gleichmäßig verteilte Lasten. • Berücksichtigen Sie die Auswirkungen von Eigenspannungen auf die Spannungsverteilung und untersuchen Sie, ob sich dies auf Durchbiegung und Bruchlasten auswirkt.

Machine Translated by Google

bei horizontal gekrümmten Stahl-I-Trägern größer als bei geraden Trägern, aufgrund des anfänglichen Kaltverformungsprozesses. Daher variieren die Restspannungen je nach vorliegendem R/L-Verhältnis. Derzeit gibt es in der internationalen Literatur keine Formel, mit der die Variation der Restspannungen über die Länge des Trägers und innerhalb des Querschnitts berücksichtigt werden kann. Daher ist eine detaillierte Untersuchung erforderlich. • Entwickeln Sie eine genaue Formel zur Bestimmung der Rotation in der Spannweite horizontal gekrümmter Stahl-I-Träger anhand eines relevanten Datensatzes.

Beiträge der Autoren: Konzeptualisierung, GM und EA; Methodik, GM, EA und SS; Software , EA und GM; Validierung, EA und GM; Formale Analyse, EA; Untersuchung, EA; Ressourcen, GM und EA; Datenkuratierung, EA; Schreiben – Vorbereitung des Originalentwurfs, EA; Schreiben – Überprüfen und Bearbeiten, GM und SS; Visualisierung, EA und GM; Überwachung, GM und SS; Projektverwaltung , GM; Mittelbeschaffung, EA und GM. Alle Autoren haben die veröffentlichte **Version des Manuskripts gelesen und stimmen ihr zu .**

Finanzierung: Diese Forschung wurde vom National Research Fund (NRF South Africa [MND21062361 5086]) finanziert und der APC wurde von der Zeitschrift finanziert.

Datenverfügbarkeitserklärung: Die Datensätze, die für die Anforderungen dieser Forschungsarbeit entwickelt wurden, finden Sie unter dem folgenden Link (https://github.com/nbakas/nbml/tree/a0d27c94dd59068 8815180ebf6428963a24ca245/Datensätze, abgerufen am 1. Juli 2024).

Interessenkonflikte: Die Autoren erklären, dass keine Interessenkonflikte vorliegen.

Verweise

1. **Liew, JR; Thevendran, V.; Shanmugam, N.; Tan, L. Verhalten und Konstruktion horizontal gekrümmter Stahlträger.** J. Constr. Steel Res. **1995,** 32, **37–67. [CrossRef]**
2. **Sonck, D.; Van Impe, R. Untersuchung von Restspannungen in I-Profilelementen und Zellelementen. In Proceedings of the Annual Stabilitätskonferenz Strukturelle Stabilitätsforschung, St. Louis, MO, USA, 16.–20. April 2013.**
3. **Rossini, N.; Dassisti, M.; Benyounis, K.; Olabi, A.-G. Methoden zur Messung von Eigenspannungen in Bauteilen.** Mater. Des. **2012,** 35, **572–588. [CrossRef]**
4. **King, C.; Brown, D.** Design von gebogenem Stahl; **Steel Construction Institute Ascot: Ascot, Großbritannien, 2001. 5. Rettie, NJ Biegeknickfestigkeit von horizontal gekrümmten Stahl-I-Trägern. MSc-Arbeit, University of Alberta, Edmonton, AB, Kanada, 2015.**
6. **Dowsell, B.** Design Guide 33: Konstruktion gebogener Bauteile; **American Institute of Steel Construction: Chicago, IL, USA, 2018.**
7. **Lee, K.; Davidson, JS; Choi, J.; Kang, Y. Zugfestigkeit von horizontal gekrümmten Stahl-I-Trägern mit gleichen Endmomenten.** Eng. Struct. **2017, 153 , 17–31.**
8. **Wong, Y.-C. Analyse und Entwurf horizontal gekrümmter Balken. MSc-Arbeit, Oregon State University, Corvallis, OR, USA, 1969.**
9. **Dahlberg, T. Verfahren zur Berechnung der Durchbiegungen gekrümmter Balken.** Int. J. Eng. Educ. **2004,** 20, **503–513.**
10. **Shanmugam, N.; Thevendran, V.; Liew, JR; Tan, L. Experimentelle Untersuchung von Stahlträgern mit gekrümmter Planfläche.** J. Struct. Eng. **1995,** 121, **249–259. [CrossRef]**
11. **Shanmugam, N.; Mahendrakumar, M.; Thevendran, V. Traglastverhalten von horizontal gekrümmten Blechträgern.** J. Constr. Steel Res. **2003,** 59, **509–529. [CrossRef]**
12. **Dabaon, M.; El-Naggar, M.; Yossef, N. Experimentelle und theoretische Untersuchung gekrümmter gewalzter und zinnenförmiger Verbundträger.** Alex. Eng. J. **2003,** 42, **219–230.**
13. Lim, J.; Kang, Y.-J.; Lee, J.; Kim, S.; Lee, K. Experimentelle und analytische Untersuchung von horizontal gekrümmten I-Trägern, die **gleichen Endmomenten ausgesetzt sind .** Metals **2021,** 11, **1132. [CrossRef]**
14. **Markou, G.; Bakas, N.; Papadrakakis, M.; Chatzichristofis, S. Ein allgemeiner Rahmen für leistungsstarke maschinelle Lernalgorithmen : Anwendung in der Strukturmechanik.** Comput. Mech. **2024,** 73, **705–729. [CrossRef]**
15. **Gravett, DZ; Mourlas, C.; Taljaard, V.-L.; Bakas, N.; Markou, G.; Papadrakakis, M. Neue Formeln für die Wechselwirkung zwischen erdbewehrten Betonkonstruktionen unter Verwendung von Algorithmen des maschinellen Lernens und neuronalen Netzwerken.** Soil Dyn. Earthq. Eng. **2021,** 144, **106656. [CrossRef]**
16. **Markou, G.; Bakas, NP Vorhersage der Scherkapazität von schlanken Stahlbetonträgern ohne Bügel durch Anwendung von Algorithmen der künstlichen Intelligenz in einer großen Datenbank von Trägern, die durch dreidimensionale nichtlineare Finite-Elemente-Analyse generiert wurden.** Comput. Concr. **2021,** 28, **433–447.**
17. **AlHamaydeh, M.; Markou, G.; Bakas, N.; Papadrakakis, M. KI-basierte Scherkapazität von FRP-verstärkten Beton-Tiefbalken ohne Bügel.** Eng. Struct. **2022,** 264, **114441. [CrossRef]**
18. **Calitz, D.; Markou, G.; Bakas, N.; Papadrakakis, M. Entwicklung von Fundamentalperiodenformeln für Stahlrahmenkonstruktionen durch maschinelles Lernen und automatisierte Algorithmen. In Proceedings of the Compdyn 2023, Athen, Griechenland, 12.–14. Juni 2023**

Machine Translated by Google

19. Chibaya, VT; Markou, G.; Bakas, N. Entwicklung von Formeln für die Querschnittsdrehungen aufgrund der Biegung gekrümmter Stahl-I-Träger durch KI- und ML-Algorithmen. In Proceedings of the Compdyn 2023, Athen, Griechenland, 12.–14. Juni 2023.

20. van der Westhuizen, AM; Bakas, N.; Markou, G. Entwicklung eines künstlichen neuronalen Netzwerkmodells, das die Grundschwingungsdauer von Stahlkonstruktionen anhand eines großen Datensatzes vorhersagt. In Proceedings of the Compdyn 2023, Athen, Griechenland, 12.–14. Juni 2023.

21. Ababu, E.; Markou, G.; Bakas, N. Entwicklung einer Formel zur Bestimmung der Durchbiegung horizontal gekrümmter Stahl-I-Träger mithilfe von maschinellem Lernen und Finite-Elemente-Modellierung. In Proceedings der 14. Internationalen Konferenz über Agenten und künstliche Intelligenz, virtuell, 3.–5. Februar 2022; S. 958–963. [CrossRef]

22. Aminu, IM; Shariff, MNM Strategische Ausrichtung, Zugang zu Finanzmitteln, Geschäftsumfeld und Leistung von KMU in Nigeria: Datenscreening und vorläufige Analyse. Eur. J. Bus. Manag. **2014, 6, 124–132.**

23. Dimopoulos, T.; Tyralis, H.; Bakas, NP; Hadjimitsis, D. Genauigkeitsmessung von Random Forests und linearer Regression für Massenbewertungsmodelle, die die Preise von Wohnwohnungen in Nikosia, Zypern, schätzen. Adv. Geosci. **201**
[Querverweis]

Haftungsausschluss/Anmerkung des Herausgebers: Die in allen Veröffentlichungen enthaltenen Aussagen, Meinungen und Daten sind ausschließlich die der einzelnen Autoren und Mitwirkenden und nicht die von MDPI und/oder den Herausgebern. MDPI und/oder die Herausgeber lehnen jegliche Verantwortung für Personen- oder Sachschäden ab, die aus den im Inhalt erwähnten Ideen, Methoden, Anweisungen oder Produkten resultiere

Machine Translated by Google

Berechnung

MDPI

Artikel

Modellierung der Auswirkungen der Cloud-Speicherheterogenität auf HPC Anwendungsleistung

Jack Marquez und Oscar H. Mondragon

Fakultät für Ingenieurwissenschaften, Universidad Autonoma de Occidente, Cali 760030, Kolumbien; jdmarquez@uao.edu.co * Korrespondenz: ohmondragon@uao.edu.co

Zusammenfassung: Die HPC-Forschungsgemeinschaft hat kürzlich vorgeschlagen, High-Performance-Computing-Anwendungen (HPC) von HPC-Clustern in Cloud-Computing-Cluster, auch HPC-Cloud genannt, zu verschieben . **Die Migration dieser Anwendungen von der erstgenannten Umgebung in die letztgenannte kann aufgrund der unterschiedlichen verwendeten Technologien und der suboptimalen Nutzung und Konfiguration von Cloud-Ressourcen wie heterogenem Speicher erhebliche Auswirkungen auf ihre Leistung haben. Mithilfe von Wahrscheinlichkeitsmodellen kann die Leistung dieser Anwendungen vorhergesagt und für das ne Aufgrund der Leistungsschwankungen ist die Modellierung der Leistung von Anwendungen, die heterogene Speicher verwenden, in der HPC-Cloud eine schwierige Aufgabe. In diesem Dokument wird ein neuartiges Modell auf Grundlage der Extremwerttheorie (EVT) zur Analyse, Charakterisierung und Vorhersage der Leistung von HPC-Anwendungen vorgestellt, die heterogene Speichertechnologien in der Cloud und hochleistungsfähige verteilte parallele Dateisysteme verwenden. Anders als Standardansätze konzentriert sich unser Modell auf Extremwerte und erfasst die tatsächliche Variabilität und potenzielle Engpässe bei der Speicherleistung. Unser Modell wird mithilfe einer Return-Level-Analyse validiert, um die Leistung repräsentativer wissenschaftlicher Benchmarks zu untersuchen, die in großem Maßstab auf heterogenem Cloud-Speic**

Schlüsselwörter: HPC-Cloud; heterogener Speicher; Leistungsmodellierung; Extremwerttheorie

check for updates

Zitat: Marquez, J.; Mondragon, OH Modellierung der Auswirkungen der Heterogenität von Cloud-Speichern auf die Leistung von HPC-Anwendungen. Computation 2024, 12, 150. https:// doi.org/ 10.3390/computation12070150

Wissenschaftlicher Herausgeber: Demos T. Tsahalis

Empfangen: 15. Mai 2024
Überarbeitet: 22. Juni 2024
Akzeptiert: 11. Juli 2024
Veröffentlicht: 19. Juli 2024

Copyright: © 2024 bei den Autoren. Lizenznehmer MDPI, Basel, Schweiz.

Dieser Artikel ist ein Open Access-Artikel vertrieben unter den Bedingungen und Bedingungen der Creative Commons Namensnennungslizenz (CC BY) (https:// creativecommons.org/licenses/by/ 4.0/).

1. Einleitung

High-Performance Computing (HPC) kann als die Nutzung von Supercomputern zur effizienten Lösung komplexer Rechenprobleme definiert werden **[1], während Cloud Computing als allgegenwärtiger und bedarfsgesteuerter Zugriff auf konfigurierbare Rechenressourcen** definiert wird **[2]. Obwohl diese beiden Technologien ursprünglich für unterschiedliche Zwecke entwickelt wurden, haben jüngste Versuche, sie zu integrieren, zum neuen Konzept der HPC-Cloud geführt. Netto et al. [3] definierten die HPC- Cloud als „die Nutzung von Cloud-Ressourcen zum Ausführen von HPC-Anwendungen“. Aus dieser Arbeit sind sowohl neue Herausforderungen als auch neue Möglichkeiten entstan**

Ab etwa 2009 begannen einige HPC-Anwender, die Cloud als kostengünstige Alternative zu teuren HPC-Clustern zu betrachten. Die Idee eines Pay-on-Demand-Geschäftsmodells, das flexibel war und dem Kunden mehr Kontrolle über die Ressourcen bot, war Cloud Computing ermöglicht die flexible Bereitstellung von Rechenressourcen wie CPUs, Speicher, Speicher, Netzwerken und Grafikprozessoren. Diese Ressourcen sind elastisch, das heißt, sie können entsprechend den Anforderungen jeder Anwendung skaliert werden. Der sofortige Zugriff auf Rechenressourcen kann Benutzern helfen, ihre Anwendung dann bereitzustellen oder zu testen, wenn sie sie benötigen [6].

Die Bereitstellung von HPC-Anwendungen über Cloud-Computing-Cluster bringt mehrere Herausforderungen mit sich, die noch nicht gelöst sind. Ein potenzielles Problem betrifft Speichersysteme, da Cloud-Cluster nicht die gleichen Speichersysteme verwenden wie HPC-Cluster. Speichersysteme können auch als Problem bei der Einführung von Cloud-Systemen für HPC- **Anwendungen betrachtet werden [3,7,8]. Die Vorhersage der Leistung von Großanwendungen in heterogenen Speichersystemen ist eine Herausforderung. Technische Dok**

Machine Translated by Google

und die Latenz von Speichertechnologien reichen angesichts der Auswirkungen mehrerer Störquellen nicht aus, um die Leistung von HPC-Anwendungen vorherzusagen.

In diesem Artikel beschreiben wir ein auf der Extremwerttheorie (EVT) basierendes statistisches Modell, mit dem die Leistung von HPC-Anwendungen, die auf heterogenen Speicher in Cloud-Systemen angewiesen sind, charakterisiert und vorhergesagt werden kann . Unser Artikel enthält die folgenden Beiträge: • Wir präsentieren ein EVT-basiertes Modell zur Charakterisierung der Leistung von HPC-Anwendungen , die heterogene Speichertechnologien in Cloud-Computing-Systemen verwenden. • Wir entwickeln eine Methode zur Vorhersage der Leistung von HPC-Anwendungen auf Grundlage einer Renditeanalyse mit unterschiedlichen Anzahlen von Speicherknoten, die Speicheralgorithmen informieren und somit die Leistung von Anwendungen verbessern kann. • Wir bewerten das vorgeschlagene Modell, indem wir es zur Vorhersage der Leistung von HPC- Anwendungen verwend

Dieses Dokument ist wie folgt gegliedert: Abschnitt 2 beschreibt die wichtigsten Konzepte im Zusammenhang mit heterogenem Speicher in Cloud-Computing-Infrastrukturen, parallelen Dateisystemen zur Unterstützung von HPC-Anwendungen in der Cloud und der Extremwerttheorie. In Abschnitt 3 beschreiben wir unseren Ansatz zur Modellierung der Auswirkungen der Verwendung heterogenen Cloud-Speichers auf die Leistung von HPC-Anwendungen und validieren dieses Modell in Abschnitt 4 mithilfe einer Renditeanalyse. Abschnitt 5 beschreibt einige der wichtigsten damit verbundenen Arbeiten. Abschließend präsentieren wir in Abschnitt 6 Schlussfolgerungen und Vorschläge für zuk

2. Hintergrund

In diesem Abschnitt beschreiben wir die Speichersysteme, die derzeit in allgemeinen Cloud-Computing-Umgebungen verwendet werden, und zeigen, wie diese im HPC effizient genutzt werden können. Anschließend konzentrieren wir uns auf BeeGFS als flexible und skalierbare Alternative für die Bereitstellung eines parallelen Dateisystems, das für HPC auf Cloud-Infrastruktur optimiert ist. Abschließend beschreiben wir wichtige Konzepte im Zusammenhang mit der Modellierung der Anwendungsleis

2.1. Heterogene Speichersysteme im Cloud Computing

In Cloud Computing-Clustern wird die Leistung datenintensiver Anwendungen unter anderem durch die Datenübertragungsraten der Festplatte begrenzt. Um die Auswirkungen auf die Leistung zu mildern, werden Cloud-Systeme, die hierarchische und heterogene Speicherarchitekturen bieten, immer üblicher. Die Integration verschiedener Speicheralternativen wie Solid-State-Laufwerke (SSDs), Festplattenlaufwerke (HDDs) oder sogar RAMDISK (ein RAM-Block, der als flüchtiger Speicher verwendet wird) kann die Leistung von Anwendungen verbessern, indem die Eigenschaften jedes Speichertyps ausgenutzt werden [9].

Tabelle 1 zeigt die Speichertechnologien und -dienste, die von den drei größten Cloud- Anbietern angeboten werden. Es ist ersichtlich, dass Cloud-Anbieter eine Vielzahl heterogener Speichergeräte anbieten , von denen jedes bestimmte Besonderheiten aufweist. Beispielsweise bietet Azure Festplatten mit hohem Durchsatz, hohen IOPS und geringer Latenz (Ultra-Disk), aber auch eine kostengünstige Festplatte mit Standarddurchsatz, IOPS und Latenz (Standard-HDD). Zusätzlich zu einer Allzweck -SSD bietet AWS einen SSD-Typ mit konfigurierbaren IOPS (io2-io1) und einen anderen, der auf Geschwindigkeit optimiert ist. Jede dieser Festplatten ist für spezielle Fälle konzipiert und bietet unterschiedliche Funktionen wie Volumengröße, maximale IOPS und maximalen Durchsatz. GCP bietet auch verschiedene Arten von Festplatten und bietet zonale und regionale Replikation sowie Hochleistungsfestplatten (Extreme Persistent Disk). Die drei wichtigsten Arten von Speicherdiensten sind Objekt-, Block- und Dateispeicher, die die verfügbaren Festplattentypen nutzen.

Machine Translated by Google

Tabelle 1. Von den drei größten Cloud-Anbietern angebotene Speicherdienste.

Cloud-Plattform	Datenträgertypen	Speicherdienste/Dateisysteme
Azurblau	Premium-SSD Standard-SSD Standard-Festplatte Ultra-Disk	Blob-Speicher Azure-Dateien Warteschlangen Tabellen Datenträger
Amazon Web Services	Von SSD-io2 bereitgestellte IOPS SSD-io2 Block Express SSD-io1 SSD-gp3-Allzweck SSD-gp2 HDD-st1-Optimierte Geschwindigkeit HDD-sc1-Kalt	S3 Elastic Block Store Elastisches Dateisystem Gletscher Speichergateway FSx Windows FSx Lustre
Google Cloud Platform	SSD-NVMe SSD Festplatte Zonale persistente Festplatte Regionaler persistenter Datenträger Extrem persistente Festplatte	Blockspeicher - Persistente Festplatte Cloud-Speicher Standardspeicher Nearline-Speicher Coldline-Speicher Archiv Dateispeicher

2.2. Nutzung heterogener Cloud-Speicher für HPC

Moderne HPC-Systeme sind darauf ausgelegt, hohe Leistung für wissenschaftliche Anwendungen bereitzustellen, indem sie Netzwerke mit geringer Latenz wie InfiniBand und optimierte verteilte parallele Dateisysteme bieten. LustreFS [10] und BeeGFS [11] sind zwei der am häufigsten verwendeten parallelen Dateisysteme in den Top 500 HPC-Clustern. Beide dieser parallelen Systeme werden zunehmend auf Cloud-Plattformen eingesetzt [11–13], mit dem Ziel, einen schnellen Zugriff auf große Datenmengen in Cloud-Clustern zu erreichen.

Der Einsatz von Lustre und BeeGFS hilft, den Schreib- und Lesevorgang großer Datenmengen in Cloud-Clustern zu maximieren. In dieser Arbeit konzentrieren wir uns auf das parallele Dateisystem BeeGFS , da es bestimmte Funktionen aufweist, die es besonders für Cloud-Umgebungen geeignet machen, wie beispielsweise seine einfache Installation. Es ist außerdem für verschiedene Linux-Distributionen verfügbar, hardwareunabhängig und unterstützt hohe Parallelität. Ein weiterer Vorteil besteht darin, dass es nicht notwendig ist, den Verwaltungsdienst auf einer dedizierten Maschine zu hosten.

BeeGFS Paralleles Dateisystem

BeeGFS ist ein Dateisystem im Client-Server-Modell, das mit Fokus auf Leistung und Skalierbarkeit entwickelt wurde. Abbildung 1 zeigt die Architektur von BeeGFS, das aus drei Knotentypen besteht : einem Verwaltungsserver, einem Metadatenserver und einem Objektspeicherserver. Der Verwaltungsserver ist der Knoten, der für die Konfiguration des BeeGFS-Dateisystems und seiner anderen Komponenten zuständig ist; in einer BeeGFS-Konfiguration gibt es normalerweise nur einen Verwaltungsserver. Der Metadatenserver enthält das Metadatenziel, ein Speichergerät, das die Struktur des Dateisystems und die Dateinamen enthält. Dieser Server verwaltet auch Indizes und Namespaces. Der Objektspeicherserver ist dafür verantwortlich, die vom Client gesendeten Daten zu empfangen und im Objektspeicherziel (OST) zu speichern. Eine bestimmte BeeGFS-Konfiguration kann eine große Anzahl von OSTs umfassen, und BeeGFS versucht, die Daten effizient zu speichern, indem

BeeGFS wurde mit einer benutzerfreundlichen Installation und Verwaltung der Funktionen entwickelt. Zwei der wichtigsten Aspekte dieser einfachen Installation sind, dass BeeGFS keinen Kernel-Patch benötigt und dass es mit grafischen Grafana- Dashboards [14] ausgestattet ist. BeeGFS verfügt außerdem über eine Striping-Funktion, und die Chunk-Größe, die Anzahl der zu verwendenden Speicherknoten (Ziele) und die Unterstützung für heterogene Speicher können angegeben werden.

Machine Translated by Google

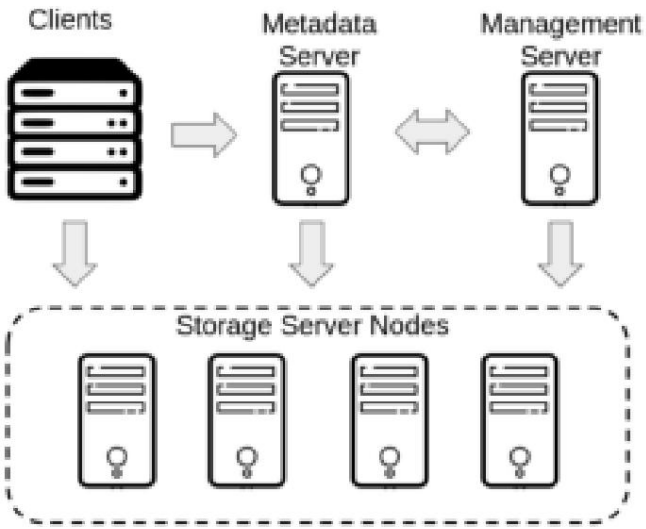


Abbildung 1. BeeGFS-Architektur.

2.3. Modellierung von Extremwerten

EVT ist ein Bereich der Statistik, der sich mit dem Verhalten außergewöhnlicher oder extremer Werte einer Reihe von Zufallsvariablen befasst, d. h. solcher, die vom Median der Wahrscheinlichkeitsverteilung abweichen [15]. EVT wird in Bereichen wie der statistischen Qualitätskontrolle [16], dem Finanzwesen [17–19], dem Transportwesen [20], der Untersuchung des Kalziumgehalts [21] und in der Hydrologie angewendet, um die Wahrscheinlichkeit von Überschwemmungen in einem bestimmten Zeitraum zu berechnen [22–24]. In der Informatik wird EVT verwendet, um die Leistung von HPC-Anwendungen **[25] und die Auswirkungen von Störquellen auf die Leistung von HPC-Anwendungen [26,27]**

Unsere Arbeit konzentriert sich auf die Auswirkungen von Speicheraktionen auf HPC-Anwendungen, die in Cloud-Umgebungen bereitgestellt werden. Standardmäßige statistische Analysen konzentrieren sich auf die Durchschnittsleistung und übersehen möglicherweise signifikante Ausreißer, die sich auf HPC-Anwendungen in Cloud-Umgebungen auswirken. Die Extreme Value Theory (EVT) ist erforderlich, um diese Ausreißer zu modellieren und genaue Vorhersagen der Worst-Case-Leistungsszenarien zu liefern. Die Messung extremer Ausführungszeiten ist von entscheidender Bedeutung, da die EVT dadurch die wahre Variabilität des Systems erfassen kann. Im Gegensatz zu herkömmlichen Methoden, die sich auf Durchschnittswerte konzentrieren, priorisiert die EVT diese Ausreißer, die versteckte Engpässe oder Anzeichen für zukünftige Probleme sein können . Indem wir diese Extreme verstehen, können wir Ressourcen proaktiv für Spitzenlasten zuweisen und Ausfälle verhindern. Die EVT ermöglicht es uns sogar, die Wahrscheinlichkeit solcher Ereignisse zu quantifizieren, wodurch ein Systemdesign mit ausreichender Kapazität möglich wird. Dieser Fokus auf Extreme statt nur D

EVT wurde basierend auf den Ergebnissen der Arbeiten von Fisher und Tippett [28,29] entwickelt. Diese Autoren zeigten, dass die Verteilungen einer Reihe von zufälligen und unabhängigen, identisch verteilten (iid) Variablen mit einer unbekannten zugrunde liegenden Verteilung und Ausreißern oder Extremen zu einer von drei möglichen asymptotischen Verteilungen konvergieren können: Frechet, Gumbel oder Weibull. Jenkinson [30] führte eine verallgemeinerte Extremwertverteilung (GEV) ein, die diese drei Verteilungen kombinierte. Gleichung (1) zeigt die kumulative Verteilung (cdf) für die GEV-Verteilung.

$$F(x|\ddot{y}, \boldsymbol{\mu}, \ddot{y}) = \mathbf{e} \qquad \ddot{y}[1+\ddot{y}(\frac{x\ddot{y}\mu\ddot{y}}{\ddot{y}})]^{\frac{\ddot{y}1}{\ddot{y}}} \qquad (1)$$

Gleichung (1) hat drei Parameter: Skalenparameter ÿ, Lageparameter μ und Formparameter ÿ, wobei ÿÿ < $\ddot{y}$ < ÿ, ÿÿ < μ < ÿ und $\ddot{y}$ > 0. In dieser Gleichung definiert der Skalenparameter die Streuung der Verteilung bzw. die Variabilität, während der Lageparameter festlegt, wo auf der reellen Achse die Verteilung zentriert ist, und der Formparameter, auch Extremwertindex genannt, definiert, ob die Verteilung eine Gumbel- ($\ddot{y}$ = 0), Fréchet- ($\ddot{y}$ > 0) oder Weibull- Verteilung ($\ddot{y}$ < 0) ist **[31] (siehe Abbildung 2).**

Machine Translated by Google

Um die GEV-Verteilung anzupassen, müssen Stichproben von Extremwerten aus den gemessenen Werten entnommen werden. Es gibt zwei gängige Methoden, um diesen Prozess durchzuführen: Peaks over Threshold (POT) und die Block-Maxima-Methode (BMM). Beim POT-Ansatz wird ein Schwellenwert festgelegt und es werden Stichproben oberhalb dieses Schwellenwerts ausgewählt. Bei der BMM werden die gemessenen Werte in Blöcke der Größe n unterteilt und aus jedem Block der Maximalwert ausgewählt . Die BMM wird häufig in der Hydrologie verwendet, wo die Blockgröße so festgelegt wird, dass die GEV-Parameter für saisonale Schwankungen über mehrere Jahre hinw

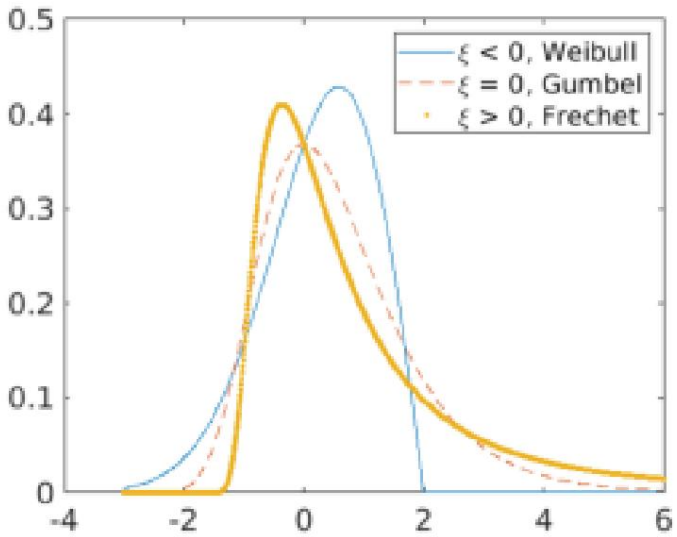


Abbildung 2. Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion.

Die Dreiparameterschätzung wurde in Bezug auf GEV ausführlich untersucht [32]. Die bekanntesten Methoden sind die Maximum-Likelihood-Schätzung (MLE) [33] und die Methode der L-Momente (LMOM) [34]. MLE ist die am häufigsten verwendete Methode zur Schätzung von GEV-Parametern in Verbindung mit BMM. Ihr Hauptvorteil beruht auf der asymptotischen Normalität und der Parameterschätzung bei bekannter Vorverteilung. Laut Smith [35] muss *ÿ* ein Wert im Bereich (ÿ0,5, ÿ) sein, um die asymptotische Eigenschaft von GEV festzustellen und geeignete Schätzer zu erhalten . Wenn *ÿ* im Bereich (ÿ1, ÿ0,5) liegt, können Schätzer erhalten werden, aber die asymptotische Eigenschaft ist nicht festgestellt. Und schließlich können keine Schätzer erhalten werden, wenn *ÿ* im Bereich (ÿÿ, ÿ1) lie

Sobald das GEV-Modell bestimmt und die Parameter berechnet wurden, ist es möglich, die Wiederkehrwerte der Extremwerte zu berechnen. Ein Wiederkehrwert ist definiert als der Wert, der im Durchschnitt nur einmal für jeweils N Stichproben oder für jeweils N Blöcke der Verteilung bei Verwendung der Blockmaximamethode überschritten wird [36]. Wir können diesen Wiederkehrwert wie folgt berechnen:

$$RL = F^{ÿ1}(P) \quad (2)$$

In Gleichung (2) stellt F die GEV-Verteilung dar und P ist gegeben durch P = 1 ÿ 1/i, wobei i die Wiederkehrperiode ist, definiert als die durchschnittliche Zeitspanne zwischen Ereignissen mit gleichem oder einem signifikanteren Wert. Die Wiederkehrniveauanalyse wurde historisch häufiger in Bereichen wie der Finanzwissenschaft [37] und der Hydrologie [38] angewendet als in der In

3. Modellierung der Auswirkungen heterogener Cloud-Speicher auf die Leistung von HPC-Anwendungen

In diesem Abschnitt wird unser vorgeschlagenes stochastisches Modell zur Analyse der Leistung heterogener Speicher beschrieben sowie die Art und Weise, wie wir die Parameter für dieses Modell schätzen. Dadurch können wir die Auswirkungen heterogener Speicher auf HPC-C Im Gegensatz zu früheren Ansätzen nutzt unser Modell die Extreme Value Theory (EVT), um die Variabilität und Extremwerte der Speicherleistung zu berücksichtigen, ohne eine a priori- Verteilung der Speicherzeiten anzunehmen. Diese neuartige Anwendung der EVT bietet ei

Machine Translated by Google

und genaue Darstellung der Speicherleistung in parallel verteilten Systemen wie BeeGFS und bietet so neue Einblicke in die Leistungsdynamik von HPC-Anwendu

3.1. Modellierungsansatz

Die Speicherzeit in verteilten parallelen Dateisystemen wie BeeGFS wird von der Zeit bestimmt, die der langsamste Speicherknoten im Cluster benötigt. Wir verwenden EVT, um die Datenspeicherleistung in diesem Systemtyp zu modellieren. Dazu nehmen wir an, dass die Zeit, die ein verteiltes paralleles Dateisystem zum Speichern jedes Dateiblocks benötigt, iid ist

Wir verwenden BMM, um die Extreme zu modellieren. Die Block- und Stichprobengrößen müssen groß genug sein, um eine gute Modellanpassung zu erzielen. Es wurden mehrere Methoden vorgeschlagen, um die Anpassungsgüte eines Modells zu testen [39,40]. Diese Studien haben Ansätze für die Auswahl der Blockgröße unter Verwendung von BMM und der Stichprobe vorgestellt und auch Techniken zum Testen der asymptotischen Eigenschaft unter Verwendung von Graphen oder durch Analyse der aus der Parameterschätzung resultierenden Werte vorgeschlagen. Wir beschreiben eine Faustregel zum Testen der asymptotischen Eigenschaft in Abschnitt 2

3.2. Schätzung der Modellparameter

In unserer Blockmaxima-Formulierung ist die Blockgröße die Anzahl der in BeeGFS konfigurierten Speicherknoten, und wir entnehmen den Wert der Ausführungszeit dem langsamsten Knoten. Nachdem wir eine Reihe von Blockmaxima ausgewählt haben, müssen wir die Parameter der GEV- Verteilung schätzen. Henwood et al. [41] schlugen eine Mindestblockzahl von 60 vor; wir verwenden eine Blockzahl von 100 und folgen einer Methode, die auf dem in [40] vorgeschlagenen Normalitätstest basiert, um zu bestimmen, ob die Werte mit einem 95%-Konfidenzintervall normal verteilt sind, und um unverzerrte Schätzungen zu vermeiden. Anschließend wenden wir MLE an, um die GEV

3.3. Leistungsvorhersage bei heterogenem Speicher Die

Leistungsvorhersage von Anwendungen in Cloud-Umgebungen ist für eine effiziente Ressourcenbereitstellung unerlässlich. Wir verwenden die Wiederkehrwertanalyse und unser Modell, um die Leistung wissenschaftlicher Anwendungen mit Cloud-Infrastruktur im großen Maßstab vorherzusagen. Nachdem wir Schätzungen für die drei GEV-Parameter erhalten haben, können wir die Wiederkehrwertanalyse basierend auf Gleichung (2) verwenden, wie in Abschnitt 2.3 beschrieben. In unserem Modell ist die Wiederkehrperiode in Gleichung (2) die Blocknummer, die in der Blockmaxima-Methode ver

4. Validierung des Modells

In diesem Abschnitt präsentieren wir eine Validierung unseres vorgeschlagenen Modells anhand repräsentativer wissenschaftlicher Benchmarks. Wir untersuchen die Leistung dieser Benchmarks auf heterogenem Cloud-Speicher und verwenden unser Modell, um die Leistung in größerem Maßstab vorherzusagen. Die Ergebnisse werden anhand von Simulationen und beobachteten Werten validiert. Um die anfänglichen Daten für unser GEV-Modell zu sammeln, haben wir einen BeeGFS-Cluster mit acht Knoten konfiguriert. Wir haben eine Blockgröße verwendet, die der Anzahl der Knoten entspricht, um BMM und ML Anschließend haben wir den Cluster auf 16, 32, 64 und 128 Knoten erweitert, um Leistungsdaten in diesen Größenordnungen zu sammeln und sie mit den Ergebnissen der Return-Level-Analyse zu vergleichen.

4.1. Experimenteller

Aufbau Für unsere Experimente verwendeten wir Knoten von CloudLab [42], einem Projekt der University of Utah (Salt Lake City, UT, USA), der Clemson University (Clemson, SC, USA), der University of Wisconsin Madison (Madison, WI, USA), der University of Texas at Austin (Austin, TX, USA), der University of Massachusetts Amherst (Amherst, MA, USA) und US Ignite (Washington, DC, USA). Jeder der konfigurierten Knoten verfügte über drei verfügbare Speicherziele (RAMDISK, SSD, HDD) (siehe Abbildung 3). Für diese Experimente verwendeten wir c220g2-Knoten. Jeder dieser Knoten verfügte über zwei Intel E5-2660 v3 10-Core-CPUs mit 2,60 GHz (Haswell EP), 160 GB ECC-Speicher (10 × 16 GB DDR4 2133 MHz Dual-Rank RDIMMs), eine Intel DC S3500 480 GB 6 G SATA SSD, zwei 1,2 TB 10K RPM 6G SAS SFF HDDs und einen Dual-Port Intel X520

Machine Translated by Google

10-Gb-NIC (PCIe v3.0, acht Lanes) und Frequenzskalierung war deaktiviert. Das Betriebssystem war CentOs 7 mit Kernelversion 3.10.0-1127.19.1.el7.x86 64.

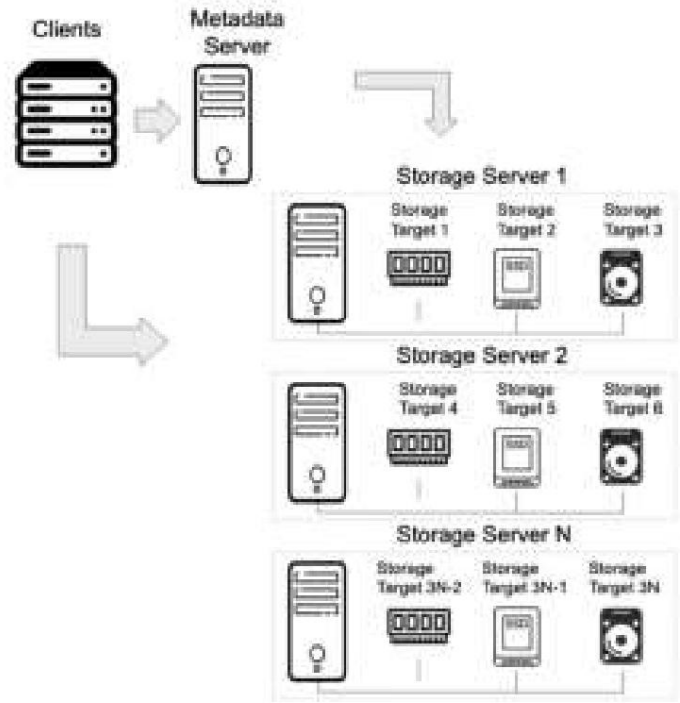


Abbildung 3. Die Architektur von BeeGFS.

4.1.1. Benchmarks

Zur Validierung unseres Modells haben wir mehrere repräsentative Benchmarks ausgewählt (siehe Tabelle 2). **Diese Benchmarks kopieren grundlegende Teile von Anwendungen und simulieren deren Verhalten:**

- **Iozone ist ein Tool zur Analyse von Dateisystemen. Es umfasst verschiedene Operationen** wie Schreiben, Lesen, Neuschreiben und Neulesen und ermöglicht Latenz- und Bandbreitenanalysen. Wir verwenden die Schreiboperation mit einer einzelnen Streammessung, damit BeeGFS alle Dateien als eine Einheit empfangen und diese dann auf alle **Speicherknoten aufteilen kann .**
- **Fallocate ist eine Linux-Funktion, die häufig als Benchmark für Dateisysteme verwendet wird, da sie neuen Speicherplatz für Dateien einer bestimmten Größe vorab reservieren kann. Dieses Tool analysiert zunächst, ob der erforderliche Speicherplatz für das Dateisystem ausreicht, und reserviert diesen Speicherplatz dann bei Bedarf für die Datei.**
- **BT wurde von NAS Parallel Benchmark (NPB) entwickelt und wird häufig zum Testen von HPC-Clustern verwendet. Es löst ein hochkonfigurierbares Block-Tridiagonal-Problem (BT) mithilfe von MPI.**
- **PIOS ist ein Testtool, das als I/O-Simulator für Dateisysteme entwickelt wurde. Dieses Tool simuliert die Belastung durch viele Clients, die I/O in Dateisystemen generieren. Aufgrund seiner parallelen Natur kann PIOS gleichzeitig in dieselbe oder in verschiedene Dateien schreiben, in dieser Studie wird es jedoch nur zum Schreiben in eine einzelne Datei verwendet.**

Tabelle 2. Ausgewählte Benchmarks zur Leistungsanalyse.

Vergleichsindex	Art.-Nr.
Iozon	**[43,44]**
Fallocate	**[45]**
BT-NPB	**[46,47]**
PIOS	**[48]**

Machine Translated by Google

4.1.2. Datenerfassung

Zur Datenerhebung folgten wir einer experimentellen Methodik gemäß den Empfehlungen in [49], um Fehlmessungen zu vermeiden. Einige der Empfehlungen betre Aufzeichnungsführung, bei der empfohlen wird, den gesammelten Daten Etiketten und Metadaten hinzuzufügen um sie später schnell abrufen und überprüfen zu können. Wir verwendeten vier Benchmarks (Fallocate, Iozone, BTC und PIOS) und drei Speichertypen (RAMDISK, SSD und HDD) und zielten um sicherzustellen, dass bei jedem Durchlauf jedes Benchmarks die gleichen Testbedingungen im Cluster galten. Wir haben daher ein Skript entwickelt, um die Ausführungszeiten des langsamsten Knotens für jeden Benchmark, indem jeder Lauf 100 Mal wiederholt wird und bei jeder Iteration alle möglichen Benchmark- to- Storage-Zeiten erfasst werden. Der Prozess von Benchmark-to-Storage ist die Ausführungszeit pro Knoten, in diesem Fall der langsamste Knoten in unserer Konfiguration, der ein Datenelement speichert.

4.2. Schätzung der GEV-Parameter

Um die GEV-Parameter für jeden Benchmark zu schätzen, verwendeten wir BMM und MLE mit 100 Blöcken und einer Blockgröße von acht. Tabelle 3 zeigt die Parameter, die mit dieser Ansatz.

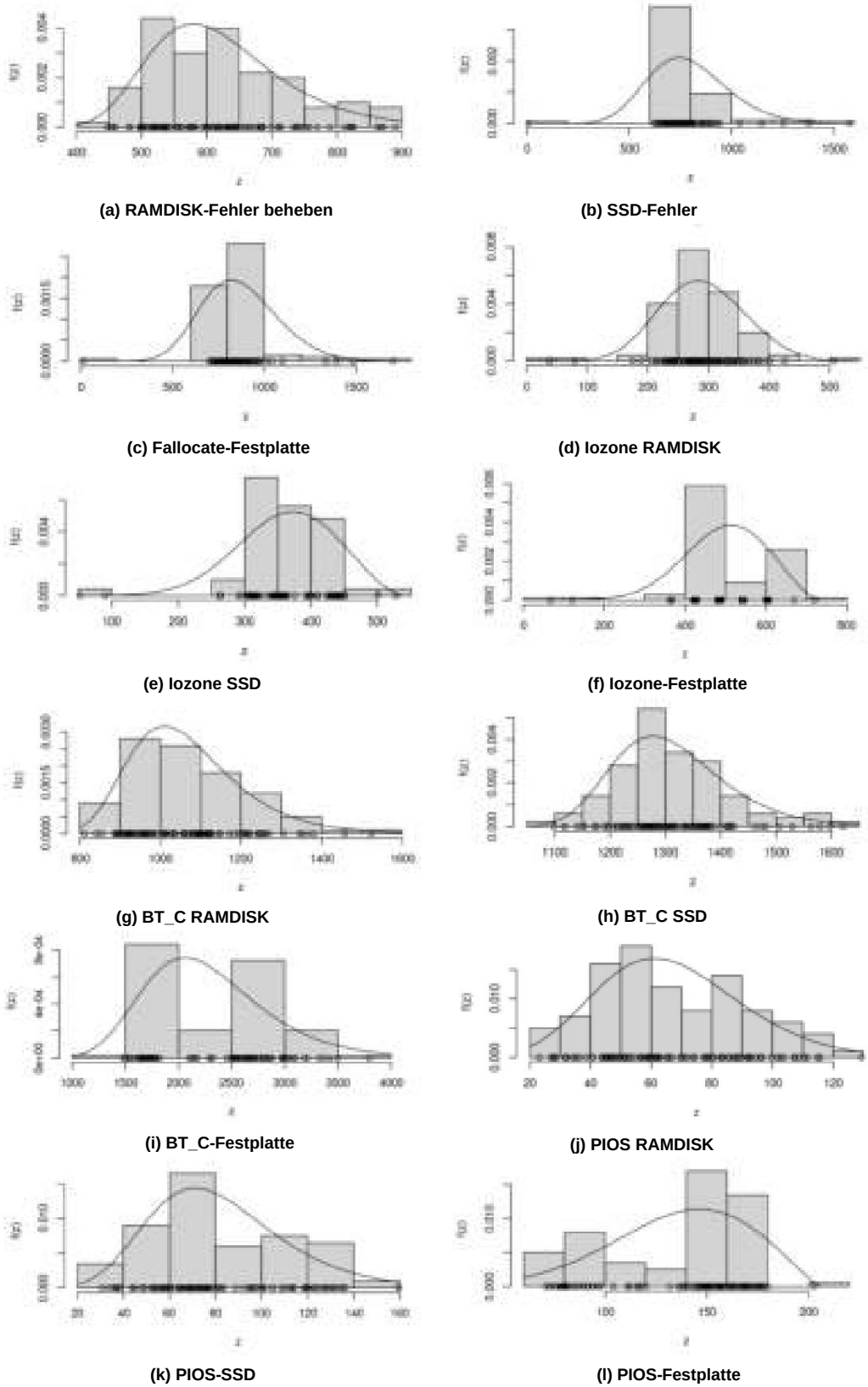
Die Ergebnisse in Tabelle 3 ermöglichen es uns zu bestimmen, welche der drei GEV-Verteilungstypen die beste Anpassung bietet. Die Ergebnisse zeigen, dass alle Verteilungen Weibull-Verteil Typ ($ÿ < 0$). Die Formparameter sind in allen Fällen größer als ÿ0,5 und erfüllen damit die asymptotische Bedingung für die GEV-Verteilung. Die Laufzeitverteilungen der ausgewählten Benchmarks mit BeeGFS auf heterogenen Speichergeräten zeigen ähnliche Tails, und passen daher zu einer Weibull-Verteilung. Wenn wir uns Abbildung 4 ansehen, können wir auch sehen, dass BT_C auf RAMDISK, BT_C auf HDD und PIOS auf SSD zwar alle eine Obergrenze haben, a nahe am Lichtschwanz (Gumbel).

Tabelle 3. Geschätzte GEV-Parameter für die Blockmaxima-Probe.

	Form ($ÿ$)	Skala ($ÿ$) (s)	Standort (μ) (s)
RAMDISK-Fehler	ÿ0,16	154,47	566,95
Fallocate SSD	ÿ0,17	177,52	711.15
Fehlerhafte Festplatte	ÿ0,17	192,99	785.41
Iozone RAMDISK	ÿ0,22	70.03	265,10
Iozone SSD	ÿ0,38	75,98	339,61
Iozone-Festplatte	ÿ0,39	103,81	467,63
BT_C RAMDISK	ÿ0,05	116,63	1006,72
BT_C SSD	ÿ0,11	89,46	1268.03
BT_C Festplatte	ÿ0,07	498,15	2026,47
PIOS RAMDISK	ÿ0,17	21,99	57,42
PIOS-SSD	ÿ0,08	25,67	69,20
PIOS-Festplatte	ÿ0,46	36,71	126,54

Die Schiefewerte zeigen, dass alle Benchmarks außer PIOS die gleiche Position haben. der Schwanz für die SSD- und HDD-Experimente. PIOS hat eine linksseitige Schiefe für HDD und eine rechtsseitige Schiefe für SSD. Dies ist ein interessantes Ergebnis, da PIOS auf SSD auch die höchsten Variationskoeffizienten, was darauf hinweist, dass dieses Experiment die größte Variation in seiner Daten; dies erzeugt extremere Werte und erschwert den Vorhersageprozess.

Machine Translated by Google



(a) RAMDISK-Fehler beheben (b) SSD-Fehler

(c) Fallocate-Festplatte (d) Iozone RAMDISK

(e) Iozone SSD (f) Iozone-Festplatte

(g) BT_C RAMDISK (h) BT_C SSD

(i) BT_C-Festplatte (j) PIOS RAMDISK

(k) PIOS-SSD (l) PIOS-Festplatte

Abbildung 4. Dichtediagramme (in Sekunden) für die Block-Maxima-Probe.

4.3. Renditeanalyse

In diesem Abschnitt verwenden wir die Renditeanalyse, um die Leistung von HPC-Anwendungen auf BeeGFS vorherzusagen. Die Abbildungen 5–8 zeigen den mit Gleichung (2) berechneten Renditewert für 1

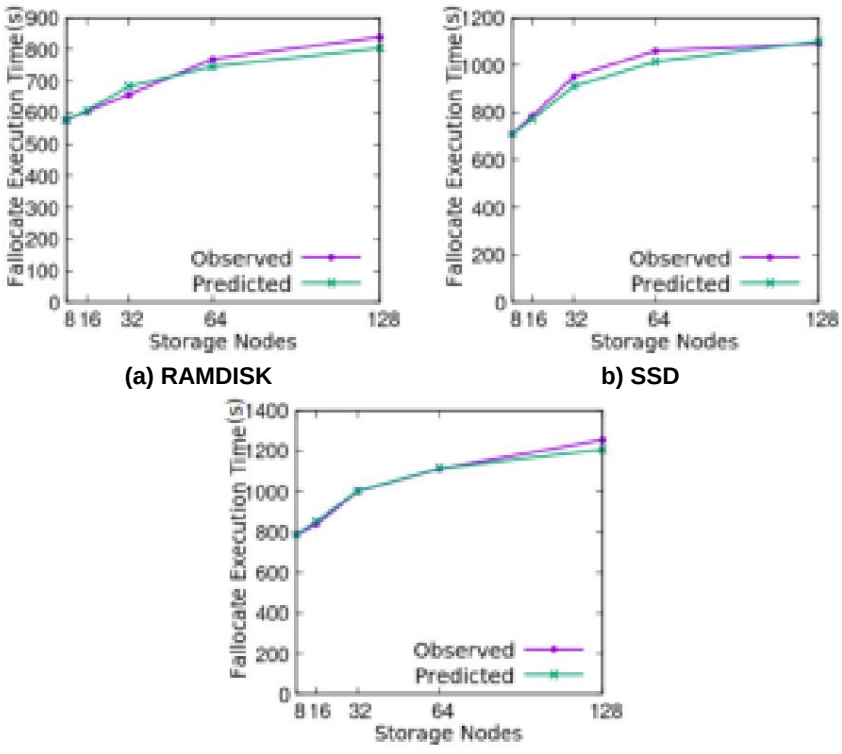
Machine Translated by Google

32, 64 und 128 BeeGFS-Objektspeicherserver. Diese Zahlen stellen die Ergebnisse der Return-Level-Analyse im Vergleich zu den beobachteten Werten dar. Dies ermöglicht es uns, die Leistung der Anwendung im großen Maßstab vorherzusagen und diese mit der beobachteten Leistung

Der größte Vorhersagefehler betrug 6,64 % und der kleinste 0,46 % für PIOS auf 64 Knoten mit RAMDISK und BT_C auf 32 Knoten mit SSD.

Die Abweichungen in den Rückgabewerten für 16 und 128 Knoten waren größer für BT_C auf HDD, PIOS auf RAMDISK und PIOS auf SSD (siehe Abbildungen 7c und 8a,b). Dabei handelte es sich um Experimente mit Formparametern näher bei Null, was häufig auf eine höhere Variabilität der Leistungsergebnisse hinweist. Beispielsweise könnte die für BT_C auf HDD beobachtete höhere Variabilität auf die inhärente langsamere Leistung und höhere Latenz von HDDs im Vergleich zu SSDs oder RAMDISK zurückzuführen sein. In ähnlicher Weise könnte die Leistungsvariabilität für PIOS auf RAMDISK durch die inhärenten Unterschiede bei Speicherverwaltung und Datenverarbeitung beeinflusst werden, die RAMDISK-Speichern innewohnen.

Die Rückgabewerte für Iozone ergaben keine so großen Unterschiede wie die für BT_C auf HDD, PIOS auf RAMDISK und PIOS auf SSD (siehe Abbildung 6). Das Rückgabeverhalten von Iozone weist aufgrund seines Single- Stream-Messansatzes und der effizienten Dateiverteilung durch BeeGFS weniger Variabilität auf als bei anderen Tools. Dies führt zu konsistenteren Leistungsmesswerten, da sich das Tool auf einfache Schreibvorgänge konzentriert, ohne die zusätzliche Komplexität paralleler E/A-Muster wie bei PIOS oder die von BT eingeführten Rechen- und Kommunikations-Overheads. Das inhärente Design von Iozone und sein spezifischer Anwendungsfall in dieser Studie (d. h. das Schreiben eines einzelnen Streams) tragen zu seiner stabilen und vorhersehbaren Leistung bei, was sich in den weniger variablen Rückgabewerten widerspiegelt, die in der Analyse beobachtet wurden.

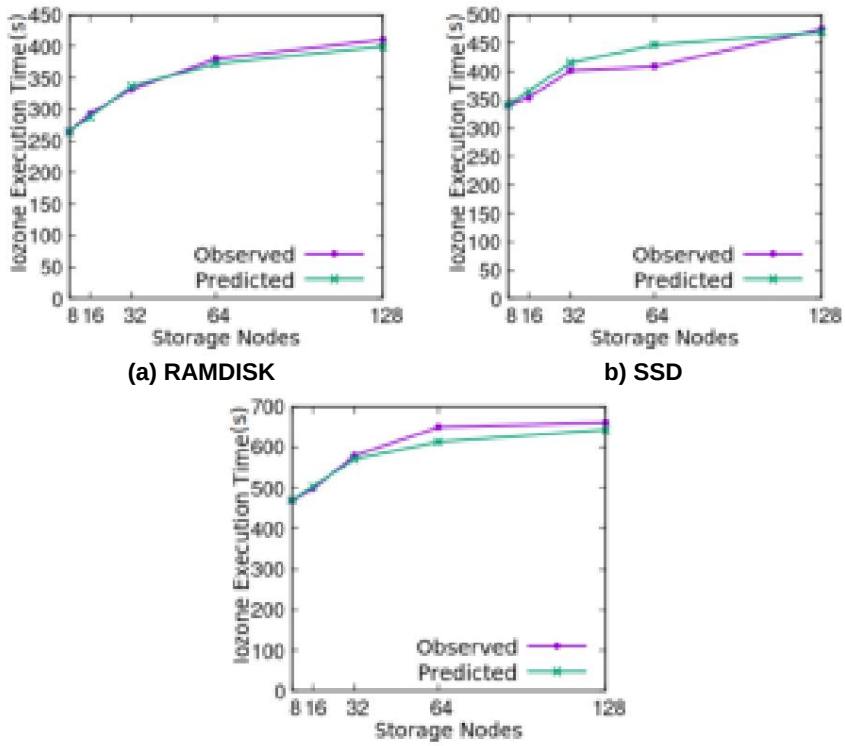


(a) RAMDISK b) SSD

(c) Festplatte

Abbildung 5. Leistungsvorhersage für Fallocate auf BeeGFS bei Verwendung von heterogenem Speicher.

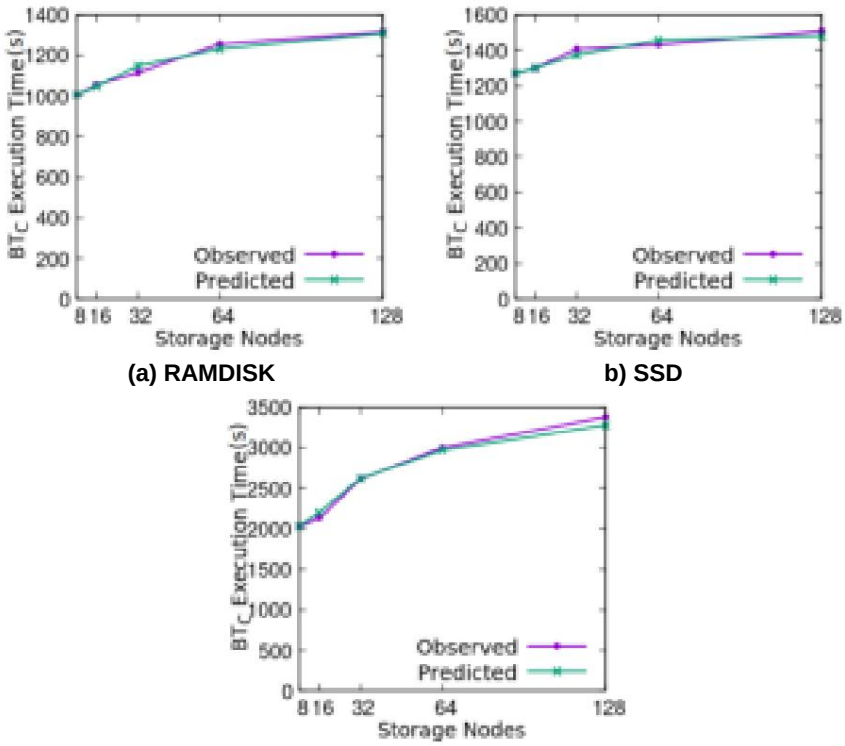
Machine Translated by Google



(a) RAMDISK b) SSD

(c) Festplatte

Abbildung 6. Leistungsvorhersage für Iozone auf BeeGFS bei Verwendung heterogener Speicherung.

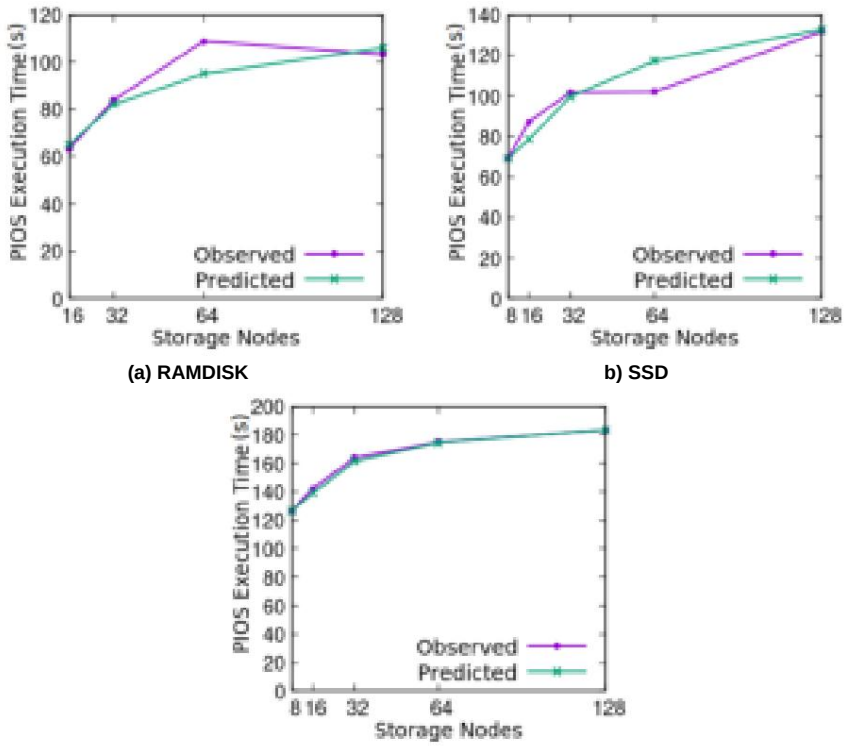


(a) RAMDISK b) SSD

(c) Festplatte

Abbildung 7. Leistungsvorhersage für BT_C auf BeeGFS bei Verwendung heterogenen Speichers.

Machine Translated by Google



(a) RAMDISK b) SSD

(c) Festplatte

Abbildung 8. Leistungsvorhersage für PIOS auf BeeGFS bei Verwendung von heterogenem Speicher.

5. Verwandte Arbeiten

Cloud-Plattformen integrieren zunehmend SSDs in ihre Speichersysteme.

Huang et al. [50] schlugen ein Black-Box-Modell vor, um die Leistung von SSDs in Bezug auf Latenz, Bandbreite und Durchsatz vorherzusagen, indem sie statistische Algorithmen des maschinellen Lernens anwendeten. Sie evaluierten ihr Modell anhand von Mikrobenchmarks und realen Traces von Online-Transaktionsverarbeitungsanwendungen (OLTP) und verzeichneten Fehler von 9 % bei der Latenzvorhersage und 1 % bei Bandbreite und Durchsatz. Im Gegensatz zu unserer Arbeit, in der wir in unserem Modell verschiedene Speichertypen berücksichtigen, konzentrierte sich diese Arbeit auf die Vorhersage der Leistung von SSDs, nicht aber von HDDs.

Mondragon et al. [26] stellten ein Modell zur Analyse der Leistung von synchronen Massen-HPC-Anwendungen vor, das auf der Verwendung von EVT basiert. Sie verwendeten ihr Modell, um die Auswirkungen von Störquellen der nächsten Generation auf Anwendungen zu charakterisieren und die Leistung von Anwendungen in großem Maßstab vorherzusagen. Ihr Modell erzielte einen Vorhersagefehler von weniger als 7,4 % für HPC-Anwendungen, die auf HPC-Clustern laufen. Wir wenden EVT auch an, um die Leistung von HPC-Anwendungen mit heterogenem Speicher in Cloud-Systemen

Dominguez-Trujillo et al. [51] stellten einen Ansatz zur Modellierung von Leistungsschwankungen bei großen HPC-Systemen unter Verwendung von EVT vor. Dabei untersuchten sie die maximale Länge des verteilten Arbeitslastzeitintervalls für synchrone HPC-Massenanwendungen unter Verwendung von parametrischem und nichtparametrischem Ping. Diese Arbeit konzentrierte sich auf die Variabilität, die durch die in HPC-Clustern verwendete Hardware und Software erzeugt wird. Unsere Arbeit konzentriert sich stattdessen auf die Analyse und Vorhersage von Leistungsschwankungen für heterogene Speichersysteme in Cloud-Systemen.

Ein weiterer Ansatz, der EVT verwendete, war eine Analyse der Worst-Case-Ausführungszeit (WCET) [52], bei der die Autoren die Genauigkeit von EVT bei der Erkennung der WCET für verschiedene Prozesse untersuchten. Dieser Ansatz wurde auch für CUDA-Kernel-Aufgaben [53] und die Analyse von Automobilanwendungen in eingebetteten sicherheitskritischen Systemen [54] verwendet, jedoch nicht für die Leistung von HPC-Anwendungen mit heterogenen Speichersystemen in der Cloud.

Machine Translated by Google

6. Schlussfolgerungen

Immer mehr Forscher erwägen die Nutzung der Cloud zum Ausführen ihrer HPC-Anwendungen. Diese Arbeit trägt zur Akzeptanz der Cloud als praktikable Umgebung für HPC-Anwendungen bei, indem sie ein Modell für HPC-Anwendungen in Cloud-Systemen und die Integration eines Hochleistungsspeicherdateisystems wie BeeGFS in die Cloud bereitstellt. In diesem Artikel haben wir ein EVT-basiertes Modell zur Analyse, Charakterisierung und Vorhersage der Leistung von HPC-Anwendungen vorgestellt, die heterogene Speichertechnologien in der Cloud verwenden .

Das Modellieren und Verstehen der Leistung von HPC-Anwendungen, die heterogenen Speicher verwenden, kann sowohl Cloud-Anbietern als auch Cloud-Benutzern zugute kommen. Eine genaue Vorhersage der Leistung von HPC-Anwendungen, die die Speicherleistung berücksichtigt, kann Cloud-Anbietern helfen, diese Funktion in ihren Plattformen anzubieten, und kann Cloud-Benutzern helfen, die Ressourcen, die sie benötigen, genauer zu identifizieren.

Neben der Vorhersage der Speicherleistung kann unser Extremwertmodell als Leitfaden für die Entwicklung intelligenter Algorithmen zur Datenplatzierung verwendet werden, die heterogene Speicherinfrastrukturen berücksichtigen , die zunehmend von Cloud-Anbietern integriert werden, und die versuchen, die Eigenschaften jedes Speichertyps sowie die Datenlokalität und

Obwohl unser Modell genaue Ergebnisse mit geringen Vorhersagefehlern lieferte, ist die Modellierung von Anwendungen mit stark ausgeprägten Speicherzeitverteilungen wie PIOS eine Herausfo In diesen Fällen kann das Modell von der Verwendung von Techniken wie statistischem Bootstrapping oder der Glättung von Stichprobenextremen profitieren, um die gesammelten Daten mithilfe einer kleinen Anzahl von Stichproben präziser an Verteilungen anzupassen.

Eine zukünftige Richtung für diese Arbeit wäre, andere Speichergeräte wie den neuen NVRAM in das Modell einzubeziehen. Die Entwicklung eines Modells für die Leistung von HPC-Anwendungen basierend auf der Verwendung von heterogenem Speicher in Cloud-Systemen stellt nur einen Teil einer größeren Herausforderung dar, und in zukünftigen Arbeiten könnten zusätzliche Cloud-Ressourcen oder sogar Multi-Cloud- Ressourcen in das Modell integriert werden.

Beiträge der Autoren: Konzeptualisierung, JM und OHM; Untersuchung, JM und OHM; Methodik , JM und OHM; Software, JM; Überwachung, OHM; Validierung, JM und OHM; Visualisierung , JM; Schreiben – Vorbereitung des Originalentwurfs, JM und OHM; Schreiben – Überprüfung und Bearbeitung, JM und OHM. Alle Autoren haben die veröffentlichte Version des Manuskripts gelesen und stimmen ihr zu.

Finanzierung: Diese Forschung erhielt keine externe Finanzierung.

Datenverfügbarkeitserklärung: Alle Daten wurden im Haupttext präsentiert.

Danksagungen: Die in diesem Dokument vorgestellten Ergebnisse wurden mithilfe des von der US-amerikanischen National Science Foundation unterstützten CloudLab-Testbeds erzielt.

Interessenkonflikte: Die Autoren erklären, dass keine Interessenkonflikte vorliegen.

Verweise

1. Neuwirth, S.; Paul, AK Parallele E/A-Auswertungstechniken und neue HPC-Workloads: Eine Perspektive. In Proceedings der 2021 IEEE International Conference on Cluster Computing (CLUSTER), Portland, OR, USA, 7.–10. September 2021; S. 671–679.
2. Mell, P.; Grance, T. Die NIST-Definition von Cloud Computing; NIST: Boulder, CO, USA, 2011.
3. Netto, MAS; Calheiros, RN; Rodrigues, ER; Cunha, RLF; Buyya, R. HPC-Cloud für wissenschaftliche und geschäftliche Anwendungen: Taxonomie, Vision und Forschungsherausforderungen. ACM Comput. Surv. 2018, 51, 1–29. [CrossRef]
4. Borin, E.; Drummond, LMA; Gaudiot, JL; Melo, A.; Alves, MM; Navaux, POA High Performance Computing in Clouds: Verschieben von HPC-Anwendungen in eine skalierbare und kostengünstige Umgebung; Springer Nature: Berlin/Heidelberg, Deutschland, 2023.
5. Dancheva, T.; Alonso, U.; Barton, M. Cloud-Benchmarking und Leistungsanalyse einer HPC-Anwendung in Amazon EC2. Clust. Comput. 2024, 27, 2273–2290. [CrossRef]
6. Aithal, P. Informations-, Kommunikations- und Computertechnologie (ICCT) als strategisches Werkzeug für Industriezweige. Int. J. Appl. Eng Geschäftsführer Lette. (IJAEML) 2019, 3, 65–80.
7. dos Santos, MA; Cavalheiro, GGH Cloud-Infrastruktur für HPC-Investitionsanalyse. Rev. Informática Teórica E Apl. 2020, 27, 45–62. [CrossRef]
8. Cheriere, N.; Dorier, M.; Antoniu, G. Wie schnell kann man die Größe eines verteilten Dateisystems ändern? J. Parallel Distrib. Comput. 2020, 140, 80–98. [Querverweis]

Machine Translated by Google

9. Subramanyam, R. HDFS Heterogenes Speicherressourcenmanagement basierend auf der Datentemperatur. In Proceedings der 2015 International Conference on Cloud and Autonomic Computing, Boston, MA, USA, 21.–25. September 2015; S. 232–235. [Querverweis]
10. Braam, P. Die Lustre-Speicherarchitektur. arXiv 2019, arXiv:1903.01955.
11. Heichler, J. Eine Einführung in BeeGFS. 2014. Online verfügbar: http://www.beegfs.de/docs/whitepapers/Introduction_to_ BeeGFS_von_ThinkParQ.pdf (abgerufen am 1. April 2024).
12. Souza Filho, P.; Felipe, L.; Aragäo, P.; Bejarano, L.; de Paula, DT; Sardinha, A.; Azambuja, A.; Sierra, F. Großflächige seismische Verarbeitung in öffentlichen Clouds. In Proceedings der 82. EAGE-Jahreskonferenz und -Ausstellung, Amsterdam, Niederlande, 8.–11. Juni 2020; Band 2020, S. 1–5.
13. Rao, MV Datenduplizierung mit Amazon Web Services Cloud Storage. In Data Deduplication Approaches: Concepts, Strategies, and Herausforderungen; Academic Press: Cambridge, MA, USA, 2020; S. 319.
14. Chakraborty, M.; Kundan, AP Grafana. In Monitoring Cloud-Native Applications: Agile Abläufe sicher leiten mit Open Source-Software; Springer: Berlin/Heidelberg, Deutschland, 2021
15. Haan, L.; Ferreira, A. Extreme Value Theory: Eine Einführung; Springer: Berlin/Heidelberg, Deutschland, 2006; Band 3.
16. Reghenzani, F.; Massari, G.; Fornaciari, W. Probabilistische WCET-Reliabilität: Statistische Tests von EVT-Hypothesen. Mikroprozess. Microsyst. 2020, 77, 103135. [CrossRef]
17. Omar, C.; Mundia, S.; Ngina, I. Prognose des Value-at-Risk der Finanzmärkte während der globalen COVID-19-Pandemie unter Verwendung Bedingte Extremwerttheorie. J. Math. Financ. 2020, 10, 569–597. [CrossRef]
18. Embrechts, P.; Klüppelberg, C.; Mikosch, T. In Modelling Extremal Events: For Insurance and Finance; Springer Science & Business Media: Berlin/ Heidelberg, Deutschland, 2013; Band 33.
19. Coles, S.; Bawa, J.; Trenner, L.; Dorazio, P. In Eine Einführung in die statistische Modellierung von Extremwerten; Springer: Berlin/Heidelberg, Deutschland, 2001; Band 208,
20. Wang, C.; Xu, C.; Xia, J.; Qian, Z.; Lu, L. Eine kombinierte Verwendung von mikroskopischer Verkehrssimulation und Extremwertmethoden zur Bewertung der Verkehrssicherheit. Transp. Res. Teil C Emerg. Technol. 2018, 90, 281–291. [CrossRef]
21. Beirlant, J.; Goegebeur, Y.; Segers, J.; Teugels, JL In „Statistik der Extreme: Theorie und Anwendungen“; John Wiley & Sons: Hoboken, New Jersey, USA, 2006.
22. Ouellette, P.; El-Jabi, N.; Rousselle, J. Anwendung der Extremwerttheorie auf Hochwasserschäden. J. Water Resour. Plan. Manag. 1985, 111, 467–477. [CrossRef]
23. Merz, B.; Basso, S.; Fischer, S.; Lun, D.; Blöschl, G.; Merz, R.; Guse, B.; Viglione, A.; Vorogushyn, S.; Macdonald, E.; et al. Die schweren Ausläufer der Hochwasserspitzenverteilung verstehen. Water Resour. Res. 2022, 58, e2021WR030506. [CrossRef]
24. Tabari, H. Dilemma der Extremwertanalyse zur Bewertung der Auswirkungen des Klimawandels auf globale Überschwemmungen und extreme Niederschläge. J. Hydrol. 2021, 593, 125932. [CrossRef]
25. Haskins, K.; Wofford, Q.; Bridges, PG Workflows für leistungsvorhersagbare und reproduzierbare HPC-Anwendungen. In Proceedings der 2019 IEEE International Conference on Cluster Computing (CLUSTER), Albuquerque, NM, USA, 23.–26. September 2019; S. 1–2.
26. Mondragon, OH; Bridges, PG; Levy, S.; Ferreira, KB; Widener, P. Leistungsstörungen in HPC-Systemen der nächsten Generation verstehen. In Proceedings of the SC'16: Proceedings der International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, Salt Lake City, UT, USA, 13.–18. November 2016; S. 384–395.
27. Seelam, S.; Fong, L.; Tantawi, A.; Lewars, J.; Divirgilio, J.; Gildea, K. Extreme Scale Computing: Modellierung der Auswirkungen von Systemrauschen in Multicore-Clustersystemen. In Proceedings des 2010 IEEE International Symposium on Parallel & Distributed Processing (IPDPS), Atlanta, GA, USA, 19.–23. April 2010; S. 1–12.
28. Fisher, RA; Tippett, LHC Grenzformen der Häufigkeitsverteilung des größten oder kleinsten Mitglieds einer Stichprobe. In Proceedings of the Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society; Cambridge University Press: Cambridge, Großbritannien, 1928; Band 24, Seiten 180–190.
29. Gnedenko, B. Sur La Distribution Limite Du Terme Maximum D'Une Série Aléatoire. Ann. Mathe. 1943, 44, 423–453. [CrossRef]
30. Jenkinson, AF Die Häufigkeitsverteilung der jährlichen Maximal- (oder Minimal-)Werte meteorologischer Elemente. QJR Meteorol. Soc. 1955, 81, 158–171. [CrossRef]
31. Markose, S.; Alentorn, A. Die verallgemeinerte Extremwertverteilung, der implizite Tail-Index und die Optionspreisbildung. J. Deriv. 2011, 18, 35–60. [CrossRef]
32. Lu, LH; Stedinger, JR Varianz von zwei- und dreiparametrigen GEV/PWM-Quantilschätzern: Formeln, Konfidenzintervalle, und ein Vergleich. J. Hydrol. 1992, 138, 247–267. [CrossRef]
33. Hirose, H. Maximum-Likelihood-Schätzung in der 3-Parameter-Weibull-Verteilung. Ein Blick durch die verallgemeinerte Extremwertverteilung Verteilung. IEEE Trans. Dilectr. Electr. Insul. 1996, 3, 43–55. [CrossRef]
34. Hosking, JR L-Momente: Analyse und Schätzung von Verteilungen mit linearen Kombinationen von Ordnungsstatistiken. JR Stat. Soc. Ser. B (Methodol.) 1990, 52, 105–124. [CrossRef]
35. Smith, RL Extremwerttheorie basierend auf den r größten jährlichen Ereignissen. J. Hydrol. 1986, 86, 27–43. [CrossRef]
36. McNeil, AJ Berechnung von Quantilrisikomaßen für Finanzrenditereihen unter Verwendung der Extremwerttheorie; Technischer Bericht; ETH Zürich: Zürich, Schweiz, 1998.

Machine Translated by Google

37. Mehta, NJ; Yang, F. Portfoliooptimierung für extreme Risiken mit maximaler Diversifikation: Eine empirische Analyse. Risiken 2022, 10, 101. [CrossRef]
38. Gu, X.; Ye, L.; Xin, Q.; Zhang, C.; Zeng, F.; Nerantzaki, SD; Papalexiou, SM Extreme Niederschläge in China: Ein Überblick über statistische Methoden und Anwendungen. Adv. Water Resour. 2022, 163, 104144. [CrossRef]
39. Beretta, S. Mehr als 25 Jahre Extremwertstatistik für Defekte: Grundlagen, historische Entwicklungen, aktuelle Anwendungen. Int. J. Fatigue 2021, 151, 106407. [CrossRef]
40. Cai, Y.; Hames, D. Bestimmung der Mindeststichprobengröße für verallgemeinerte Extremwertverteilung. 40, 87–98. [CrossRef]
41. Henwood, R.; Watkins, NW; Chapman, SC; McLay, R. Eine parallele Arbeitslast weist in einer Produktionsumgebung extreme Variabilität auf. arXiv 2018, arXiv:1801.03898.
42. Duplyakin, D.; Ricci, R.; Maricq, A.; Wong, G.; Duerig, J.; Eide, E.; Stoller, L.; Hibler, M.; Johnson, D.; Webb, K.; et al. Das Design und der Betrieb von CloudLab. In Proceedings der 2019 USENIX Annual Technical Conference (ATC 2019), Renton, WA, USA, 10.–12. Juli 2019; S. 1–14.
43. Fragalla, J. Konfigurieren, Optimieren und Benchmarken eines Lustre-Dateisystems. Im 2014 Oil & Gas HPC Workshop; 2014. Online verfügbar: http://rice2014oghpc.blogs.rice.edu/files/2014/03/Fragalla-Xyratex_Lustre_PerformanceTuning_Fragalla_0314.pdf (abgerufen am 1. April 2024).
44. NORCOTT. Iozone Filesystem Benchmark. 2003. Online verfügbar: http://www.iozone.org/ (abgerufen am 1. April 2024).
45. Conway, A.; Bakshi, A.; Jiao, Y.; Jannen, W.; Zhan, Y.; Yuan, J.; Bender, MA; Johnson, R.; Kuszmaul, BC; Porter, DE; et al. Dateisysteme altern? Unsinn, sagt die Wissenschaft! In Proceedings der 15. USENIX-Konferenz zu Datei- und Speichertechnologien (FAST 17), Santa Clara, CA, USA, 27. Februar–2. März 2017; S. 45–58.
46. Yu, W.; Vetter, J.; Canon, RS; Jiang, S. Nutzung von Lustre-Dateiverbindungen für effektive kollektive IO. In Proceedings des Seventh IEEE International Symposium on Cluster Computing and the Grid (CCGrid'07), Rio de Janeiro, Brasilien, 14.–17. Mai 2007; S. 267–274.
47. Wong, P.; Der Wijngaart, R. NAS Parallel Benchmarks I/O, Version 2.4; Tech. Rep. NAS-03-002; NASA Ames Research Center: Moffet Field, CA, USA, 2003.
48. Oracle. Lustre 1.6 Betriebshandbuch. 2010. Online verfügbar: https://docs.oracle.com/cd/E19091-01/lustre.fs16/820-3681-11/820-3681-11.pdf (abgerufen am 6. April 2024).
49. Amaral, JN Über die Forschungsmethodik der Informatik. 2011. Online verfügbar: https://webdocs.cs.ualberta.ca/~amaral/Kurse/MetodosDePesquisa/Papiere/Amaral-Forschungsmethoden.pdf (abgerufen am 2. April 2024).
50. Huang, HH; Li, S.; Szalay, A.; Terzis, A. Leistungsmodellierung und -analyse von Flash-basierten Speichergeräten. In Proceedings des 2011 IEEE 27th Symposium on Mass Storage Systems and Technologies (MSST), Denver, CO, USA, 23.–27. Mai 2011; S. 1–11.
51. Dominguez-Trujillo, J.; Haskins, K.; Khouzani, SJ; Leap, C.; Tashakkori, S.; Wofford, Q.; Estrada, T.; Bridges, PG; Widener, PM Leichtgewichtige Messung und Analyse der HPC-Leistungsvariabilität. In Proceedings of the 2020 IEEE/ACM Performance Modeling, Benchmarking and Simulation of High Performance Computer Systems (PMBS); IEEE: New York, NY, USA, 2020; S. 50–60.
52. Lima, G.; Dias, D.; Barros, E. Extremwerttheorie zur Schätzung von Zeitgrenzen für die Aufgabenausführung: Eine genaue Betrachtung. In Proceedings der 28. Euromicro-Konferenz über Echtzeitsysteme (ECRTS) 2016, Toulouse, Frankreich, 5.–8. Juli 2016; S. 200–211.
53. Berezovskyi, K.; Santinelli, L.; Bletsas, K.; Tovar, E. WCET-messungsbasierte und Extremwerttheorie-Charakterisierung von CUDA-Kerneln. In Proceedings der Proceedings der 22. Internationalen Konferenz über Echtzeitnetzwerke und -systeme, Versailles, Frankreich, 8.–10. Oktober 2014; S. 279–288.
54. Castillo, JD; Padilla, M.; Abella, J.; Cazorla, FJ Ausführungszeitverteilungen in eingebetteten sicherheitskritischen Systemen unter Verwendung extremer Werttheorie. Int. J. Data Anal. Tech. Strateg. 2017, 9, 348–361. [CrossRef]

Haftungsausschluss/Anmerkung des Herausgebers: Die in allen Veröffentlichungen enthaltenen Aussagen, Meinungen und Daten sind ausschließlich die der einzelnen Autoren und Mitwirkenden und nicht die von MDPI und/oder den Herausgebern. MDPI und/oder die Herausgeber lehnen jegliche Verantwortung für Personen- oder Sachschäden ab, die aus den im Inhalt erwähnten Ideen, Methoden, Anweisungen oder Produkten resultiere

Machine Translated by Google

Berechnung

MDPI

Artikel

Ultrakurze Echozeit und schnelle Feldechobildgebung für die Wirbelsäule Knochenbildgebung mit Anwendung in der Spondylolyse-Beurteilung

Diana Vucevic [1], Vadim Malis [1], Yuichi Yamashita [2], Anya Mesa [1], Tomosuke Yamaguchi [1], Suraj Achar [3] und Mitsue Miyazaki [1] Won C. Bae [1,4,*]

[1] Abteilung für Radiologie, University of California-San Diego, San Diego, CA 92103, USA
[2] Canon Medical Systems Corporation, Otawara 324-0036, Tochigi, Japan
[3] Abteilung für Familienmedizin, University of California-San Diego, San Diego, CA 92103, USA
[4] Abteilung für Radiologie, VA San Diego Healthcare System, San Diego, CA 92161, USA
* Korrespondenz: wbae@health.ucsd.edu

Zusammenfassung: Die isthmische Spondylolyse ist durch eine Stressverletzung des Pars interarticularis der Lendenwirbelsäule gekennzeichnet und wird in der konventionellen Magnetresonanztomographie (MRT) häufig übersehen, sodass für eine genaue Diagnose eine Computertomographie (CT) erforderlich ist. Wir vergleichen MRT-Techniken, die sich zur Erzeugung CT-ähnlicher Bilder eignen. Die Lendenwirbelsäule von asymptomatischen und unter Rückenschmerzen (LBP) leidenden Patienten wurde mit Multiecho-Sequenzen mit ultrakurzer Echozeit (UTE) und Feldecho (FE) bei 3 Tesla abgebildet. Es folgte eine einfache Nachbearbeitung mit Mittelwertbildung und Invertierung, um die Wirbelsäulenknochen mit einem CT-ähnlichen Erscheinungsbild darzustellen. Das Kontrast-Rausch-Verhältnis (CNR) für Knochen wurde bestimmt, um UTE- mit FE- und Einzelecho- mit Multiecho-Daten zu vergleichen. Visuell stellten beide Sequenzen kortikalen Knochen mit gutem Kontrast dar; UTE-verarbeitete Sequenzen lieferten einen flacheren Kontrast für Weichteile, wodurch diese leicht von Knochen unterschieden werden konnten, während FE-verarbeitete Bilder eine bessere Auflösung und einen besseren Knochen-Muskel-Kontrast aufwiesen, was für die Frakturerkennung wichtig ist. Darüber hinaus lieferten Multiecho-Bilder ein signifikant ($p = 0,03$) höheres CNR als Einzelecho-Bilder. Mithilfe dieser Techniken wurde bei einem LBP-Patienten eine progressive Spondylolyse festgestellt. Diese Studie zeigt, dass es möglich ist, mithilfe von Wirbelsäulen- Knochen-MRT einen CT-ähnlichen Kontrast zu erzielen. Durch den Einsatz von Multiecho-UTE- und FE-Sequenzen in Kombination mit einfacher Verarbeitung beobachten wir ausreichende Verbesserung

Schlüsselwörter: MRT; Schmerzen im unteren Rücken; Knochenbruch; Pars interarticularis

check for updates

Zitat: Vucevic, D.; Malis, V.; Yamashita, Y.; Mesa, A.; Yamaguchi, T.; Achar, S.; Miyazaki, M.; Bae, WC Ultrakurze Echozeit und schnelles Feld Echobildgebung zur Wirbelsäulenknochenbildgebung mit Anwendung in der Spondylolysebewertung. Computation **2024**, 12, **152.** https://doi.org/10.3390/computation 12080152

Wissenschaftlicher Redakteur: Anando Sen

Erhalten: 8. Juni 2024
Überarbeitet: 15. Juli 2024
Akzeptiert: 22. Juli 2024
Veröffentlicht: 24. Juli 2024

Copyright: © 2024 bei den Autoren. Lizenznehmer MDPI, Basel, Schweiz. Dieser Artikel ist ein Open Access-Artikel vertrieben unter den Bedingungen und Bedingungen der Creative Commons Namensnennungslizenz (CC BY) (https:// creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

1. Einleitung

Schmerzen im unteren Rückenbereich (LBP) betreffen einen erheblichen Anteil junger Sportler, wobei bis zu 36 % jährlich darüber berichten [1]. Die isthmische Spondylolyse [2] ist durch eine Belastungsverletzung des Pars interarticularis des Wirbelbogens der Lendenwirbelsäule gekennzeichnet [3,4]. Es handelt sich um eine weit verbreitete Erkrankung bei jungen Sportlern, die Aktivitäten nachgehen, bei denen die Lendenwirbelsäule wie Während die genaue Häufigkeit der isthmischen Spondylolyse nicht gut dokumentiert ist, wurde sie laut Studien als häufige Ursache für Rückenschmerzen bei jungen Sportlern beschrieben, wobei die Prävalenzraten zwischen 20 % und 50 % liegen [5]. Diese Erkenntnisse unterstreichen den Bedarf an genauen, strahlungsfreien Diagnoseinstrumenten für junge Menschen.

Die isthmische Spondylolyse zeigt sich in unterschiedlichen Schweregraden, sodass für ihre genaue Beurteilung unterschiedliche Bildgebungsverfahren erforderlich sind. Im Anfangsstadium von Stressverletzungen des Pars interarticularis, die durch Knochenmarködeme ohne Fraktur gekennzeichnet sind, ist die Magnetresonanztomographie (MRT) das empfindlichste Instrument zur Erkennung von Knochenstressreaktionen [6,7]. Im weiteren Verlauf der Erkrankung können sowohl Knochenstressreaktionen als auch Frakturen auftreten, während im Endstadium nur Frakturen auftreten. Die Computertomographie (CT) ist zur Visualisierung von Knochenfrakturen besser geeignet. Diese Variabilität der Darstellung macht es für eine einzelne Bildgebungsmodalität schwierig, das Stadium der i

Machine Translated by Google

Die CT spielt bei der Beurteilung eine entscheidende Rolle, und häufig sind beide Modalitäten für eine definitive Diagnose erforderlich.

Aufgrund von Bedenken hinsichtlich der ionisierenden Strahlung bei jungen Patienten, insbesondere im gebärfähigen Alter, ist die MRT die bevorzugte erste Bildgebungsmethode zur Erkennung einer isthmischen Spondylolyse. Aufgrund der eingeschränkten Fähigkeit, Knochendetails zu visualisieren, kann die konventionelle MRT jedoch häufig eine erhebliche Anzahl von Knochenbrüchen nicht identifizieren, die später durch CT-Scans erkannt werden [6–8]. Ein nachfolgender CT-Scan, der einen hervorragenden Kontrast und eine Visualisierung feiner Knochendetails bietet [9], ist dann erforderlich, um die Dia Während mehrere CT-Scans für die langfristige Gesundheit von Jugendlichen schädlich sind und das Krebsrisiko erhöhen [10–12], können sie bei Personen, die wiederkehrende Rückenverletzungen erleiden, unvermeidlich sein. Dies ist bei bis zu 33 % der Patienten mit Rückenverletzungen durch Sport innerhalb eines Jahres der Fall [13]. Eine Reduzierung oder Vermeidung der Strahlung wäre für die Bildgebung junger Sportler mit Rückenschmerzen äußerst vorteilhaft.

Neuere MRT-Techniken werden nach und nach für die Knochenbildgebung angepasst, wobei Sequenzen wie die ultrakurze Echozeit (UTE) [14] und die Null-Echozeit (ZTE) [15] entwickelt wurden. Diese Techniken haben sich als vielversprechend für die Visualisierung der Knochenstruktur in verschiedenen Gelenken erwiesen, darunter Knie [15,16], Schulter [17] und Lendenwirbelsäule [18]. Dennoch sind sie im Vergleich zur CT mit inhärenten Einschränkungen behaftet, wie einem niedrigen Signal-Rausch-Verhältnis (SNR) und einer geringeren Auflösung. Daher ist die weitere Erforschung und Entwicklung knochenorientierter MR-Techniken gerechtfertigt.

Unser Ziel dieser Studie war es, zwei MRT-Techniken zur Knochenbildgebung – Multiecho-UTE- und Multiecho-Feldecho (FE)-Aufnahmen – vorzustellen und zu vergleichen, kombiniert mit einfacher Nachbearbeitung, um Erscheinungsbild, SNR und Bildkontrast zu verbessern und CT-ähnliche Bildeigenschaften zu erzielen. Die Verwendung von Multiecho-Bildern zur Verbesserung des SNR wurde bereits früher vorgeschlagen [19,20] und wird der UTE-Bildgebung bei der Darstellung von Kortikalis wahrscheinlich von Nutzen sein. Auch FE-Sequenzen wurden zur Knochenbildgebung vorgeschlagen [21]. Zu den bemerkenswerten Stärken zählen die breite Verfügbarkeit der Sequenz bei den großen MRT-Anbietern, die hohe räumliche Auflösung und der hohe Kontrast zwischen Muskel und Knochen, die für die Knochenvisualisierung nützlich sind. In dieser Studie kombinierten wir UTE- und FE-Aufnahmen mit einfachen Nachbearbeitungstechniker

2. Materialien und Methoden

2.1. Probanden

Die Lendenwirbelsäulen von vier Probanden (1 männlich, 3 weiblich; 19,5 ± 5,5 Jahre alt) wurden mit einer hinteren Wirbelsäulenspule bei 3-T (Canon Galan) abgebildet. Zwei gesunde Freiwillige wurden mit den Einschlusskriterien rekrutiert, dass sie keine Rückenschmerzen oder eine Vorgeschichte von Rückenoperationen hatten. Zwei der Probanden waren jugendliche (16-jährige Frauen, 14-jährige Männer) Sportler mit unspezifischen und nicht ausstrahlenden Rückenschmerzen in den letzten 4–8 Wochen. Die Symptome besserten sich durch konservative Behandlung nicht, und der Hausarzt der Patienten überwies sie zur Untersuchung auf das Vorhandensein einer Spondylolyse.

2.2. Magnetresonanztomographie

Die Probanden wurden mit einem 3-Tesla-MRT-Scanner (Galan, Canon Medical Systems Corp., Otawara, Japan) abgebildet, der mit einer hinteren Empfangs-Wirbelsäulenspule ausgestattet war. Zur Abbildung jedes Probanden wurden eine anatomische Sequenz und zwei knochenorientierte Sequenzen verwendet. Die anatomische Sequenz war ein sagittales T2-gewichtetes Fast-Spin-Echo (FSE T2) mit Fettunterdrückung und den folgenden Scan-Parametern: Wiederholungszeit (TR) = 5600 Millisekunden (ms), Echozeit (TE) = 80 ms, Sichtfeld (FOV) = 220 Millimeter (mm), Bildmatrix = 320 × 416, Schichtdicke = 3 mm und Echozuglänge (ETL) = 19. Die knochenorientierten Sequenzen waren (1) eine axiale 3D-UTE-Multiechosequenz mit den Scan-Parametern TR = 16,7 ms; TE = 0,1, 2,7, 5,3 ms; Anzahl der Projektionen = 19.968; FOV = 300 ms; Matrix = 320 × 320; und Schicht = 1 mm, neu formatiert auf die Sagittalebene und (2) eine sagittale 3D-Feldecho (FE)-Multiechosequenz mit Scanparametern von TR = 21,8 ms; TE = 4, 8,6, 13,2 ms; FOV = 170 mm; Matrix = 320 × 240; und Schicht = 1 mm. Die Quellbilder sind in Abbildung 1 dargestellt.

Machine Translated by Google

Obwohl keine formale Optimierung durchgeführt wurde, haben wir zunächst unterschiedliche Anzahlen radialer Projektionen für die 3D-UTE und unterschiedliche TE-Werte für die 3D-FE ausprobiert.

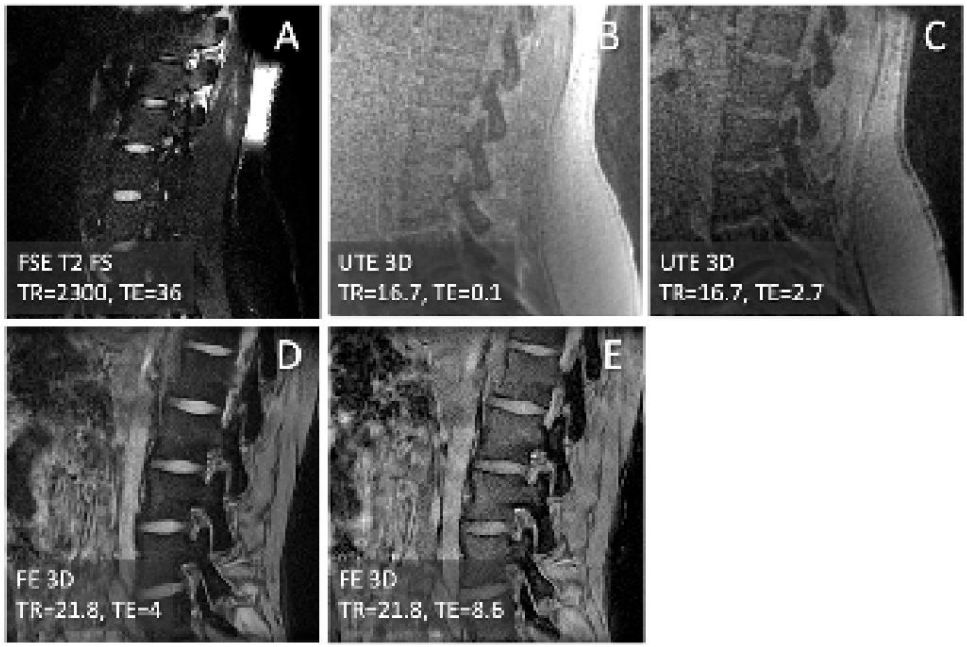


Abbildung 1. Rohe MRT-Bilder einer Lendenwirbelsäule, aufgenommen mit (A) T2-gewichtetem fettunterdrücktem Fast-Spin- Echo (FSE T2 FS), (B,C) 3D-ultrakurzer Echozeit (UTE) bei unterschiedlichen Echozeiten (TEs) und (D,E) 3D-Feldecho (FE) bei unterschiedlichen TEs.

2.3. CT-ähnliche Bildverarbeitung

Um aus den knochenorientierten MRTs ein CT-ähnliches Erscheinungsbild zu erzeugen und den Vorteil der Verwendung mehrerer Bilder aus der Multi-Echo-Aufnahme zu demonstrieren, wurden die Bilder auf die folgenden zwei Arten direkt auf der Scannerkonsole verarbeitet. Zunächst wurde ein Satz CT-ähnlicher Bilder aus den Erst-Echo-Bildern von UTE (TE = 0,1 ms, Abbildung **1B) und FE (TE = 4 ms; Abbildung** 1D) **erstellt, die einfach invertiert wurden (Gleichung (1)), um das Knochengewebe hell und das umgebende Gewebe dunkel darzustellen (Abbildung 2A,C).**

$$\text{Erstes Echo-CT-ähnliches Bild} = \frac{1}{\text{Quellbild}} \quad \textbf{(1)}$$

Ein zweiter Satz CT-ähnlicher Bilder wurde aus allen Bildern (mit unterschiedlichen TEs) der Multiecho-Serie erstellt. Für jede Sequenz der UTE und der FE wurden alle Quellbilder von unterschiedlichen TEs gemittelt und dann invertiert, um die endgültigen CT-ähnlichen Bilder (Abbildung 2B,D) gemäß Gleichung (2) zu erhalten, wobei i **= die Quellbilder, die jedem TE entsprechen, und** n **= die Anzahl der TEs.**

$$\textbf{Multi-Echo CT-ähnliches Bild} = \frac{N}{\sum_{i=1}^{N} \text{Quellbild}_i} \quad \textbf{(2)}$$

Die Absicht bestand darin, dass die Mittelwertbildung das Rauschen verringern und die Inversion eine hohe Signalintensität zum Knochen liefern würde. Repräsentative verarbeitete Bilder aus beiden Ansätzen unter Verwendung der UTE und der FE sind in Abbildung 2 dargestellt.

Machine Translated by Google

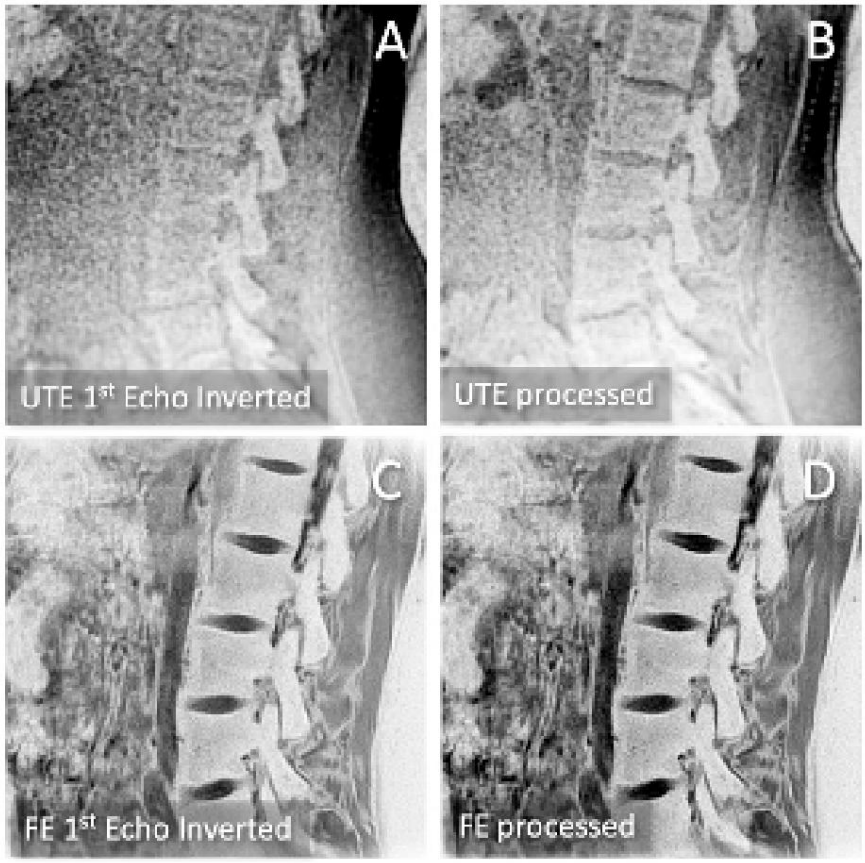


Abbildung 2. Verarbeitete Bilder zur Erzeugung eines CT-ähnlichen Kontrasts aus (A) dem UTE -1.-Echo-Bild, (B) UTE -Multiecho-Bildern, (C) dem FE -1.-Echo-Bild und (D) FE-Multiecho-Bildern. Unterschiede zwischen den Sequenzen (UTE vs. FE) sowie Verbesserungen bei Kontrast und Bildqualität durch die Multiecho-Verarbeitung sind deutlich erkennbar.

2.4. Signal-Rausch-Verhältnis (SNR) und Kontrast-Rausch-Verhältnis (CNR)

Auf einem sagittalen Schnitt der verarbeiteten CT-ähnlichen Bilder, die den kortikalen Knochen des Pars interarticularis und die umgebenden paraspinalen Muskeln darstellten, wurden Interessenbereiche (ROI) eingezeichnet (Abbildung 3). Die ROIs wurden manuell von einem Wissenschaftler mit über 10 Jahren Erfahrung in der Bildgebungsforschung platziert. ROIs für den Knochen wurden entlang des Pars interarticularis platziert und ROIs für den Muskel wurden im angrenzenden paraspinalen Muskel hinter dem Knochen-ROI platziert. Innerhalb jedes ROI ermittelten wir die mittlere Signalintensität (SImean). **Ein ROI wurde auch im Hintergrund (Luft) platziert, um die Standardabweichung** (SISD) **der Rauschsignalintensität** zu ermitteln . **Wir bewerteten die Variabilität von Schnitt zu Schnitt anhand des Variationskoeffizienten der** mittleren Signalintensität von Knochen-ROIs in 5 aufeinanderfolgenden Schnitten von zwei Datensätzen und fanden **unabhängig von der verwendeten Sequ**

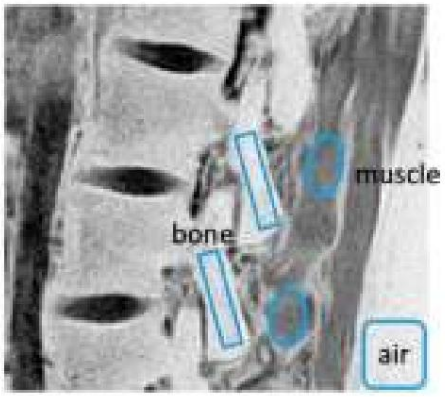
Das SNR wurde aus der mittleren Signalintensität dividiert durch die Standardabweichung des Luftrauschens bestimmt [22] **(Gleichung (3)).**

$$SNR1 = \frac{SI1_{bedeuten}}{SI_{noise\ SD}} \quad \textbf{(3)}$$

Das CNR wurde aus der Differenz der mittleren Signalintensität zwischen sequentiellen Die ausgewählte ROI wird durch die Standardabweichung des Rauschens dividiert [23] (Gleichung (4)).

$$\textbf{CNR1ÿ2} = \frac{SI1_{bedeuten} \text{ ÿ } SI2_{bedeuten}}{SI_{noise\ SD}} \quad \textbf{(4)}$$

Machine Translated by Google



ff

Abbildung 3. Interessante Bereiche (blau umschlossene Bereiche), einschließlich Knochen des Pars interarticularis, paraspinale Muskeln und Luft, die zur Bestimmung von SNR und CNR analysiert wurden.

2.5. Statistik

Die SNR- und CNR-Werte zwischen den vier Arten von CT-ähnlichen Bildern (erstellt aus UTE 1. -Echo, UTE Multi-Echo, FE 1.-Echo und FE Multi-Echo-Bildern) wurden mittels einer vollfaktoriellen zweifaktoriellen ANOVA [24,25] verglichen , **um die Effekte der Sequenz (UTE vs.**
FE) und die Verwendung des 1. Echobildes gegenüber allen drei Bildern aus der Multi-Echo-Verarbeitung.

ff

Es wurde die statistische Analysesoftware Systat (v12, Grafiti LLC, Palo Alto, CA, USA) verwendet. Das Signifikanzniveau wurde auf 5 % festgelegt.

2.6. Spondylolyse-Beurteilung

Bei den beiden Personen mit Schmerzen im unteren Rückenbereich verglichen wir die konventionellen SE T2-, multiechoverarbeiteten UTE- und multiechoverarbeiteten FE-Bilder, um das Vorhandensein einer Spondylolyse zu beurteilen (Abbildung 4).

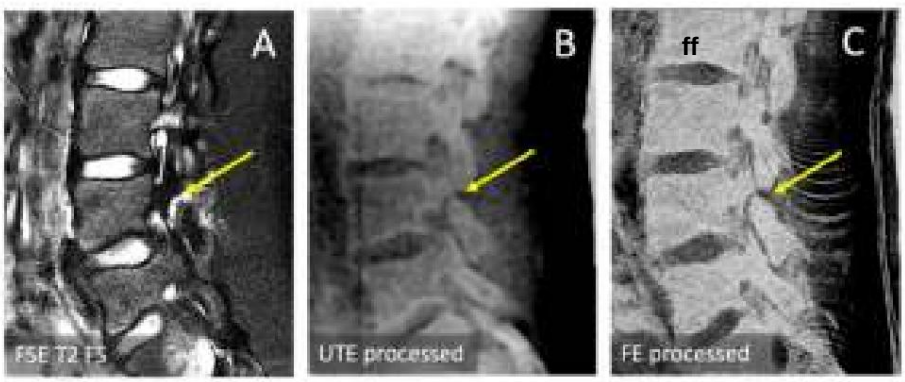


Abbildung 4. Erkennung eines mittelgroßen Pars-Defekts (Pfeile) bei einem jugendlichen Sportler mit anhaltenden Schmerzen im unteren Rückenbereich mittels FSE T2 FS (A), UTE-Multiecho-Verarbeitung (B) und FE-Multiecho-Verarbeitung Die verarbeiteten Bilder können eine einfachere und sicherere Diagnose einer isthmischen Spondylolyse ermöglichen.

3. Ergebnisse

3.1. Bemerkungen

Im Vergleich zu FSE T2 (Abbildung 1A), CT-ähnlichen verarbeiteten Bildern aus Erst-Echo (Abbildung 2A, C) und Multi-Echo (Abbildung 2B, D) zeigten UTE- und FE-Bilder alle Wirbelsäulenknochen deutlich mit hoher Signalintensität, ähnlich wie CT. UTE- (Abbildung 2A, B) und FE-Bilder (Abbildung 2B, C) zeigten zwar beide einen CT-ähnlichen Kontrast, wiesen aber bemerkenswerte Unterschiede auf. UTE-Bilder waren weicher und boten einen flacheren Kontrast für das Weichgewebe, wodurch es einfacher war, den Knochen zu unterscheiden, wenn der Leser mit der Anatomie nicht vertraut ist. Im Gegensatz dazu waren FE-Bilder deutlich schärfer und zeigten Knochen mit einem höheren Kontrast. Aber FE-Bilder zeigten viele Nicht-Knochengewebe (z. B. Faszie des Muskels) mit einer ähnlich hohen Signalintensität wie Knochen. Dies macht die FE-Bildgebung für

Machine Translated by Google

von Knochen, aber wünschenswerter für die Bewertung kleiner Merkmale wie Haarrisse. Wenn Vergleich von CT-ähnlichen Bildern vom Erst-Echo (Abbildung 2A,C) vs. Multi-Echo (Abbildung 2B,D), Die Multi-Echo-Bilder zeigten eine Verbesserung, mit weniger Rauschen und besserem Kontrast für Knochen insgesamt.

3.2. SNR und CNR

Tabelle 1 fasst die SNR- und CNR-Werte für die CT-ähnlichen verarbeiteten Bilder zusammen. CT- ähnliche Bilder aus den UTE-Daten hatten mittlere SNR-Werte für den Knochen im Bereich von 90 bis 10 die signifikant höher waren ($p = 0,0002$) **als die Werte aus den FE-Daten (mittleres SNR Bereich von 38 bis 53). Die CNR-Werte (Knochen-Muskel) waren jedoch etwas höher** ($p = 0,09$) **für FE (mittleres CNR von 15 bis 22) im Vergleich zu UTE (CNR von 13 bis 16). Die Verwendung von Multi-Echo-Bildern, sowohl für UTE- als auch für FE-Daten, verbesserten die CNR-Werte deutlich** ($p = 0,03$)**: Für UTE verbesserte sich das CNR im Durchschnitt um 2,7, während sich für FE das CNR verbesserte um 6,9. Dies bestätigt die visuellen Verbesserungen des Knochenkontrasts, die im Bild beobachtet wurden Vergleich in Abbildung 2.**

Tabelle 1. (Oben) Mittelwert und Standardabweichung der SNR- und CNR-Werte aus verschiedenen Regionen von (Unten) p-Werte aus der zweiseitigen ANOVA zur Beurteilung der Effekte der Sequenz (UTE vs. FE) und Verarbeitung (Erstes Echo vs. Mehrfachecho) auf das SNR und CNR. Fettgedruckte p-Werte zeigen statistische Signifikanz ($p < 0,05$).

Messung	Mittelwerte (+/ÿ Standardabweichung) für jede Sequenz			
	UTE 1. Echo	UTE Multi	FE 1. Echo	FE Multi
Knochen-SNR	107 (66)	89,8 (29,5)	38,1 (10,3)	53,3 (16,3)
Muskel-SNR	94,4 (65,4)	74,0 (32,8)	23,4 (7,0)	31,9 (14,2)
Knochen-Muskel-CNR	13,0 (5,2)	15,7 (5,0)	14,6 (4,2)	21,5 (8,5)

Messung	Zweiseitige ANOVA: Wirkung von		
	UTE im Vergleich zu FE	1. - Vergleiche Mehrfachecho	Interaktion
Knochen-SNR	0,0004	0,9289	0,2235
Muskel-SNR	0,0002	0,6556	0,2864
Knochen-Muskel-CNR	0,0935	0,0311	0,3327

3.3. Darstellung der Spondylolyse

Bei einem der Patienten mit Rückenschmerzen stellten wir eine progressive Spondylolyse fest mit einer mittelgroßer Knochendefekt, sichtbar als Lücke mit hoher Signalintensität in FSE T2 (Abbildung 4A, Pfeil) und eine klare Nichtvereinigung sowohl im Multi-Echo-verarbeiteten UTE (Abbildung 4B, Pfeil) als auch Multi-Echo-verarbeitete FE -Bilder (Abbildung 4C, Pfeil). Wir haben auch das Signalprofil gemessen über den Knochendefekt in UTE- und FE-verarbeiteten Bildern. Die Defektbreiten, gemessen als Halbwertsbreite, betrugen 2,75 mm und 2,39 mm für UTE und FE, jeweils.

4. Diskussion

Diese Studie hat gezeigt, dass es möglich ist, mit der MRT der Wirbelsäule und der Knochen einen CT-ähnlichen Kontrast zu erzielen. Durch den Einsatz von Multi-Echo-UTE- und FE-Sequenzen in Kombination mit einfachen Bildverarbeitungstechniken haben wir erkennbare Verbesserungen in der Bildqualität beobachtet. Qualität und Knochenkontrast im Vergleich zu Einzelecho-Ansätzen. Unsere Ergebnisse sind ermutigend, was darauf hindeutet, dass diese Ansätze verwendet werden können, um CT-ähnliche Bilder zu erhalten, die nützlich sind zur Beurteilung einer Spondylolyse, allerdings mit Einschränkungen.

Unsere Studie verglich Multi-Echo-UTE- und Multi-Echo-3D-FE-Sequenzen und zeigte , dass beide Sequenzen den kortikalen Knochen recht gut darstellen können, die UTE-Bildgebung sorgte für einen flacheren Kontrast bei Weichteilen, wodurch Knochen (dunkel erscheinend) unterscheidbar wurden von umgebendem Gewebe (das hell erscheint) einfacher zu unterscheiden, während FE-Bilder eine größere räumliche Auflösung und Knochen-Muskel-Kontrast als UTE, was für die Erkennung feinerer

Machine Translated by Google

Frakturen. Wir haben auch gezeigt, dass die Verarbeitung aller Bilder aus der Multi-Echo-Aufnahme **sowohl bei UTE- als auch bei FE-Aufnahmen ein deutlich höheres CNR für Knochen ergab .**

Unsere Studie baut auf früheren Studien mit einem ähnlichen Ziel der Knochenbildgebung mittels MRT auf. **Viele nutzten einen ähnlichen Ansatz, bei dem Bilder aufgenommen werden, die Knochen mit einer Signallücke und umgebendes Gewebe mit höherer Signalintensität zeigen, und das Bild invertiert wird, um ein CT-ähnliches Erscheinungsbild** zu erzielen **[21,26,27]. Diese Studien haben gezeigt, dass diese herkömmlichen Sequenzen tatsächlich eine gute Darstellung der kortikalen Knochenstruktur liefern können, und in einer Studie [27] wurde eine hohe Genauigkeit (>90%) beim Erkennen von Knochenbrüchen nachgewiesen. Unsere Ergebnisse bestätigen im Allgemeinen diese früheren Ergebnisse und weisen auf den Nutzen der Verwendung von Multiechobildern zur Verbesserung der Bildqualität hin. Obwohl wir die Wirkung verschiedener Verarbeitungstechniken nicht formal untersucht haben, kann unser einfacher Ansatz zur Mittelwertbildung und Invertierung auf jeder MRT-Konsole mithilfe integrierter Bildverarbeitungstools durchgeführt werden. Verschiedene andere Verarbeitungstechniken wie die Subtraktion neu skalierter Echos [28], die einfache Inversion eines einzelnen Echos [27] oder die Summation aller Echos außer dem letzten, gefolgt vom letzten Echo [21], wurden mit unterschiedlichem Erfolg ausprobiert. Es stehen sogar noch fortschrittlichere Ansätze zur Verfügung, wie etwa die Verwendung von Deep Learning zur Erstellung CT-ähnlicher (Pseudo-CT-)Bilder aus MRT-Bildern [18,29,30], diese erfordern derzeit jedoch eine umfangreiche Offline-Verarbeitung, die die klinische Bewertung verzögern kann.**

Dies ist eine frühe Studie mit vielen Einschränkungen. Obwohl die Durchführbarkeit nachgewiesen wurde, ist eine vergleichende Studie mit CT-Referenzbildern erforderlich. Da es schwierig ist, sowohl CT- als auch MRT-Bilder ohne klinischen Bedarf zu erhalten, könnte eine erste Studie Leichenproben verwenden , wie dies bereits früher durchgeführt wurde [18]. Außerdem war die Anzahl der verwendeten Probanden sehr gering, was jedoch in der frühen technischen Entwicklung typisch ist. Dennoch wird in Zukunft eine größere Studie erforderlich sein, um die vorliegenden Ergebnisse zu bestätigen und die Ergebnisse für die beabsichtigte Anwendung verallgemeinerbar zu machen. Wir stellten fest, dass die Unterschiede im SNR und CNR zwischen MR-Sequenzen erheblich waren und der Trend bei einer größeren Anzahl von Probanden wahrscheinlich ähnlich sein wird , da die Signalintensität von kortikalem Knochen und Muskel ohne eine bestimmte Pathologie zwischen Probanden möglicherweise nicht deutlich variiert. Obwohl es ideal gewesen wäre, Radiologen einzubeziehen, um die Bildqualität und die diagnostische Leistung zum Erkennen von Parsfrakturen zu vergleichen, hätte dies eine ziemlich große Anzahl von Probanden sowie Referenz-CT-Bilder erfordert. Dies ist wahrscheinlich eine zukünftige Erweiterung der aktuellen Arbeit. Im Rahmen einer ersten Studie konnten wir zwei junge Sportler mit anhaltenden Schmerzen im unteren Rückenbereich einschließen und bei einem von ihnen eine Spondylolyse nachweisen (

Trotz Fortschritten bei Pulssequenzen und Nachbearbeitungstechniken gibt es noch immer keine MRT-basierte Methode, die CT-Scans gleichwertige Bilder erzeugen kann. In Bezug auf Techniken, die für die Beurteilung von Knochenbrüchen an den Pars geeignet sind, könnten die beiden in diesem Artikel diskutierten Techniken sowie frühere ähnliche Ansätze, die auf konventioneller Bildverarbeitung basieren [19,21,27], von Nutzen sein. Der Einsatz künstlicher Intelligenz zur Synthese von Pseudo-CT-Bildern aus MRT-Bildern [18,31,32], der zwar den besten Knochenkontrast (mit CNRs von 100 bis 150 [18] im Vergleich zu etwa 20 in dieser Studie) und ein CT-ähnliches Erscheinungsbild liefert, ist noch nicht praktikabel. Zukünftige Arbeiten werden die Möglichkeit untersuchen, die Knochenbildgebung durch den Einsatz fortschrittlicherer Bildverarbeitungs- und/oder Deep-Learning-Techniken zu verbessern.

5. Schlussfolgerungen

Zusammenfassend hat diese Studie die Durchführbarkeit zweier MRT-Techniken als strahlungsfreie Alternative zur Beurteilung einer Spondylolyse nachgewiesen, wobei ihre klinische Anwendung an einem jungen Probanden mit einem Pars-Defekt gezeigt wurde. Weitere Fortschritte in der MRT-Technologie mit Multi-Echo-UTE und FE haben das Potenzial, den Behandlungsstandard für jugendliche Sportler und andere Patienten mit isthmischer Spondylolyse zu verändern , indem sie eine sicherere, ebenso wirksame und strahlungsfreie Bildgebungsalternative bieten.

Beiträge der Autoren: Konzeptualisierung: WCB, SA, VM und MM; Methodik, WCB, VM, YY und MM; Software, WCB, VM und YY; Validierung, WCB und SA; formale Analyse, DV und WCB; Untersuchung, WCB, MM, SA, YY, TY, AM und DV; Ressourcen, AM, TY und DV; D

Machine Translated by Google

Kuratierung, WCB; Schreiben – Vorbereitung des Originalentwurfs, WCB, SA und MM; Schreiben – Überprüfung und Bearbeitung, VM, AM, TY, SA, DV und WCB; Visualisierung, WCB; Überwachung, MM und WCB; Projektverwaltung, AM und WCB; Mittelbeschaffung, MM und WCB. Alle Autoren haben die veröffentlichte Version des Manuskripts gelesen und stimmen ihr zu.

Finanzierung: Won C. Bae erhielt Forschungsgelder von Canon Medical Systems, USA. Mitsue Miyazaki erhielt Forschungsgelder von Canon Medical Systems Corporation, Japan (35938). Die Finanzierungsagenturen hatten keinen Einfluss auf das Studiendesign, die Datenerhebung, die Interpretation oder die Entscheidung, diese **Arbeit zur Veröffentlichung einzureichen .**

Erklärung des Institutional Review Board: Die Studie wurde in Übereinstimmung mit der Deklaration von Helsinki durchgeführt und vom Institutional Review Board der University of California, San Diego, genehmigt (Protokoll Nr. 200335, Genehmigungsdatum 17. Oktober 2023).

Einverständniserklärung: Von allen an der Studie beteiligten Personen wurde eine Einverständniserklärung eingeholt.

Datenverfügbarkeitserklärung: Die Daten, die die Ergebnisse dieser Studie stützen, sind aus vertraulichen Gründen nicht öffentlich verfügbar. Anonymisierte Daten können nach Prüfung der Anfrage beim entsprechenden Autor erhältlich sein. Die Daten befinden sich in einem Datenspeicher mit kontrolliertem Zugriff in der Institution des entsprechenden Autors.

Interessenkonflikte: Yuichi Yamashita ist Mitarbeiter von Canon Medical Systems, Japan. Die übrigen Autoren erklären, dass keine Interessenkonflikte vorliegen.

Verweise

1. **Olsen, TL; Anderson, RL; Dearwater, SR; Kriska, AM; Cauley, JA; Aaron, DJ; LaPorte, RE Die Epidemiologie von Rückenschmerzen bei Jugendlichen.** Am. J. Public Health **1992,** 82, **606–608.** [CrossRef] [PubMed]
2. **Wiltse, LL; Newman, PH; Macnab, I. Klassifikation von Spondylolisis und Spondylolisthesis.** Clin. Orthop. Relat. Res. **1976,** 117, **23–29.** [CrossRef]
3. **Fredrickson, BE; Baker, D.; McHolick, WJ; Yuan, HA; Lubicky, JP Die natürliche Geschichte der Spondylolyse und Spondylolisthesis.** J. Bone Jt. Surg. Am. **1984,** 66, **699–707.** [CrossRef]
4. **Bechtel, W.; Griffiths, H.; Eisenstadt, R. Die Pathogenese der Spondylolyse.** Investig. Radiol. **1982,** 17, **S29.** [CrossRef]
5. **Li, J.; Liang, J.; Xu, Y.; Du, D.; Feng, F.; Shen, J.; Cui, Y. Inzidenz der lumbalen Spondylolyse bei Sportlern mit Schmerzen im unteren Rückenbereich: Eine systematische Auswertung und einarmige Metaanalyse.** Medicine **2023,** 102, **e34857.** [CrossRef]
6. **West, AM; d'Hemecourt, PA; Bono, OJ; Micheli, LJ; Sugimoto, D. Diagnostische Genauigkeit der Magnetresonanztomographie und der Computertomographie bei jungen Sportlern mit Spondylolyse.** Clin. Pediatr. **2019,** 58, **671–676.** [CrossRef] [PubMed]
7. **Yamane, T.; Yoshida, T.; Mimatsu, K. Frühdiagnose einer lumbalen Spondylolyse durch MRT.** J. Bone Jt. Surg. Br. **1993,** 75, **764–768.** [Querverweis] [PubMed]
8. **Ulmer, JL; Mathews, VP; Elster, AD; Mark, LP; Daniels, DL; Mueller, W. MR-Bildgebung der lumbalen Spondylolyse: Die Bedeutung ergänzender Beobachtungen.** AJR Am. J. Roentgenol. **1997,** 169, **233–239.** [CrossRef]
9. **Leone, A.; Cianfoni, A.; Cerase, A.; Magarelli, N.; Bonomo, L. Lumbale Spondylolyse: Eine Rezension.** Skelett. Radiol. **2011,** 40, **683–700.** [Querverweis]
10. **Journy, N.; Roue, T.; Cardis, E.; Le Pointe, HD; Brisse, H.; Chateil, JF; Laurier, D.; Bernier, MO CT-Scans im Kindesalter und Krebsrisiko : Einfluss prädisponierender Faktoren für Krebs auf die Risikoschätzungen.** J. Radiol. Prot. **2016,** 36, **N1–N7.** [CrossRef]
11. **Berrington de Gonzalez, A.; Pasqual, E.; Veiga, L. Epidemiologische Studien zu CT-Scans und Krebsrisiko: Der Stand der Wissenschaft.** Br. J. Radiol. **2021,** 94, **20210471.** [CrossRef] [PubMed]
12. **Wang, WH; Sung, CY; Wang, SC; Shao, YJ Risiken von Leukämie, intrakraniellen Tumoren und Lymphomen im Kindes- und frühen Erwachsenenalter nach pädiatrischer Strahlenexposition durch Computertomographie.** CMAJ **2023,** 195, **E575–E583.** [CrossRef]
13. **Carey, TS; Garrett, JM; Jackman, A.; Hadler, N. Rezidive und Behandlungsbedarf nach akuten Rückenschmerzen: Ergebnisse einer langfristigen Folgestudie. North Carolina Back Pain Project.** Med. Care **1999,** 37, **157–164.** [CrossRef] [PubMed]
14. **Bae, WC; Biswas, R.; Chen, K.; Chang, EY; Chung, CB UTE MRT der osteochondralen Verbindung.** Curr. Radiol. Rep. **2014, 2, 35.** [Querverweis] [PubMed]
15. **Bharadwaj, UU; Coy, A.; Motamedi, D.; Sun, D.; Joseph, GB; Krug, R.; Link, TM CT-ähnliche MRT: Eine qualitative Bewertung von ZTE Sequenzen für knöcherne Knieanomalien.** Skelett. Radiol. **2022,** 51, **1585–1594.** [CrossRef] [PubMed]
16. **Cheng, KY; Moazamian, D.; Ma, Y.; Jang, H.; Jerban, S.; Du, J.; Chung, CB Klinische Anwendung der Magnetresonanztomographie (MR) mit ultrakurzer Echozeit (UTE) und Null-Echozeit (ZTE) bei der Beurteilung von Osteoarthritis.** Skelet. Radiol. **2023,** 52, **2149–2157** [Querverweis] [PubMed]
17. **Breighner, RE; Endo, Y.; Konin, GP; Gulotta, LV; Koff, MF; Potter, HG Technische Entwicklungen: Zero Echo Time Imaging der Schulter: Verbesserte Knochendetails durch MR-Bildgebung.** Radiology **2018,** 286, **960–966.** [CrossRef] [PubMed]
18. **Achar, S.; Hwang, D.; Finkenstaedt, T.; Malis, V.; Bae, WC Deep-Learning-gestützte Auswertung der Spondylolyse mit Magnetresonanztomographie mit ultrakurzer Echozeit.** Sensors **2023,** 23, **8001.** [CrossRef]

Machine Translated by Google

19. Jang, U.; Hwang, D. Hochwertige multiple T2 (*) Kontrast-MR-Bilder aus minderwertigen Multiecho-Bildern unter Verwendung von Temporal-Domain-Rauschunterdrückungsmethoden. Med. Phys. **2012,** 39, **468–474.** [CrossRef]

20. Jang, U.; Nam, Y.; Kim, DH; Hwang, D. Verbesserung des SNR und der Auflösung der suszeptibilitätsgewichteten Venographie durch Modellbasiertes Multi-Echo-Rauschunterdrücken. Neuroimage **2013,** 70, **308–316.** [CrossRef]

21. Johnson, B.; Alizai, H.; Dempsey, M. Schnelles Feldecho, das einem CT mit eingeschränktem Echoabstand ähnelt (FRACTURE): Eine neuartige MRT- Technik mit überlegenem Knochenkontrast. Skelett. Radiol. **2021,** 50, **1705–1713.** [CrossRef] [PubMed]

22. Goerner, FL; Clarke, GD Messung des Signal-Rausch-Verhältnisses in der teilweise parallelen Bildgebung MRI. Med. Phys. **2011,** 38, **5049–5057.** [Querverweis]

23. Edelstein, W.; Bottomley, P.; Hart, H.; Leue, W.; Schenck, J.; Redington, R. NMR-Bildgebung bei 5,1 MHz: In Arbeit. In International Symposium on NMR Imaging; **Witcofski, R., Karstaedt, N., Partain, C., Hrsg.; Bowman Gray School of Medicine: Winston-Salem, NC, USA, 1982; Seiten 139–145.**

24. Mishra, P.; Singh, U.; Pandey, CM; Mishra, P.; Pandey, G. Anwendung des Student-t-Tests, Varianz- und Kovarianzanalyse. Ann. Card. Anaesth. **2019,** 22, **407–411.** [CrossRef] [PubMed]

25. McHugh, ML Multiple Vergleichsanalysetests in ANOVA. Biochem. Med. **2011,** 21, **203–209.** [CrossRef] [PubMed]

26. Tsuchiya, K.; Gomyo, M.; Katase, S.; Hiraoka, S.; Tateishi, H. Magnetresonanz-Knochenbildgebung: Anwendungen bei Wirbelsäulenverletzungen. Jpn. J. Radiol. **2023,** 41, **1173–1185.** [CrossRef] [PubMed]

27. Schwaiger, BJ; Schneider, C.; Kronthaler, S.; Gassert, FT; Bohm, C.; Pfeiffer, D.; Baum, T.; Kirschke, JS; Karampinos, DC; Makowski, MR; et al. CT-ähnliche Bilder basierend auf T1-verfälschten Gradientenecho- und ultrakurzen Echozeit-MRT-Sequenzen zur Beurteilung von Wirbelfrakturen und degenerativen Knochenveränderungen der Wirbelsäule. Eur. Radiol. **2021,** 31, **4680–4689.** [CrossRef] [PubMed]

28. Du, J.; Bydder, M.; Takahashi, AM; Carl, M.; Chung, CB; Bydder, GM Kurzer T2-Kontrast mit dreidimensionalem Ultrakurz-Echo Zeitbildgebung. Magn. Reson. Imaging **2011,** 29, **470–482.** [CrossRef]

29. Largent, A.; Barateau, A.; Nunes, JC; Mylona, E.; Castelli, J.; Lafond, C.; Greer, PB; Dowling, JA; Baxter, J.; Saint-Jalmes, H.; et al. Vergleich von Deep Learning-basierten und Patch-basierten Methoden zur Pseudo-CT-Generierung in der MRT-basierten Prostata- Dosisplanung. Int. J. Radiat. Oncol. Biol. Phys. **2019,** 105, **1137–1150.** [CrossRef] [PubMed]

30. Bourbonne, V.; Jaouen, V.; Hognon, C.; Boussion, N.; Lucia, F.; Pradier, O.; Bert, J.; Visvikis, D.; Schick, U. Dosimetrische Validierung von eine GAN-basierte Pseudo-CT-Generation für die MRT-basierte stereotaktische Radiotherapie des Gehirns. Cancers **2021,** 13, **1082.** [CrossRef]

31. Florkow, MC; Willemsen, K.; Mascarenhas, VV; Oei, EHG; van Stralen, M.; Seevinck, PR Magnetresonanztomographie im Vergleich zur Computertomographie zur dreidimensionalen Knochenbildgebung muskuloskelettaler Pathologien: Ein Überblick. J. Magn. Reson. Imaging **2022,** 56, **11–34.** [CrossRef]

32. Morbee, L.; Vereecke, E.; Laloo, F.; Chen, M.; Herregods, N.; Jans, L. MR-Bildgebung der Beckenknochen: Die aktuellen und modernsten Techniken. J. Belg. Soc. Radiol. **2022,** 106, **123.** [CrossRef] [PubMed]

Haftungsausschluss/Anmerkung des Herausgebers: Die in allen Veröffentlichungen enthaltenen Aussagen, Meinungen und Daten sind ausschließlich die der einzelnen Autoren und Mitwirkenden und nicht die von MDPI und/oder den Herausgebern. MDPI und/oder die Herausgeber lehnen jegliche Verantwortung für Personen- oder Sachschäden ab, die aus den im Inhalt erwähnten Ideen, Methoden, Anweisungen oder Produkten resultieren.

Machine Translated by Google

Berechnung

MDPI

Artikel

Identifizierung und dynamisches Verständnis neuer Inhibitoren von Peptidasedomäne der Kollagenase G aus Clostridium histolyticum

Farah Anjum[1,*], Ali Hazazi 2,3, Fouzeyyah Ali Alsaeedi[1], Maha Bakhuraysah[1], Alaa Shafie[1], Norah Ali Alshehri 4,5, Nahed Hawsawi[1], Amal Adnan Ashour[6], Hamsa Jameel Banjer[1], Afaf Alharthi[1] und Maryam Ishrat Niaz[7]

1 Abteilung für klinische Laborwissenschaften, Hochschule für angewandte Medizinwissenschaften, Universität Taif, PO Box 11099, Taif 21944, Saudi-Arabien; fouzeyyah@tu.edu.sa (FAA); maha1@tu.edu.sa (MB); a.shafie@tu.edu.sa (AS); hawsawi.nm@gmail.com (NH); h.banjer@tu.edu.sa (HJB); a.awwadh@tu.edu.sa (AA)

2 Abteilung für Pathologie und Labormedizin, Security Forces Hospital Program, Postfach 3643, Riad 11481, Saudi-Arabien; ahazazi@sfh.med.sa

3 College of Medicine, Alfaisal University, Postfach 50927, Riad 11533, Saudi-Arabien

4 Abteilung für Familien- und Gemeinschaftsmedizin, Medizinische Fakultät, King Saud University (KSU), Riad 11481, Saudi-Arabien; drnora@ksu.edu.sa

5 Universitätszentrum für Familienmedizin, King Saud University Medical City, King Saud University (KSU), Riad 11481, Saudi-Arabien

6 Abteilung für Mund-, Kiefer- und Gesichtschirurgie und Diagnostikwissenschaften, Fakultät für Zahnmedizin, Universität Taif, Postfach 11099, Taif 21944, Saudi-Arabien; aaashour@tu.edu.sa

7 Abteilung für Grundlagenwissenschaften in der Krankenpflege, Krankenpflegeschule, Universität Taif, Postfach 11099, Taif 21944, Saudi-Arabien; mimohammad@tu.edu.sa

* Korrespondenz: farahanjum@tu.edu.sa

Zusammenfassung: Clostridium histolyticum **ist ein grampositives anaerobes Bakterium aus der** Gattung Clostridium **Gattung. Es produziert Kollagenase, ein Enzym, das am Abbau von Kollagen beteiligt ist, einem Schlüssel** Bestandteil des Bindegewebes. Allerdings stellt die antimikrobielle Resistenz (AMR) eine große Herausforderung dar in Bekämpfung von Infektionen, die durch diese Bakterien verursacht werden. Die langwierige Natur der traditionellen Arzneimittelentwicklung Techniken haben zu einer Verlagerung hin zum computergestützten Arzneimitteldesign und anderen modernen Arzneimittelentdeckungsverfahren geführt. **Ansätze. Die obige Methode bietet eine kostengünstige Möglichkeit zur Erfassung umfassender Informationen darüber, wie Liganden mit ihren Zielproteinen interagieren. Ziel dieser Studie ist die Entwicklung neuer, explizite Medikamente, die spezifisch das** Kollagenase-Enzym von C. histolyticum hemmen . **Durch strukturbasiertes virtuelles Screening wurde eine Bibliothek mit 1830 Verbindungen untersucht, um potenzielle Wirkstoffkandidaten gegen Kollagenase-Enzyme. Anschließend erfolgte eine molekulardynamische (MD) Simulation wurde in einer wässrigen Lösung durchgeführt, um das Verhalten von Protein und Ligand in einer dynamischen Umgebung, während eine Dichtefunktionaltheorie (DFT)-Analyse durchgeführt wurde, um die molekularen Eigenschaften und Struktur von Bleiverbindungen, und die WaterSwap-Technik wurde verwendet, um Einblicke in die Wechselwirkung von Arzneimitteln und Proteinen mit Wassermolekülen. Analyse (PCA) wurde durchgeführt, um Konformationsänderungen aufzudecken, Salzbrücken zum Ausdruck elektrostatischer Interaktion und Proteinstabilität sowie Absorption, Verteilung, Stoffwechsel, Ausscheidung und Toxizität (ADMET) zur Bewertung des pharmakokinetischen Profils von Top-Verbindungen und Kontrollmolekülen. Drei Potente Wirkstoffkandidaten wurden identifiziert MSID000001, MSID000002, MSID000003, und die Kontrolle mit ein Bindungswert von ÿ10,7 kcal/mol, ÿ9,8 kcal/mol, ÿ9,5 kcal/mol bzw. ÿ8 kcal/mol. Darüber hinaus wurde eine Molekularmechanik-Poisson-Boltzmann-Oberflächenanalyse (MMPBSA) der Die Simulationstrajektorien ergaben Energiewerte von ÿ79,54 kcal/mol, ÿ73,99 kcal/mol, ÿ62,26 kcal/mol, und ÿ70,66 kcal/mol. Die gezeigten pharmakokinetischen Eigenschaften lagen unter den akzeptabler Bereich. Die Verbindungen haben das Potenzial, neuartige Medikamente zu sein; daher sind weitere Untersuchungen** muss durchgeführt werden, um ihre Anti-Kollagenase-Wirkung gegen C. histolyticum- Infektionen **herauszufinden und Antibiotikaresistenz.**

check for updates

Zitat: Anjum, F.; Hazazi, A.; Alsaeedi, FA; Bakhuraysah, M.; Shafie, A.; Alshehri, NA; Hawsawi, N.; Ashour, AA; Banjer, HJ; Alharthi, A.; et al. Identifikation und Dynamik des Romans verstehen Inhibitoren der Peptidasedomäne von Kollagenase G aus Clostridium Berechnung **2024,** 12 , **153.** https://doi.org/10.3390/Berechnung12080153

Wissenschaftlicher Redakteur: Claudio Amovilli

Empfangen: 27. Juni 2024
Überarbeitet: 18. Juli 2024
Akzeptiert: 21. Juli 2024
Veröffentlicht: 25. Juli 2024

Copyright: © 2024 bei den Autoren. Lizenznehmer MDPI, Basel, Schweiz. Dieser Artikel ist ein Open Access-Artikel vertrieben unter den Bedingungen und Bedingungen der Creative Commons Namensnennung (CC BY)-Lizenz (https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

Machine Translated by Google

Schlüsselwörter: antimikrobielle Resistenz; molekulardynamische Simulation; Hauptkomponentenanalyse; Salzbrücken; WaterSwap; strukturbasiertes Arzneimitteldesign

1. Einleitung

Der Anstieg medikamentenresistenter Bakterien stellt eine ernste Bedrohung für die öffentliche Gesundheit und die Weltwirtschaft dar, wie der jüngste Anstieg der bakteriellen Todesfälle zeigt [1]. Gleichzeitig verschärft die langsame Entwicklung neuer Antibiotika das Problem und könnte letztlich zu Todesfällen durch derzeit leichte Erkrankungen führen [2]. Um diese Entwicklung zu verhindern, müssen umgehend Maßnahmen ergriffen werden, die die Erforschung alternativer Therapieansätze ohne Antibiotika erfordern. Antivirulenzmedikamente, allgemein als „Pathoblocker“ bezeichnet, sind unter ihnen eine praktikable Option. Diese Medikamente können Krankheiten wirksam verhindern oder verzögern, indem sie die Pathogenitätsfaktoren der Bakterien gezielt angreifen und verhindern [3].

Das grampositive anaerobe Bakterium Clostridium histolyticum **gehört zur Gattung Clostridien, die eine breite Kategorie von Bakterien umfasst, die durch die Fähigkeit gekennzeichnet sind, eine große Anzahl von Toxinen und Enzymen zu produzieren [4].** C. histolyticum **ist ein Mitglied der Klasse Clostridia und des Stammes Firmicutes [5] .** C. histolyticum hat **vor allem deshalb viel Aufmerksamkeit in der biomedizinischen Forschung auf sich gezogen, weil es eine robuste enzymatische Aktivität sowie Verbindungen zu verschiedenen Arten von medizinischen Leiden und Krankheiten beim Menschen aufweist. Aufgrund seiner stäbchenförmigen Struktur und seiner Fähigkeit, unter schwierigen Umweltbedingungen** Endosporen zu produzieren , **kann es in einer Vielzahl von Umgebungen überleben, darunter Wasser, Boden und den Eingeweiden von Mensch und Tier [6]. Die Peyronie-Krankheit und die Du-Kontraktur sind zwei Arten von Krankheiten, bei denen** C. histolyticum- Kollagenasen einen unregelmäßigen **Kollagenstoffwechsel verursacht haben [7]. Bei diesen Erkrankungen führt eine hohe Konzentration von Kollagenablagerungen zu Gewebekontraktu**

Kollagenasen, Hyaluronidasen, Proteasen und Hämolysine sind einige der von C. histolyticum produzierten **Virulenzfaktoren . Diese Enzyme spielen eine wichtige Rolle bei der Gewebeinvasion, der Lyse von Wirtszellen und der Pathogenese [8].** C. histolyticum **produziert fünf verschiedene Arten von Toxinen. Von diesen sind ÿ-Toxine die Hauptursache für die Pathogenese, während Kollagenasen für die Infektion mit Clostridien durch das Virus** von entscheidender Bedeutung sind **[9]. Kollagenasen stechen unter diesen Virulenzfaktoren aufgrund ihrer einzigartigen Fähigkeit hervor, Kollagen abzubauen, das wichtigste Strukturprotein in Bindegeweben [1]. Proteolytische Enzyme, sogenannte Clostridienkollagenasen, greifen speziell Kollagenmoleküle an. Sie verursachen den Bruch von Kollagenfasern und die Zerstörung von Bindegewebe, indem sie Peptidbindungen innerhalb der Dreifachhelixstruktur von Kollagenfibrillen zerschneiden [10]. Diese Enzyme weisen ein hohes Maß an Substratspezifität für zahlreiche Formen von Proteinkollagen auf, darunter Typ I, II, III und IV [11]. Es gibt zwei Arten von Kollagenaseenzymen, ColG und ColH [1]. Kollagenase H (ColH) und Kollagenase G (ColG) gehören zur Familie der Metalloproteasen M9. Kollagenasen gelten als wichtige Ziele für die Entwicklung anderer Behandlungsansätze gegen Antibiotikaresistenzen, da sie die Entwicklung bakterieller Infektionen durch** C. histolyticum negativ beeinflussen **[9].**

Eine von **[12] durchgeführte Studie verwendete synthetische Peptide und nicht-proteinogene Aminosäuren, um Inhibitoren gegen** Clostridium histolyticum- **Kollagenasen zu finden. Ziel der Studie war es, neue Inhibitoren gegen Trypsin und Kollagenasen zu finden. Durch molekulares Docking wurde die Interaktion zwischen nicht-proteinogenen Aminosäuren und Peptiden mit** C. histolyticum- **Kollagenase und Trypsin untersucht. Basierend auf der molekularen Dockinganalyse zeigte N-tert-Butoxycarbonylglycyl-(S)-2-amino-3-(4-((4-fluorophenyl)-ethinyl)-phenyl)-ÿ-alanin eine vielversprechende Interaktion mit Kollagenasen. Das Ergebnis zeigt, dass das Dipeptid ein guter Inhibitor von Kollagenasen ist.**

Forscher konnten durch Fortschritte in der Bioinformatik und computergestützten Ansätzen neuartige Medikamente und Impfstoffe entwickeln, die sowohl den Zeit- als auch den Kostenaufwand für die Entwicklung neuer Medikamente verringern könnten **[13]. Die Entwicklung eines völlig neuartigen Medikaments über experimentelle Ansätze ist eine schwierige Aufgabe. Die Umwidmung von Medikamenten ist eine aufkommende Praxis, bei der häufig verwendete Medikamente, die sich zuvor als wirksar**

Machine Translated by Google

ffi

ff

als sicher in Humanstudien zur Behandlung verschiedener Krankheiten zu erweisen. Angesichts der hohen Kosten und des langen Zeitrahmens ist dieser Ansatz jedoch nicht nachhaltig [14]. Der schnelle Anstieg bakterieller Resistenzen zwingt Forscher, den Schwerpunkt auf die Entwicklung neuer, wirksamer Medikamente zu legen **[15]. In Anbetracht der vielen Nachteile der traditionellen Arzneimittelforschung könnte das computergestützte Arzneimitteldesign aufgrund seiner geringeren Kosten und des geringeren Ressourcenverbrauchs** eine sinnvollere Alternative für die Forschung sein **[16]. Eine beliebte rechnergestützte Technik verwendet ein Tool für das strukturelle Arzneimitteldesign, um mehrere Arzneimittelbibliotheken virtuell auf ein bestimmtes Ziel zu prüfen. Dies könnte den Arzneimitteldesignprozess beschleunigen, indem Zeit bei der Entwicklung neuer Leitsubstanzen zur gezielten Bekämpfung des spezifischen Enzyms oder Proteins** gespart **wird [17]. Vor diesem Hintergrund wurden im Rahmen dieser Studie mehrere chemisch-informatische und biophysikalische Techniken eingesetzt, um potenzielle Leitsubstanzen gegen Kollagenasen** von C. histolyticum zu entdecken

2. Methodik

Abbildung 1 zeigt einen schematischen Überblick der gesamten Forschungsarbeit.

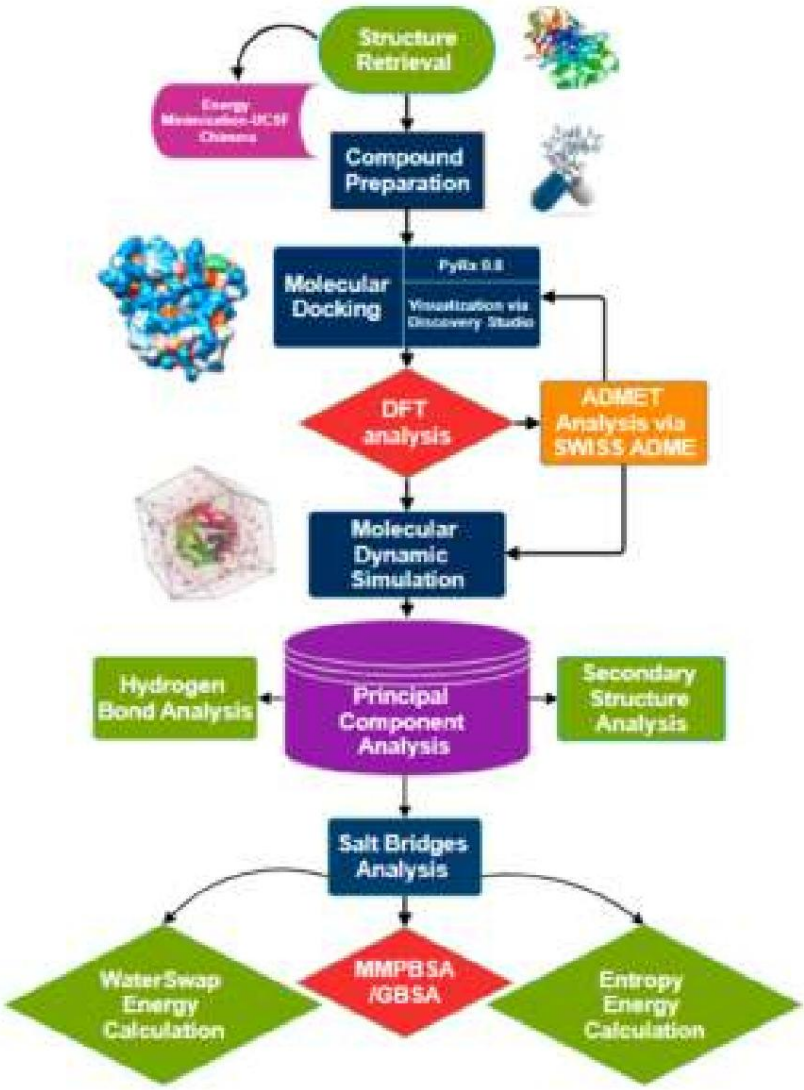


Abbildung 1. Der integrierte rechnergestützte Arbeitsablauf beginnt mit (i) Strukturabruf und -vorbereitung, gefolgt von (ii) Verbindungsvorbereitung und (iii) molekularem Docking. Als nächstes folgt eine DFT-Analyse zur Schätzung elektronischer Eigenschaften und Struktur (iv), ADMET zur Bewertung des Pharmakokinetikprofils (v) und MD-Simulation, (vi) PCA-Analyse sowie (vii) Sekundärstrukturanalyse, (viii) Wasserstoffbrückenanalyse . (ix) Salzbrücken, (x) MMPBSA, (xi) Berechnung der Entropieenergie und schließlich (xii) Schätzung der Wasseraustauschenergie.

Machine Translated by Google

2.1. Ermittlung und Vorbereitung der Kristallstruktur des Collagenase-Enzyms

Die Kristallstruktur der Collagenase aus C. histolyticum **wurde aus der Protein Data Bank (PDB)** **https://www.rcsb.org/?ref=nav_home** ermittelt. **mit PDB-ID; 7ZBV. Anschließend wurde die Struktur in UCSF Chimera v.1.17 geladen, um sie frühzeitig zu visualisieren, fehlende Reste zu erkennen und Strukturfehler zu erkennen [18]. Um die Struktur zu vervollständigen, wurden Wasserstoffatome und Ladungen über Chimaera v1.17 mithilfe der Funktionen** „Add charge“ und „AddH“ hinzugefügt **[19]. Anschließend wurden zwei Algorithmen angewendet, um die Energie zu minimieren: der konjugierte Gradientenalgorithmus, der 5000 Schritte lang ausgeführt wurde, und der Algorithmus für den steilsten Abstieg, der 5000 Zyklen mit einer Schrittweite von 0,02 Å lang ausgeführt wurde [20]. Diese zyklischen Verfahren zielen darauf ab, sterische Probleme in der Struktur eines Enzyms zu minimieren . Nach der Minimierung der Energie wurde die verbesserte Struktur des Enzyms in einem pdb-Forr**

2.2. Auswahl und Herstellung von Ligandenbibliotheken

Ziel war die Identifizierung neuer und wirksamer Inhibitoren des Enzyms Kollagenase, das 1830 Verbindungen enthält, unter Verwendung verschiedener natürlicher Quellen. Die Medicinal Fungi Secondary metabolites And Therapeutics MeFSAT-Bibliothek wurde im SDF-Format heruntergeladen [21]. Die Bibliothek wurde dann für den Energieminimierungsprozess in die Software PyRx 0.8 importiert [22].
Das MM2-Kraftfeld wurde zunächst angewendet, um die Energie der Verbindung zu minimieren [23]. Für ein strukturbasiertes virtuelles Screening wurden die Verbindungen in das pdbqt-Format konvertiert **[24].**

2.3. Molekulare Dockingstudien

Strukturbasiertes virtuelles Screening ist eine effektive Technik zum Screening von Arzneimittelbibliotheken gegen jedes Zielbiomolekül [25]. Mithilfe von Auto Dock in PyRx 0.8 wurde ein virtuelles Screening von Verbindungen durchgeführt, die auf ein bestimmtes Protein abzielen [26]. Nachdem das Zielprotein und die chemische Bibliothek zur weiteren Energieminimierung in PyRx geladen worden waren, wurden alle Liganden in das Auto Dock-Format konvertiert. Darüber hinaus ermöglichte Auto Dock das Andocken der drei wichtigsten Liganden erheblich. Basierend auf dem Bindungsenergie-Score wurden die Moleküle angeordnet. Diejenigen mit dem niedrigsten Energie-Score wurden für eine stabile Bindungskonformation ausgewählt und anschließend wurden eine dreidimensionale (3D) strukturelle Ausrichtung, Analyse und Visualisierung über Discovery Studio 2.4 durchgeführt [27].

2.4. Dichtefunktionaltheorie (DFT)

Alle untersuchten Strukturen wurden unter Verwendung der B3LYP-Funktion mit GD3- Korrektur und einem 6–311+G (d, p)-Basissatz unter Verwendung der DFT-Berechnungsmethode optimiert **[28].**
Die Geometrieoptimierung wurde außerdem verwendet, um die stabile Konformation der untersuchten Strukturen zusammen mit chemischen Deskriptoren und molekularen Reaktivitätsparametern wie Energielücke , chemischem und Ionisierungspotential, Grenzmolekülorbital (FMO), Elektronenaffinität, Elektronegativität, chemischer Härte, Weichheit und Elektrophilieindex zu überprüfen, um die nukleophile und elektrophile Natur, chemische Reaktivität und Stabilität zu bestimmen [29].
Gaussian16-Suite (https://gaussian.com/gaussian16/) wurde für alle Berechnungen verwendet.
Das GaussView6 Molecular Visualization Tool wurde zur Visualisierung und Generierung von Konturkarten und Karten des molekularen elektrostatischen Potentials (MEP) eingesetzt **[30]. Diese Karten könnten bei der Identifizierung möglicher Bereiche helfen ,** die an chemischen Reaktionen beteiligt sind oder **für Arzneimittel-Rezeptor-Wechselwirkungen entscheidend sind [31].**

2.5. ADME und Pharmakokinetikprofil

ADME und die pharmakologische Aktivität ausgewählter Leitstrukturen spielen eine wichtige Rolle in der Arzneimittelentwicklung [32]. Das Adsorptions-, Verteilungs-, Metabolismus- und Ausscheidungsanalyseprofil wurde mithilfe von SwissADME http://www.swissadme.ch/ bestimmt. Zur Analyse der Toxizitätsvorhersage der Verbindungen steht eine Datenbank namens pkCSM (https://biosig.lab) zur Verfügung. uq.edu.au/ wurde ausgenutzt [33].

Machine Translated by Google

2.6. Molekulardynamische Simulation **Da**

Dockinganalysen ungenau sein können, ist eine zusätzliche Validierung erforderlich , insbesondere mithilfe der MD-Simulationstechnik [34]. Der erste Schritt bei der Vorbereitung von Protein- und Ligandenkomplexen für die MD-Simulation war die Dockinganalyse [35]. Die Bindungsstelle eines Liganden in der aktiven Tasche des Proteins unter statischen Bedingungen wurde durch molekulare Dockingstudien bestimmt **[36]. Mithilfe von MD-Simulationen konnte die Bindungsposition des Liganden unter schwierigen physiologischen Bedingungen vorhergesagt werden [37]. Die Komplexe wurden zunächst mit dem Antechamber-Programm von AMBER22 verarbeitet. Das Rezeptorprotein wurde durch das Kraftfeld FF14Sb erstellt, während die Verbindungen mithilfe des Kraftfelds GAFF 5** hergestellt wurden **[38]. Die MD-Simulation wurde in drei Phasen durchgeführt, darunter die Generierung der prtmtop-Datei, die Vorverarbeitungsphase und der Produktionsschritt [39]. Nach** Zugabe von Gegenionen wurden die speziell ausgewählten angedockten Komplexe zunächst **in die TIP3P-Wasserbox getaucht . Anschließend durchlief jeder Komplex einen 200 ns langen Produktionslauf, bei dem er langsam auf 310 K erhitzt und stabilisiert wurde [40]. Zur Untersuchung des strukturbasierten Screenings der Komplexe 57 wurde CPPTRAJ verwendet. Der Simulationsgraph 60 wurde mit XMGRACE v5.1 erstellt [41].**

2.7. Wasserstoffbrückenanalyse

Es ist wichtig, die Anzahl der nach der Simulation zwischen den Verbindungen und den Resten im aktiven Zentrum des Enzyms gebildeten Wasserstoffbrücken zu zählen, da dies anzeigt, wie fest die Verbindungen binden [42]. In dieser Untersuchung untersuchten wir die Bildung von Wasserstoffbrücken zwischen den Verbindungen und dem aktiven Zentrum der Enzymreste durch molekulardynamische Simulationen. Das Programm AMBER22 wurde für die Systemeinrichtung, Äquilibrierung und Trajektorienentwicklung verwendet. Anschließend wurde das Modul cpptraj von AMBER angewendet, um die Wasserstoffbrücken zu untersuchen. Zusätzlich wurden ein Winkelgrenzwert von 120° und ein Distanzgrenzwert von 3,5 Å zwischen Wasserstoffdonor- und -akzeptoratomen verwendet, um die Wasserstoffbrüc Die Visualisierung der H-Brücken erfolgte mithilfe der Molekülvisualisierungssoftware Visual Molecular Dynamics (VMDs) v1.9.3 [44].

2.8. Berechnung der Bindungsaffinitäten

Erkenntnisse über die freie Bindungsenergie sind entscheidend für das Verständnis der Wechselwirkung zwischen Liganden und Proteinen [45]. Die AMBER22 MM/PBSA-Techniken wurden verwendet, um die freien Bindungsenergien (G-Bindung) der Komplexe zu berechnen. Mithilfe der MMPBSA wurde die freie Bindungsenergie zwischen den Verbindungen und dem Hauptenzym Kollagenase geschätzt [46]. Die Bindungsenergien wurden mithilfe der folgenden Gleichung berechnet:

$$\begin{aligned} \text{EMM} &= \text{ÿEint} + \text{ÿEele} + \text{ÿEvdw ÿGasol} \\ &= \text{ÿGp} + \text{ÿGnp ÿGtotal} = \\ &\text{ÿEMM} + \text{ÿGsol ÿGbind} = \text{ÿEMM} \\ &+ \text{ÿGsol ÿ T} \end{aligned} \quad (1)$$

Dabei steht ÿEMM für eine Gesamtänderung der molekularmechanischen Energie, ÿEint für eine Gesamtänderung der Energie der inneren Wechselwirkungen, ÿEele für eine Gesamtänderung der elektrostatischen Energie, ÿEvdw für eine Gesamtänderung der van der Waals-Energie, ÿGsol für eine Gesamtänderung der Solvatationsenergie , ÿGp zeigt die Gesamtänderung der polaren Solvatationsenergie und ÿGnp für eine Gesamtänderung der unpolaren Solvatationsenergie.

2.9. Berechnung der Entropieenergie

Eine Normalmodus-Schätzmethode in der AMBER-Software v22 wurde verwendet, um zu schätzen die Entropieenergie jedes Komplexes [47]. Um eine repräsentative Konformationsauswahl zu gewährleisten, wurden zehn Frames aus den MD-Simulationstrajektorien ausgewählt. Diese Frames wurden dann einer Normalmodusanalyse unterzogen, um die Entropieenergie für jeden Komplex unabhängig zu be

Machine Translated by Google

2.10. Absolute Energieschätzung für WaterSwap

Unter Verwendung einer fortschrittlichen WaterSwap-Technik wurde die absolute freie Bindungsenergie von Komplexen berechnet, um die Bildung starker intermolekularer Komplexe zu validieren [48].
Diese Technik ist präziser und effektiver als MMPB/GBSA, da sie die wichtige Funktion von Wassermolekülen bei der Förderung der Interaktion zwischen Liganden und den Resten des aktiven Zentrums in einem bestimmten Enzym zeigt **[49].**

2.11. Sekundärstrukturanalyse

Um die **Unterschiede in den Sekundärstrukturmustern der Zielproteine zu identifizieren, wurde eine Sekundärstrukturanalyse durchgeführt [50]. Für die Sekundärstrukturanalyse des Zielenzyms wurde das VMD-Modul von AMBER22 verwendet .**

2.12. Hauptkomponentenanalyse (PCA)

PCA, oft auch als Essential Dynamics (EDs) bezeichnet, ist eine Technik, die die Daten vereinfacht und die beobachtbaren Bewegungsänderungen des Proteins während des Simulationszeitraums erklärt [51]. In der vorliegenden Studie wurde PCA durch Diagonalisierung der Kovarianzmatrix erreicht, die unter Verwendung der Atome Cÿ **des im SMT neu kodierten Enzyms mithilfe der folgenden Gleichung erstellt wurde:**

$$C = \langle (q_i - \langle q_i \rangle)(q_j - \langle q_j \rangle)^T \rangle \quad (2)$$

wobei <qi> **und** <qj> **ihre mittleren Positionen über Konformationsgruppen darstellen, die aus MIMD-Simulationen abgeleitet wurden, und** qi **und** qj **die kartesischen Koordinaten des i-ten bzw. j-ten** Cÿ- **Atoms im Zielenzym sind. Zusammengenommen zeigen der Eigenwert und der Eigenvektor, die sich aus der Diagonalisierung ergeben, die koordinierte Bewegung der Strukturdomäne bzw. ihre schwankende Amplitude auf einem Eigenvektor an. Das CPPTRAJ-Programm in Amber wurde verwendet, um die PCA durchzuführen [52].**

2.13. Salzbrücken

Das Softwareprogramm AMBER22 wurde verwendet, um eine computergestützte Auswertung von Salzbrücken durchzuführen **[53]. Die Durchführung einer Salzbrückenanalyse ist aus verschiedenen Gründen für das computergestützte Arzneimitteldesign von entscheidender Bedeutung. Proteinstrukturen wurden durch Salzbrücken stabilisiert und molekulare Wechselwirkungen wurden durch Salzbrücken beeinflusst, die sich zwischen entgegengesetzt geladenen Aminosäureresten in einem Protein** bilden **[45].** Durch die computergestützte Analyse von Salzbrücken können Forscher mehr über **die Dynamik und Stabilität von Protein-Liganden-Komplexen erfahren ,** was bei der Identifizierung **wichtiger Wechselwirkungen hilft, die für die Arzneimittelbindung erforderlich sind [54**

3. Ergebnisse

3.1. Strukturabruf und erste Vorbereitung

Die aktuelle Studie wurde durchgeführt, um wirksame Inhibitoren gegen Clostridium hsitolyticum **mit dem Hauptenzym Collagenase zu identifizieren. Die Struktur wurde aus PDB unter Verwendung der PDB-ID 7ZBV abgerufen. Collagenasen haben eine globale Symmetrie: Asymmetrisch – C1 und eine globale Stöchiometrie: Monomer – A1. Die Methode der Röntgenbeugung wurde verwendet, um die Enzymstruktur zu bestimmen, die mit einer Auflösung von 1,95 Å zugänglich ist. Die Kristallstruktur wurde über UCSF Chimera v.1.17 visualisiert. Abbildung 2 zeigt die gesamte dreidimensionale Struktur (3D) der Collagenase, die die Alphahelix, katalytische Reste und Betastränge darstellt . Darüber hinaus zeigt Abbildung 2 auch die Nahaufnahme der aktiven Stellen, die an der Ligandenbindung beteiligt sind.**

Machine Translated by Google

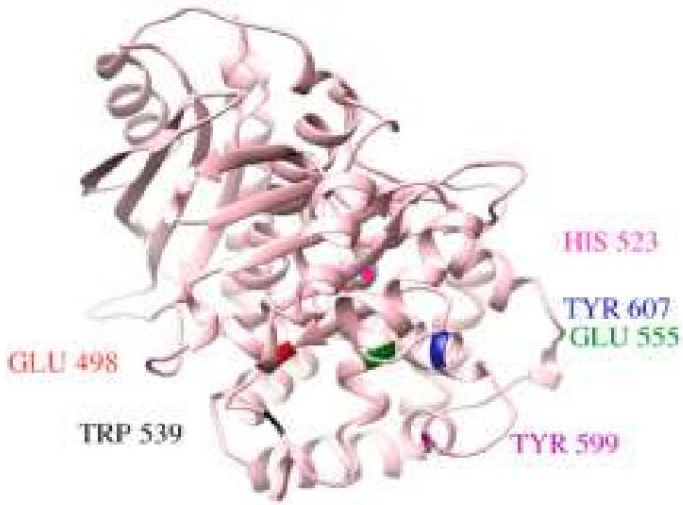


Abbildung 2. Hebt die markierten aktiven Stellenreste GLU498, TRP539, HIS523, TYR607, GLU555 und TYR599 in der dreidimensionalen (3D) Struktur des Kollagenase-Enzyms.

3.2. Molekulare Docking- und Bindungsinteraktion/Posenanalyse

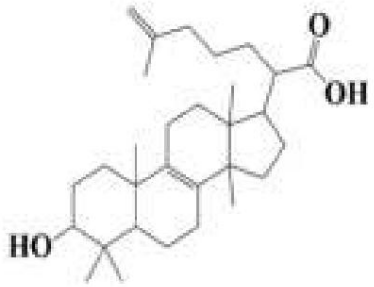
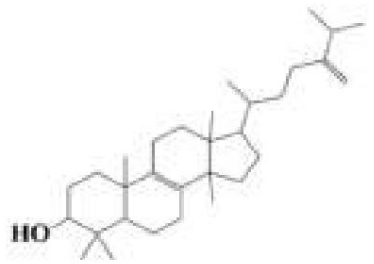
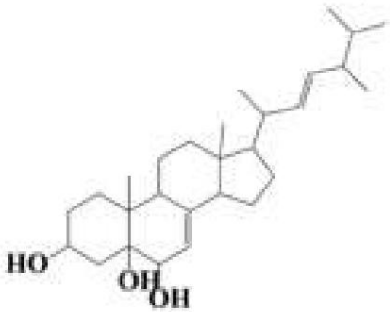
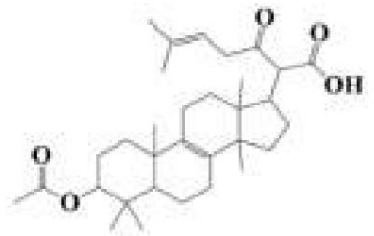
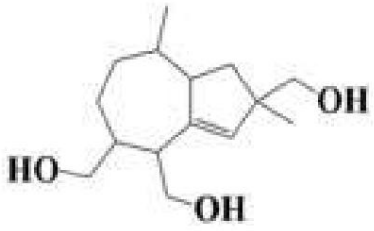
Molekulares Docking ermöglicht ein besseres Verständnis der Protein-Liganden-Interaktion im Arzneimittelentwicklungsprozess [32]. In dieser Studie wurde eine Bibliothek in Strukturformel Datendatei (SDF)-Format. Die medizinischen Pilze Sekundärmetaboliten und Therapeutika Die MeFSAT-Bibliothek mit 1830 Verbindungen wurde ausgewählt, um die potenziellen Inhibitoren zu identifizieren gegen das C. histolyticum **Kollagenase-Enzym. Ein strukturbasiertes virtuelles Screening wurde für 1830 Verbindungen gegen das Zielenzym mit dem PyRx 0.8 AutoDock du Vina-Tool. Basierend auf den Bindungswerten wurden 10 Verbindungen, die eine starke Wechselwirkung mit dem Kollagenase-Enzym zeigten, als Treffer ausgewählt. Ihre Struktur und chemische Namen sowie ihre Bindungswerte sind in Tabelle 1 aufgeführt. Um die Docking-Ergebnisse zu validieren und ihr Potenzial als Inhibitoren des Kollagenase-Enzyms zu bewerten, wurden 3/10 Verbindungen wurden für eine weitere computergestützte Analyse, d.h. eine molekulardynamische Simulation, ausgewählt. Die Dockinganalyse ergab, dass die drei wichtigsten Verbindungen (MSID1) 2-(3-Hydroxy-4,4,10,13,14-Pentamethyl2,3,4,5,6,7,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren- 17-yl)-6-methylhept-6-ensäure, (MSID2) 4,4,10,13,14-Pentamethyl-17-(6-methyl- 5-methylenheptan-2-yl)-2,3,4,5,6,7,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahydro-1H-cyclopenta[a] Phenanthren-3-ol und (MSID3) (E)-17-(5,6-Dimethylhept-3-en-2-yl)-10,13-Dimethyl-2,3,4,5,6, 9,10,11,12,13,14,15,16,17-Tetradecahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-3,5,6-triol zeigte vielversprechende Bindungswerte von ÿ10,7 kcal/mol, ÿ9,8 kcal/mol bzw. ÿ9,5 kcal/mol, während die Kontrolle einen Bindungswert von ÿ8 mit dem Zielenzym Kollagenase z Die Wechselwirkungs- und Bindungsverhältnisse der Hits-Verbindungen sind in Abbildung 3** dargestellt. **Analyse der Bindungspositionen und Interaktionen zeigte, dass MSID1 mit der höchsten von ÿ10.7, bildete konventionelle Wasserstoffbrücken mit Tyr496 und machte van der Waals-Wechselwirkung mit Glu498, Tyr599, Trp604, Ile497, Glu524, Leu495, Glu555, Gly493, und Asn492. Eine Kohlenstoff-Wasserstoff-Bindungswechselwirkung wurde durch HIS527 nachgewiesen, während Alkyl und Pi-Alkyl-Interaktionen wurden mit Trp39 bzw. Ala531 beobachtet (Abbildung 4). MSID2 mit Der zweithöchste Bindungswert von ÿ9,8 zeigte eine van der Waals-Wechselwirkung mit Ile576, Glu559 und Arg573. His523, Glu524, Asn 492, Glu555, Trp539, Tyr599, Trp604, Glu519 und Gly 493, während Tyr607 Alky- und PHE515 Pi-Sigma-Interaktionen durchführen (Abbildung 4). MSID3 mit dem dritthöchsten Bindungswert von ÿ9,5 bildete eine Van-der-Waals-Wechselwirkung mit Leu520, Tyr607, Glu524, Tyr599, His527, Ile497, Ala531, Glu498, Tyr496, Leu495, Asn492, Gly494, Phe515 und Trp539 paaren Pi-Sigma-Interaktionen mit dem Rezeptorprotein (Abbildung 4). Allerdings bildete das Kontrollmolekül auch konventionelle Wasserstoffbrücken mit His527, Glu498 und Tyr496, während Pro499, Ala531, Tyr528, Glu555 und Ile497 van der Waals-Wechselwirkung. Darüber hinaus paaren Leu495 und Trp539 Pi–Alkyl und Pi–Pi gestapelt**

Machine Translated by Google

Interaktion (Abbildung 4). Die Collagenase-Enzymreste, die bei der Interaktion mit den drei wichtigsten Verbindungen beobachtet wurden, sind in Tabelle 2 aufgeführt.

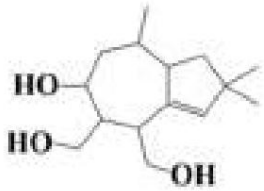
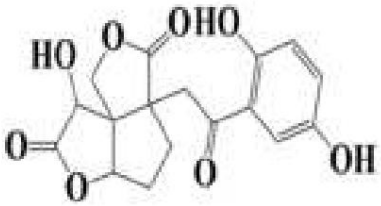
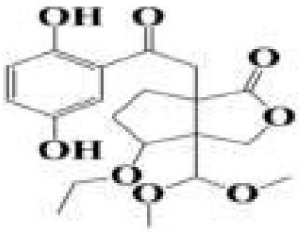
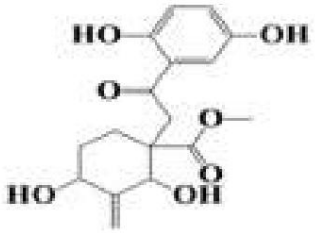
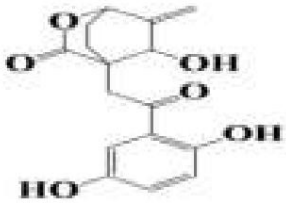
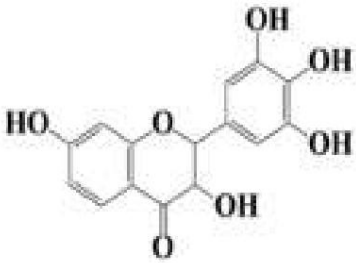
Tabelle 1. Top 10 der Verbindungen mit den höchsten Bindungsaffinitäten, chemische Namen gekoppelt mit ihren chemischen Strukturen.

ffi ffi ffi ffi

S.Nr	Verbindungen	Struktur	Bindungsaffinität
1	MSID000001 2-(3-Hydroxy-4,4,10,13,14-pentamethyl2,3,4,5,6,7,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-17- yl)-6-methylhept-6-ensäure		ÿ10,7 kcal/mol
2	MSID000002 4,4,10,13,14-Pentamethyl-17-(6-methyl-5-methylenheptan-2-yl)-2,3,4,5,6,7,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahydro-1H-Cyclopenta[a]phenanthren-3-ol		ÿ9,8 kcal/mol
3	MSID000003 (E)-17-(5,6-Dimethylhept-3-en-2-yl)-10,13-Dimethyl-2,3,4,5,6,9,10,11,12,13,14,15,16,17-Tetradecahydro-1H-Cyclopenta[a]phenanthren-3,5,6-triol		ÿ9,5 kcal/mol
4	MSID000004 2-(3-Acetoxy-4,4,10,13,14-pentamethyl-2,3,4,5,6,7,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahydro-1H-Cyclopenta[a]phenanthren-17-yl)-6-methyl-3- oxohept-5-ensäure		ÿÿ9,3 kcal/mol
5	MSID000006 2,8-Dimethyl-1,2,4,5,6,7,8,8a-Octahydroazulen-2,4,5-triyl)trimethanol		ÿ9,2 kcal/mol

Machine Translated by Google

Tabelle 1. Fortsetzung

S.Nr	Verbindungen	Struktur	Bindungsaffinität
6	**MSID000009 (6-Hydroxy-2,2,8-trimethyl-1,2,4,5,6,7,8,8a-octahydroazulen-4,5-diyl)dimethanol**		**ÿ9 kcal/mol**
7	**MSID000010 3a-(2-(2,5-Dihydroxyphenyl)-2-oxoethyl)-8-hydroxytetrahydrocyclopenta[1,2-b:2,3-cÿ]difuran-3,7(1H,8H)-dion**		**ÿ8,9 kcal/mol**
8	**MSID000016 6a-(2-(2,5-Dihydroxyphenyl)-2-oxoethyl)-3a-(dimethoxymethyl)-4-ethoxyhexahydro-1H-cyclopenta[c]furan-1-on**		**ÿ8,6 kcal/mol**
9	**MSID000020 Methyl-1-(2-(2,5-dihydroxyphenyl)-2-oxoethyl)-2,4-dihydroxy-3-methylencyclohexancarboxylat**		**ÿ8,5 kcal/mol**
10	**MSID000022 4-(2-(2,5-Dihydroxyphenyl)-2-oxoethyl)-5-hydroxy-6-methylen-2-oxabicyclo[2.2.2]octan-3-on**		**ÿÿ8,4 kcal/mol**
11	**Kontrolle 3,7-Dihydroxy-2-(3,4,5-trihydroxyphenyl)chroman-4-on**		ÿÿ8 **kcal/mol**

Machine Translated by Google

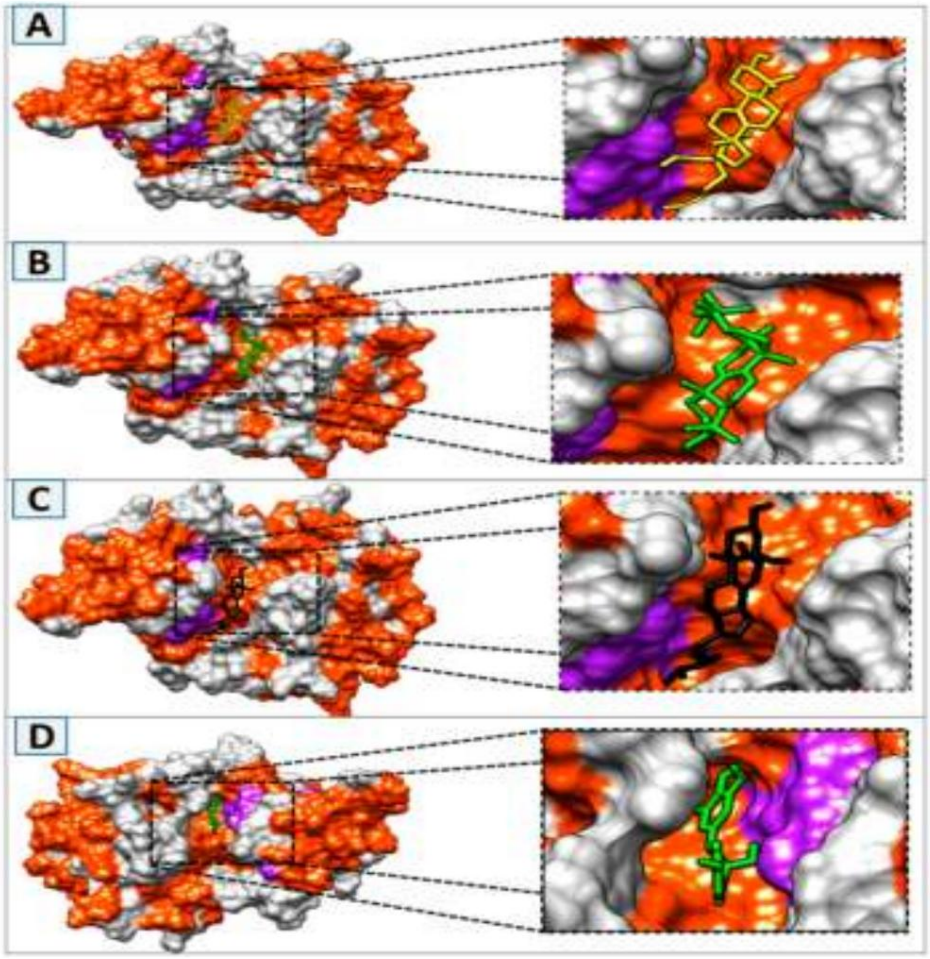


Abbildung 3. Die dreidimensionale (3D) Dockinginteraktion und Bindungspositionen des Zielenzyms mit Liganden wie MSID000001 (A), MSID000002 (B), MSID000003 (C) und Kontrolle (D).

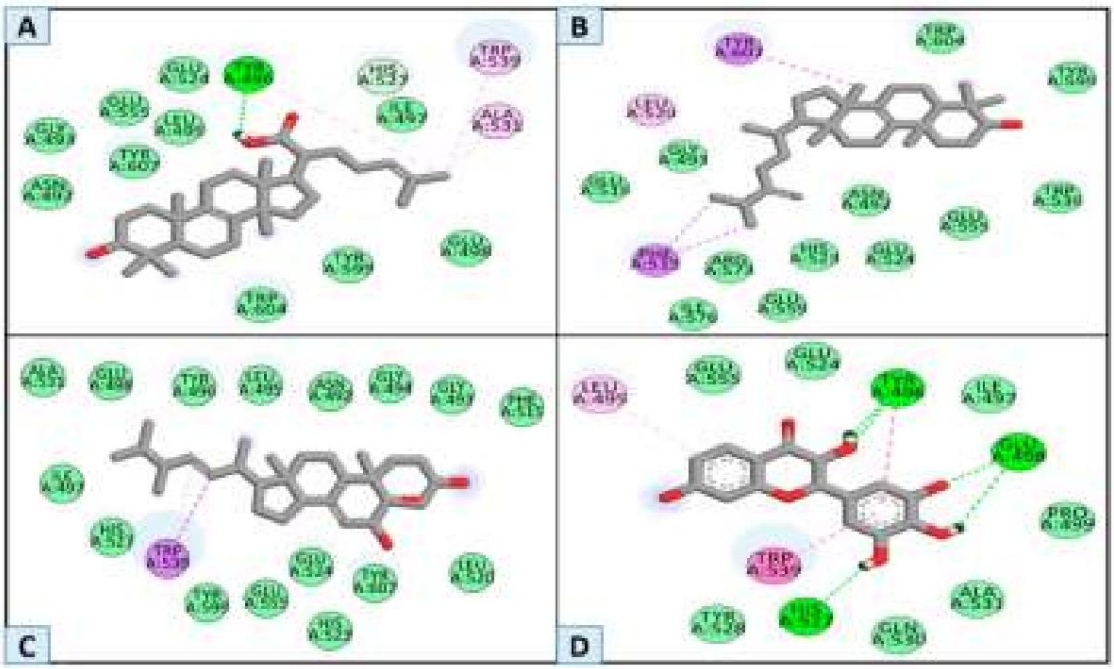


Abbildung 4. Die zweidimensionale (2D) Interaktion zwischen dem Zielenzym Kollagenase und den Liganden MSID000001 (A), MSID000002 (B), MSID000003 (C) und Kontrolle (D).

Machine Translated by Google

Tabelle 2. Die Tabelle zeigt das Aminosäure-Interaktionsprofil von Hit-Verbindungen und Kontrollmolekülen mit dem Zielenzym.

Verbindungen	H-Brücken	Van der Waals	Pi–Alkyl	Alkyl	Kohlenstoff-Wasserstoff Bindung	Pi-Sigma	Pi–Pi gestapelt und Pi–Pi T-Form
MSID000001	Tyr496	Glu498, Tyr599, Trp604, Ile497, Glu524, Leu495, Glu555,Gly493, Asn492	Trp530	Ala531	Seine527	-	-
MSID000002	-	Ile576, Glu559, Arg573. His523, Glu524, Asn 492, Glu555, Trp539, Tyr599, Trp604, Glu519, Gly 493	-	Leu520	-	Phe515, Tyr607	-
MSID000003	-	Leu520, Tyr607, Glu524, Tyr599, His527, Ile497, Ala531, Glu498, Tyr496, Leu495, Asn492, Gly494, Phe515	-	-	-	Trp539	
Kontrolle	Seine527, Glu498, Tyr496	Pro499, Ala531, Gln530,Tyr528, Glu555, Ile497,Glu524	Leu495	-	-	-	Trp539, Leu495

3.3. Dichtefunktionaltheorie (DFT)

Tabelle 3 bietet eine umfassende Analyse, die verschiedene Merkmale umfasst, wie Optimierungsenergien in atomaren Einheiten, Dipolmomente in Debye, Polarisierbarkeit (ÿ) **gemessen in atomaren Einheiten, sowie HOMO/LUMO-Energien und deren relative Energielücke, gemessen in Elektronenvolt (eV). Diese Eigenschaften werden für die Verbindungen untersucht. Die Bandbreite der Hartree-Optimierungsenergien reicht von au ÿ1105.73 (Kontrolle) bis—au1398.26 (MSID000001), zeigt die unterschiedlichen Ebenen von Stabilität unter den untersuchten Strukturen. Die Verbindung mit der stabilsten Die Konformation ist MSID000001, die einen hohen negativen Energiewert von au ÿ1398,26 aufweist. Es folgt MSID000003 mit einem Wert von au ÿ1320,80, dann MSID000002 mit einem Wert von au ÿ1288,26. Die Kontrolle hat die am wenigsten stabile Konformation mit einem Wert von au ÿ1105,73.**

Tabelle 3. Optimierungsenergien, HOMO- und LUMO-Energien und deren Lücke berechnet im Gas Phase auf B3LYP/6–311+G(d, p)-Niveau der DFT-Rechnungen.

Ligandencode	Optimierung Energie (au)	Dipol Moment (Tschüss)	Polarisierbarkeit (ÿ) (au)	EH (eV)	EL (eV)	Z.B (eV)
Kontrolle	ÿ1105,73	6.10	207,35	ÿ6,45	ÿ1,86	4,59
MSID000001	ÿ1398,26	3.08	347,85	ÿ6,13	ÿ0,43	5.71
MSID000002	ÿ1288,26	1,80	352,91	ÿ6,01	ÿ0,21	5.81
MSID000003	ÿ1320,80	2.30	338,32	ÿ6,53	ÿ0,51	6.02

Abbildung 5 zeigt die optimalen Strukturen der untersuchten Verbindungen und stellt ihre chemische Topologie und räumliche Anordnung visuell dar. Alle

Machine Translated by Google

die untersuchten Verbindungen zeigten eine stabile Konformation als echte lokale Minima, wie die gemessenen positiven Imaginärfrequenzen zeigen. MSID000001 weist ein signifikantes Dipolmoment auf, was auf ein starkes elektrostatisches Potenzial hindeutet, das seine Bindungsaffinität mit dem gewählten Zielprotein beeinflussen könnte. Die gemessenen Polarisierbarkeitswerte lagen im Bereich von 207,35 (Kontrolle) über 347,85 (MSID000001) bis 352,91 (MSID000002) und 338,32 (MSID000003) atomaren Einheiten (au). Dies deutet auf ein Spektrum molekularer Reaktivität unter den getesteten Chemikalien hin. Die nukleophilen und elektrophilen Eigenschaften korrelieren mit den Energiewerten von HOMO und LUMO. Das Molekül MSID000002 besitzt aufgrund seines hohen HOMO-Energiewerts von eV **-6,01** eine **signifikante Elektronenspendeigenschaft . Die LUMO-Dichtewolke ist eine leere Wolke, die eine Elektronen aufnehmende Eigenschaft aufweist. Die Chemikalie MSID000001 weist eine niedrige Energielücke von eV 5,71 auf, die höher ist als der** tt Kontrollwert von eV 4,59. Dies deutet darauf hin, dass MSID000001 im Vergleich **zu den anderen untersuchten Verbindungen eine höhere Reaktivität aufweist .**

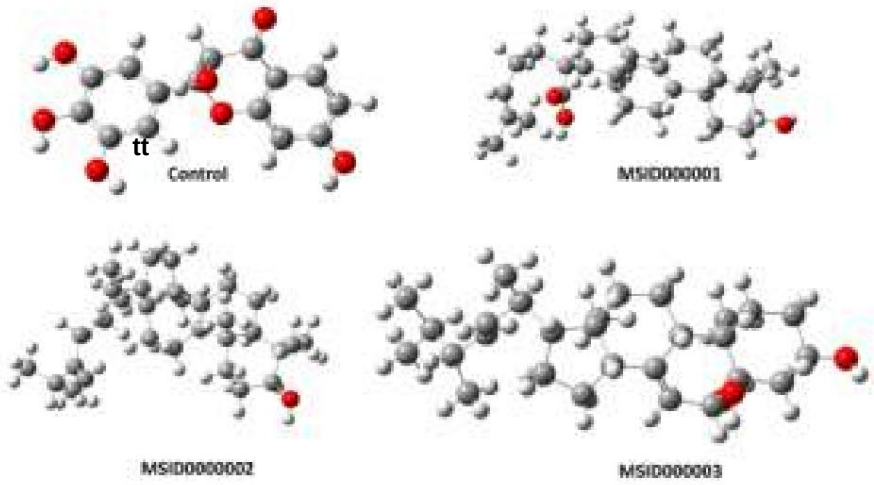


Abbildung 5. Optimierte Strukturen der untersuchten Verbindungen auf dem B3LYP/6–311+G(d, p)-Niveau der DFT- Analyse in der Gasphase.

Abbildung 6 zeigt die Konturkarten der HOMO-LUMO-Orbitale zusammen mit ihren entsprechenden Energielückenwerten. Die HOMO/LUMO-Energiewerte wurden verwendet, um die globalen Reaktivitätsdeskriptoren zu erstellen, die als wichtige Instrumente zum Verständnis der Arzneimitteleigenschaften und ihrer potenziellen Wechselwirkungen mit biologischen Zielen dienten. Die Verbindung MSID000003 wies ein hohes Ionisierungspotential (I = 6,53) auf und übertraf damit die Kontrolle (6,45), MSID000001 (6,13) und MSID000002 (6,01). Dies weist darauf hin, dass MSID000003 im Vergleich zu den anderen **untersuchten Verbindungen eine bemerkenswerte Kapazität zur Elektronenabgabe besitzt**

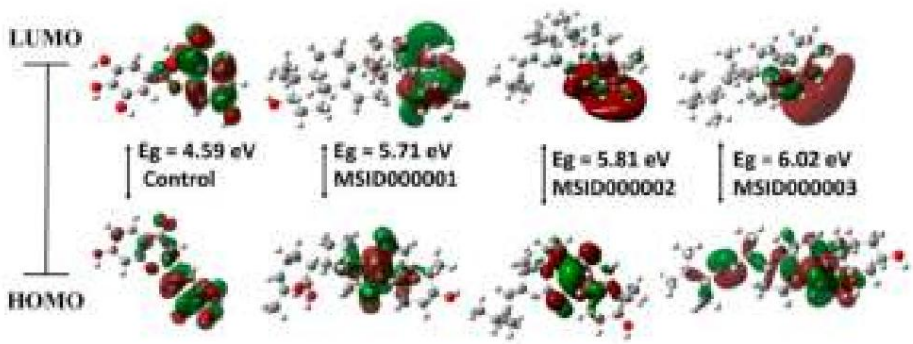


Abbildung 6. Die Konturdiagramme der HOMOs und LUMOs der untersuchten Verbindungen.

Im Gegensatz dazu hatte die Verbindung MSID000002 einen niedrigen Elektronenaffinitätswert (A = 0,21), was darauf hindeutet, dass sie von allen Verbindungen die geringste Kapazität zur Aufnahme von Elektronen h

Machine Translated by Google

Die Härte- und Weichheitswerte liegen zwischen 1,37 und 2,80 bzw. 0,68 und 1,40 und waren berechnet für die untersuchten Verbindungen. Das Molekül MSID000002 weist eine hohes Maß an Reaktivität, wie aus seinem erhöhten Weichheitswert (S = 1,40) ersichtlich ist. Die Elektrophilie Der Wert (ÿ) lag zwischen 11,76 (Kontrolle) und 17,08 (MSID000003), was auf ihre Fähigkeit hinweist, mit nukleophilen Gerüsten biologischer Zielmoleküle interagieren. Die Reaktivitätsdeskriptoren der Die untersuchten Stoffe sind in Tabelle 4 aufgeführt.

Tabelle 4. Globale Reaktivitätsdeskriptoren der Zielverbindungen.

Ligandencode	Chemisch Potenzial μ (eV)	Elektronegativität ÿ (eV)	Härte ÿ (eV)	Weichheit S (eV)	Elektrophilie ÿ (eV)	Ionisation Potenzial (ICH)	Elektron Affinität (A)
Kontrolle	4.15	ÿ4,15	1,37	0,68	11,76	6.45	1,86
MSID000001	3.28	ÿ3,28	2,64	1.32	14.20	6.13	0,43
MSID000002	3.11	ÿ3,11	2,80	1,40	13.53	6.01	0,21
MSID000003	3.52	ÿ3,52	2,75	1,38	17.08	6,53	0,51

Molekulare elektrostatische Potentialkarten sind wichtige Werkzeuge zur Visualisierung der Ladung Verteilungsmuster der untersuchten Moleküle. Im Kontext von MEP, wie in Abbildung 7: Die roten Bereiche zeigen Orte an, die eine höhere Affinität zu elektronenreichen Zentren aufweisen. Diese Regionen gelten als anfällig für elektrophile Angriffe. Umgekehrt sind die blauen Punkte zeigen Bereiche an, in denen Moleküle eine höhere Affinität zu elektronenarmen Zentren haben, die nukleophile Angriffe erleichtert. Die elektrophilen und nukleophilen Bereiche eines Molekül spielen eine entscheidende Rolle bei der Bildung polarer Kontakte mit spezifischen Aminosäureresten. gelblich-grüne Teile zeigten den neutralen Aspekt der untersuchten Chemikalien, was darauf hinweist ihre potenziellen Van-der-Waals-Wechselwirkungen mit dem Zielprotein.

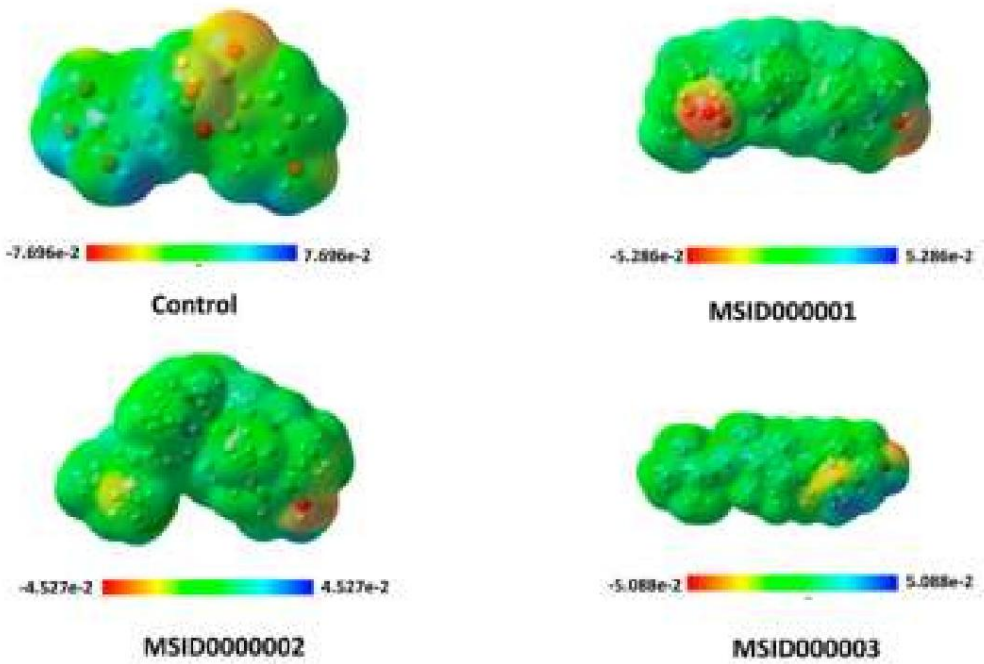


Abbildung 7. Karten des molekularen elektrostatischen Potenzials (MEP) für die untersuchten Verbindungen.

Abbildung 7 zeigt die molekularen elektrostatischen Potentialkarten der Substanzen unter Untersuchung. Das Vorhandensein von negativem Ladungspotential, angezeigt durch rote Flecken auf Sauerstoffatome in den analysierten Strukturen, lässt vermuten, dass diese Stellen anfällig sind für elektrophile Angriffe. Diese Stellen können potentiell als Orte für polare Wechselwirkungen fungieren mit wichtigen Aminosäureresten, da sie in der Lage sind, Wasserstoffbrücken einzugehen.

Machine Translated by Google

3.4. Absorptions-, Verteilungs-, Metabolismus-, Ausscheidungs- und Toxizitätsprofilierung (ADMET)

Die physikochemischen Eigenschaften der ausgewählten Verbindungen wurden ebenfalls ausgewertet. Die chemische Formel der Verbindung, das Molekulargewicht, die Anzahl aromatischer Schweratome, der Csp3-Anteil, die physikochemischen Eigenschaften der Brechung, TPSA und die Anzahl der H-Brücken- Donoren und -Akzeptoren wurden analysiert. Darüber hinaus wurden Pharmakokinetik, Wasserlöslichkeitsstudien und Lipophilie der Verbindungen ausgewertet. Die GI-Absorption, das P-gp- Substrat, die BBB-Permeanz, die medizinalchemischen Eigenschaften und die Arzneimittelähnlichkeit der identifizierten Verbindungen wurden als nächstes in der pharmakokinetischen Profilanalyse untersucht. Die Tabellen S1–S4 enthalten all diese Informationen. Die Verbindungen wurden als arzneimittelähnliche Moleküle identifiziert, da sie geeignete physikochemischen Eigenschaften aufweisen. Es wurde auch festgestellt, dass die Verbindungen einen akzeptablen Bereich der Pharmakokinetik, GI-Absorption und oralen Bioverfügbarkeit aufwiesen. Die Verbindungen haben einen hohen synthetischen Zugänglichkeitswert, was ihre Synthese einfach macht. El

3.5. Molekulardynamische Simulation

Mit der „AMBER20-Software“ wurden die oben angedockten Komplexe und das Kontrollmolekül einer 500 ns MD-Simulation unterzogen. Die Simulationsbahnen generierten Daten für (i) die mittlere quadratische Abweichung (RMSD), (ii) die mittlere quadratische Fluktuation (RMSF), (iii) den Trägheitsradius (RoG), (iv) die Beta-Faktorenanalyse und (v) die für Lösungsmittel zugängliche Oberfläche (SAS

Die Stabilität des Protein-Liganden-Komplexes während des Simulationszeitraums kann anhand des RMSD-Werts beobachtet werden. Steigt der RMSD stetig an, deutet dies auf eine strukturelle Abweichung hin; wenn er ein Plateau erreicht, stellt er ein Gleichgewicht dar [55]. Die drei Leitkomplexe MSID000001, MSID000002 und MSID000003 zeigten zusammen mit dem Kontrollmolekül während des gesamten Simulationszeitraums Stabilität ohne größere Abweichungen und es wurden Veränderungen in den Ligandenbindungspositionen mit einem durchschnittlichen RMSD von 1,96 Å, 2,01 Å, 1,59 Å und 1,60 Å beobachtet, während die Maximalwerte 2,76 Å, 3,07 Å, 2,31 Å bzw. 2,27 Å betrugen (Abbildung 8A). Die Flexibilität der Aminosäurereste im Protein-Liganden-Komplex kann anhand der RMSF-Analyse (Abbildung 8B) gesehen werden. In der RMSF-Grafik kennzeichnen Täler starre Bereiche, während Spitzen Bereiche mit größerer Flexibilität anzeigen [56]. Die RMSF-Analyse zeigte zu Beginn des Simulationszeitraums erhebliche Schwankungen; nach 200 ns kann jedoch eine Stabilisierung auftreten. Die angezeigten RMSF-Minimalwerte waren 0,95 Å, 0,88 Å, 0,87 Å und 0,82 Å und die Maximalwerte lagen bei 3,28 Å, 4,41 Å, 5,44 Å bzw. 3,74 Å. Die niedrigsten Werte für die drei obersten Komplexe und die Kontrolle waren 0,44 Å, 0,40 Å, 0,44 Å und 0,38 Å nacheinander für MSID000001, MSID000002, MSID000003 und Kontrolle. Während der Simulation wird die Rigidität der Protein-Ligand-Kombination durch die Analyse des Trägheitsradius (RoG) bewertet. Wenn der RoG zunimmt, deutet dies auf Entwindung oder Ausdehnung hin; wenn er abnimmt, deutet dies auf Kompaktheit und Rigidität hin [38]. In Übereinstimmung mit der Bildung eines stabilen Protein-Ligand-Komplexes deuten unsere Simulationsergebnisse darauf hin, dass jeder Komplex während der Simulationszeiträume starr und kompakt blieb, was auf eine Stabilisierung und Kompaktierung der Komplexe hindeutet (Abbildung 8C). Die beobachteten Durchschnittswerte waren 21,88 Å, 21,77 Å, 21,65 Å und 21,68 Å MSID000001, MSID000002, MSID000003, während die Maximalwerte 22,19 Å, 22,16 Å, 22,04 Å und 22,03 Å und die Minimalwerte 21,45 Å, 21,43 Å, 21,31 Å und 21,35 Å betrugen. war Niedrige RoG-Werte deuten auf eine kompakte Struktur hin, während ein Anstieg auf Ausdehnung und Faltung

hinweist. Die ÿ-Faktoren-Analyse liefert Erkenntnisse über die Flexibilität und Mobilität einzelner Atome innerhalb des Protein-Liganden-Komplexes [57]. Die Beta-Faktor-Ergebnisse zeigen, dass die Mittelwerte für die drei oberen Komplexe und die Kontrolle 29,55 Å, 27,96 Å, 26,06 Å bzw. 22,17 Å betragen. Ihre Maximalwerte betrugen in ähnlicher Weise 283,7 Å, 513,97 Å, 780,8 Å und 370,05 Å. Darüber hinaus betrugen ihre niedrigsten Werte 5,12 Å, 4,39 Å, 5,28 Å und 3,92 Å für MSID000001, MSID000002 und MSID000003. Schließen Sie die Ligandenbindungsposition mit Werten zwischen 22 und 29, was eine bessere Flexibilität bei den an der Ligandenbindung und -interaktion beteiligten Resten widerspiegelt (Abbildung 8D).

Machine Translated by Google

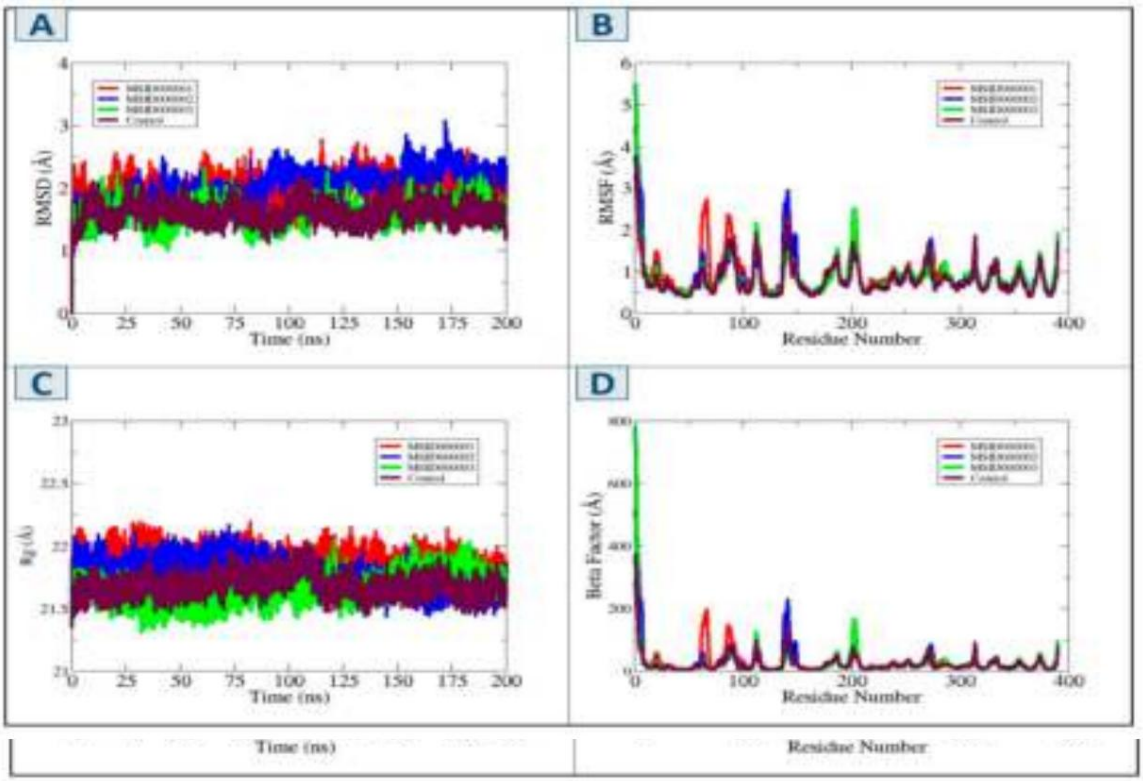


Abbildung 8. Die Komplexe MSID000001, MSID000002 und MSID000003 und Kontrollmoleküle steuern Flexibilität, Kompaktheit und Stabilität durch (A) RMSD, (B) RMSF, (C) RoG und (D) ÿ-Faktoren.

3.6. Lösungsmittelzugängliche Oberfläche (SASA)

An den oberen Komplexen wurde eine Analyse der lösungsmittelzugänglichen Oberfläche (SASA) durchgeführt, um die Wechselwirkung zwischen den Lösungsmittelmolekülen auf der Oberfläche des Zielproteins herauszufinden . Es wurden die Durchschnittswerte für MSID000001 (1722,1 nm²), MSID000002 (16.649,3 nm²), MSID000003 (16.502 nm²) und Kontrolle (16.625 nm²) ermittelt, während die Maximalwerte (18.620,3 nm²), (17.906,5 nm²), (18.158,8 nm²) und die Kontrolle (18.013,1 nm²) betrugen. Umgekehrt waren die niedrigsten beobachteten Werte MSID000001 (14.723,8 nm2), MSID000002 (14.772,3 nm2), MSID000003 (1446,2 nm2) und die Kontrolle (14.633,3 nm2). Die Diagramme zeigen, dass nach der Ligandenbindung keine größeren Abweichungen festgestellt wurden, wie in der folgenden Abbildung **9 d**

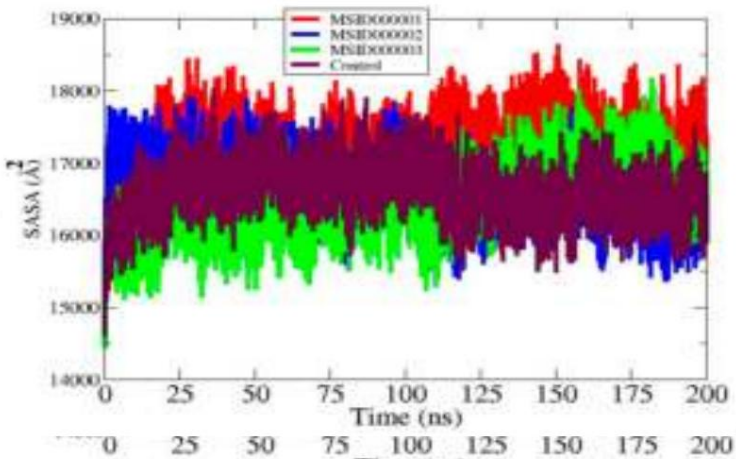


Abbildung 9. Einblicke in die drei wichtigsten Komplexe und Kontrolle mit dem Zielenzym Kollagenase.

3.7. Wasserstoffbrückenanalyse

Es war wichtig, die wichtige Rolle von Wasserstoffbrücken bei der Aufrechterhaltung von Komplexen zwischen Liganden und angedockten Rezeptoren hervorzuheben. Die Identifizierung der Enzymrest

Machine Translated by Google

gebildeten Wasserstoffbrücken mit den Verbindungen war besonders wichtig. Wie gezeigt In Tabelle 5 wird das Wasserstoffatom, das die Bindung bildet, als „Donor“ bezeichnet, während das negativ geladenes Atom, das die Bindung eingeht, wird als „Akzeptor“ bezeichnet. Der Prozentsatz der Simulationszeit, in der die Wasserstoffbrücke existiert, kann in der „Belegung“ gesehen werden Die Wasserstoffbrücken, die das Enzym des Rezeptors mit den drei oberen Liganden bildet, Moleküle sind in der Tabelle aufgeführt.

Tabelle 5. Die zwischen Liganden und dem aktiven Zentrum von Clostridium histolyticum **gebildeten Wasserstoffbrücken Kollagenase.**

MSID000001		
Spender	**Akzeptor**	**Belegung**
HIE128-Seite	**LIG391-Haupt**	**0,30 %**
HIE128-Seite	**LIG391-Haupt**	**0,10 %**
LIG391-Seite	**GLU156-Seite**	**0,10 %**
MSID000002		
LIG391-Haupt	**ASP184-Seite**	**29,80 %**
MSID000003		
LIG391-Haupt	**TYR208-Seite**	**1–10 %**
LIG391-Seite	**GLU156-Seite**	**5,40 %**
LIG391-Haupt	**TYR200-Seite**	**0,30 %**
LIG391-Haupt	**GLU156-Seite**	**0,10 %**
LIG391-Seite	**TYR208-Seite**	**1,50 %**
TYR208-Seite	**LIG391-Seite**	**0,10 %**
LIG391-Seite	**TYR200-Seite**	**0,10 %**
Kontrolle		
LIG391-Seite	**GLU125-Seite**	**70,00 %**
LIG391-Seite	**GLU99-Seite**	**2,90 %**

3.8. Hauptkomponentenanalyse (PCA)

Multivariate statistische Methoden wie PCA werden eingesetzt, um besser zu verstehen, Komplexität des riesigen Datensatzes. Es transformiert die gemessenen Variablen in Hauptkomponenten (PCs), die unabhängige Variablen darstellen [58]. Jeder PC ist komplementär, d. h. sie sind orthogonal zueinander. PC1 stellt die höchste Variabilität des Datensatzes dar, anschließend gefolgt von PCs (PC2, PC3 usw.) [59]. PCA wurde durchgeführt und visualisiert, um zu identifizieren Die auffälligsten Strukturveränderungen innerhalb der vorgeschlagenen Protein-Liganden-Komplexe zeigten sich während der Bindung aneinander [60]. Hauptkomponentenanalyse (PCA) wurde eingesetzt, um Daten über die Konformationsphasen und den Aufbau des Zielenzyms zu erhalten. mit den Liganden und dem Kontrollmolekül unter Verwendung der 100 ns Moleküldynamik (MD) Simulationstrajektorien.

Den Ergebnissen der Studie zufolge ist die Mehrzahl der untersuchten Verbindungen sind physiologisch aktive Moleküle, die mit nukleären Rezeptorliganden und anderen Enzyme, die physiologische Aktivitäten durch Hemmung des Kollagenase-Enzyms induzieren. Nach der Analyse dieser Graphen ist es offensichtlich, dass die Eigenwertverteilungen der gezeigten Kor in Abbildung 10 unterscheiden sich voneinander. Insbesondere zeigen die Eigenwerte des Kontrollkomplexes (D) eine viel breitere Streuung, gefolgt von MSID000003, als die von MSID000001 (A) und dem MSID000002 (B)-Komplex. Dies deutet darauf hin, dass es mehr Variabilität in der Konformationszustände der Wechselwirkungen mit der Clostridium histolyticum **Kollagenase Enzym in Kontrolle (D). Diese Variabilität impliziert, dass die strukturelle Dynamik und das Potenzial**

Machine Translated by Google

Im Endeffekt variieren die funktionellen Auswirkungen der Enzyminteraktionen zwischen diesen Komplexen erheblich.

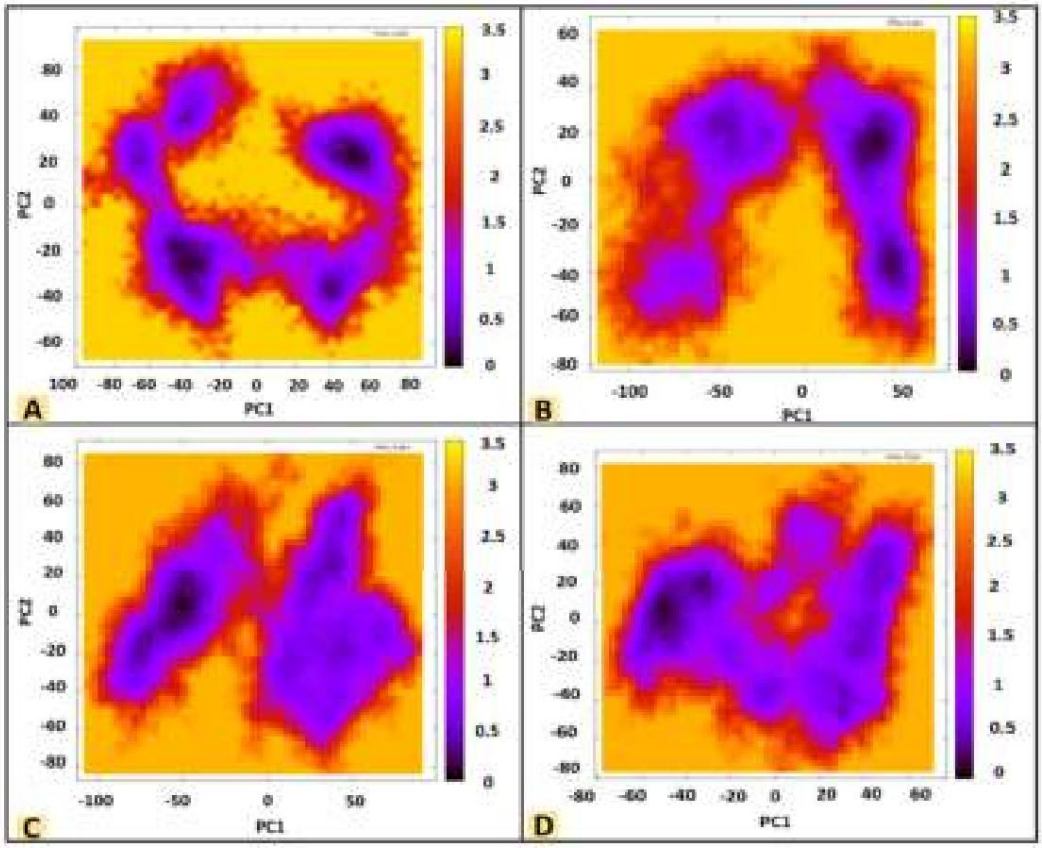


Abbildung 10. Die Hauptkomponentenanalyse von MSID000001 (A), MSID000002 (B), MSID000003 (C) und Kontrolle (D).

3.9. Sekundärstrukturanalyse

Die Gesamtstruktur des Protein-Enzym-Komplexes während der Analyse besteht aus sekundären Strukturelementen, einschließlich Alpha-Helices und Beta-Faltblättern, die für die Stabilität des Komplexes sorgen und die aktiven Stellen enthalten, die für die enzymatische Aktivität erforderlich sind [61]. Die Sekundärstrukturanalyse wurde durchgeführt, um die strukturellen Grundlagen der Funktion der Kollagenase von C. histolyticum zu verstehen und zu untersuchen . **Innerhalb der Enzymkomponente sind enge Windungen und Schleifen zu erkennen , die bei der Bindung von Substraten und dem katalytischen Umsatz helfen. Die Anzahl der während des Simulationszeitraums gebildeten** ÿ- Faltblätter und Alpha-Helix wurde berechnet und in **Abbildung S1 dargestellt. Bei der Analyse wurden verschiedene sekundäre Strukturelemente gezeigt, wie z. B. T für Windungen und Schleifen in der Struktur, E für ÿ-Stränge, B für isolierte H- ÿ- bindende** ÿ- **Brücke zwischen** ÿ- **Strängen, H zeigt** ÿ **-Helix im SS-Motiv, wo das Proteinrückgrat eine helikale Struktur ermöglicht, G stellt eine Art helikale Sec-Struktur dar, Pi–Pi weist auf eine seltene Form der helikalen Struktur hin und C zeigt Spulen in der Proteinstruktur. Wie in Abbildung S1 gezeigt, wo die Sekundärstruktur von MSID000001, MSID00000**

3.10. MMPBSA/GSA-Berechnungen

Mithilfe der Module MM-GBSA und MM-PBSA von AMBER22 wurden die Bindungsfreien Energien für die angedockten Komplexe MSID000001, MSID000002, MSID000003 und Control geschätzt (Tabelle 6). Für den angedockten Komplex MSID000001 berechnete das MM-GBSA eine Gesamtenergie von ÿ78,58 kcal/mol, für den angedockten Komplex MSID000002 ÿ70,44 kcal/mol und für den angedockten Komplex MSID000003 ÿ59,32 kcal/mol. Wie in Tabelle **3 gezeigt , betrug die berechnete Netto-Freie-Energie für Komplexe in den MM-PBSA-Ergebnissen ÿ79,54**

Machine Translated by Google

und ÿ62,22 kcal/mol. Es wird erwartet, dass die Komplexe starke
und stabile intermolekulare Wechselwirkungen basierend auf den niedrigen Nettobindungsenergiewerten.

Tabelle 6. MMGBSA- und MMPBSA-Analyse der drei oberen Komplexe zusammen mit dem Kontrollmolekül.

Energieparameter	MSID000001	MSID000002	MSID000003	Kontrolle
		MMGBSA		
Van-der-Waals-Energie	ÿ65,14	ÿ61,23	ÿ55,91	ÿ60,99
Energie elektrostatisch	ÿ24.01	ÿ20,81	ÿ15,49	ÿ17,67
Gesamte Gasphasenenergie	ÿ89,15	ÿ82,04	ÿ71,4	ÿ78,66
Gesamte Erlösungsenergie	10,57	11,60	12.08	10.46
Nettoenergie	ÿ78,58	ÿ70,44	ÿ59,32	ÿ68,2
		MMPBSA		
Van-der-Waals-Energie	ÿ65,14	ÿ61,23	ÿ55,91	ÿ60,99
Energie Elektrostatik	ÿ24.01	ÿ20,81	ÿ15,49	ÿ17,67
Gesamte Gasphasenenergie	ÿ89,15	ÿ82,04	ÿ71,4	ÿ78,66
Totale Energieeinsparung	9,61	8.05	9.14	8.00
Nettoenergie	ÿ79,54	ÿ73,99	ÿ62,26	ÿ70,66

3.11. Schätzung des WaterSwap-Energieverbrauchs

Die WaterSwap-Energieschätzung im computergestützten Arzneimitteldesign wird durchgeführt, um
Einblicke in die Wechselwirkung von Wassermolekülen mit Zielproteinen und Medikamenten [49]. Durch
Durch die Untersuchung dieser Wechselwirkungen können wir bessere Medikamente herstellen, die stärker
und spezifischer an ihre Zielmoleküle binden und so ihre Wirksamkeit verbessern [62]. Um die GBSA/MMPB-Studie zu rev
Schätzungen zufolge wurde die freie Bindungsenergie für jeden angedockten Komplex berechnet mit
die WaterSwap-Technik. Abbildung 11 zeigt die vorhergesagte WaterSwap-Bindungsenergie
aus mehreren Schritten. Drei verschiedene Ansätze wurden verwendet, insbesondere Bennetts,
thermodynamische Integration (TI) und freie Energiestörung (FEP). Die Leitverbindungen
MSID000001, MSID000002 und MSID000003 sowie die Kontrolle sind stabil in Bindungsenergien
und scheinen vielversprechende Wirkstoffkandidaten zu sein. Die Bennett-, TI- und FEP-bindende freie Energie
Die Werte für jeden Komplex sind in Abbildung 11 unten aufgeführt.

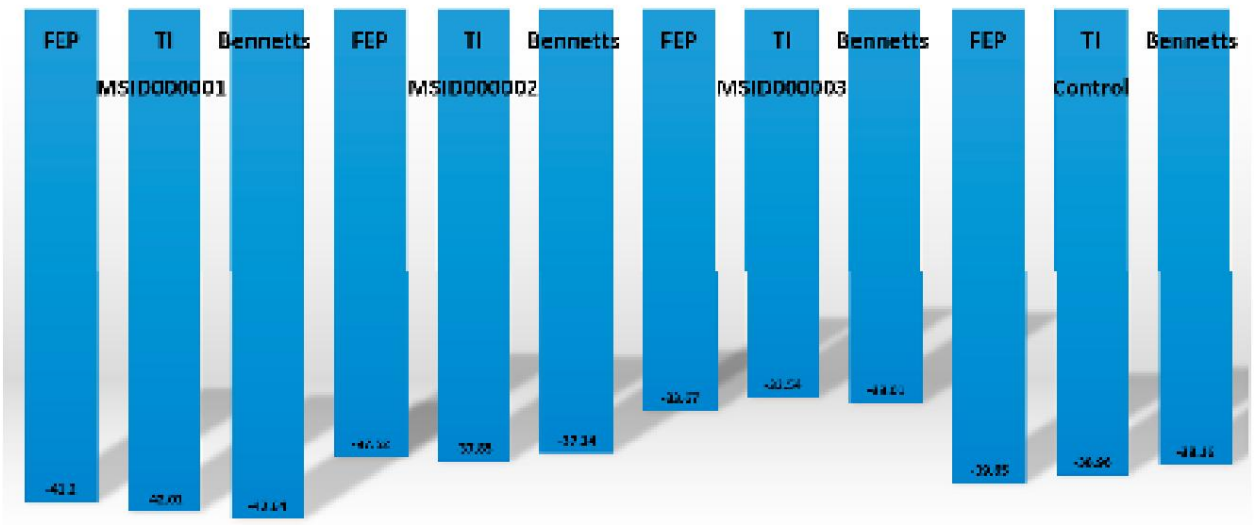


Abbildung 11. Vorausgesagte WaterSwap-Bindungsenergie für MSID000001, MSID000002 und MSID000003,
und Kontrolle.

Machine Translated by Google

3.12. Schätzung der Entropieenergie

Energieberechnungen werden durchgeführt, um die Stabilität von Ligand-Zielkomplexen zu bewerten und Bindungsaffinität bei der Entwicklung von Medikamenten und liefert Details über die strukturellen Eigenschaften, Stabilität und Bindungsaffinität [63]. Um Einblicke in die Nettobindungsenergie zu erhalten, Der Beitrag der Entropieenergie wurde mit AMBER22 berechnet. Der Beitrag der Entropieenergie der drei Topkomplexe und der Kontrolle ist in der Tabelle (Tabelle 7) aufgeführt ur von ÿ5,96 kcal/mol, ÿ2,85 kcal/mol, ÿ1,36 kcal/mol und ÿ2,60 kcal/mol für MSID000001, MSID000002 und MSID000003 bzw. die Steuerung.

Tabelle 7. Die Entropieenergieberechnungen der drei oberen Komplexe sowie des Kontrollmoleküls.

Komplex	Translational	Schwingungs	Rotations	ÿS Gesamt
MSID000001	5.01	7,86	1147.09	ÿ5,96
MSID000002	10,85	12,66	1269,48	ÿ2,85
MSID000003	15,96	13.05	1566.12	ÿ1,36
Kontrolle	10.53	12.04	1428,64	ÿ2,60

3.13. Salzbrücken-Studien

Die stärkste nicht-kovalente Wechselwirkung in der Natur ist die sogenannte Salzbrücke. die an der molekularen Erkennung, Protein-Protein-Interaktionen und Protein Faltung [64]. Zwei Arten von Aminosäureseitenketten sind an der Wechselwirkung von Salzbrücken beteiligt, Glu oder Glu, wenn der Ligand positiv geladen ist, während negativ geladene Aminosäureketten sind Arg oder Lys [65] (Tabelle 8). Bei dieser Technik wird die elektrostatische Wechselwirkung zwischen entgegengesetzt geladene Ionen wurden in der Andockregion von MSID000001, MSID000002 beobachtet, MSID000003 und Control. (Siehe Abbildung S2).

Tabelle 8. Salt Bridge-Interaktion zwischen MSID000001, MSID000002, MSID000003 und Control mit Das Zielenzym ist der nachfolgenden Tabelle zu entnehmen.

Komplexe	Wechselwirkung zwischen Salzbrücken
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, Glu-Arg44
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
Kontrolle	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

Es gab signifikante Unterschiede in der Verteilung der beteiligten geladenen Reste beim Vergleich der Salzbrücken der Hit-Verbindungen mit denen der Kontrollverbindungen. Bei der Bildung von Salzbrücken zeigte die Kontrollgruppe eine erhöhte Anzahl von positiv

Machine Translated by Google

geladene Reste wie Arginin (Arg) und Lysin (Lys). Im Gegensatz dazu sind Aspartat (Asp) und Glutamat (Glu) Beispiele für negativ geladene Reste, die hauptsächlich an Salzbrückeninteraktionen in den Hit-Verbindungen beteiligt sind. Die Variation deutet darauf hin, dass die Kontrolle hauptsächlich positiv geladene Reste enthält, die Hit-Verbindungen jedoch größtenteils Salzbrücken mit negativ geladenen Resten bilden. Die Unterschiede in der Restbeteiligung erhöhen die Möglichkeit, dass die Bindungsaffinitäten und -spezifitäten der Hit-Verbindungen von denen der Kontrolle abweichen, was die Stabilität und die Gesamtbindungseffizienz an das Zielprotein verbessern könnte.

4. Diskussion

Experimentelle Studien, die darauf abzielen, die molekularen Grundlagen einer Krankheit auf struktureller Ebene zu verstehen, sind üblicherweise zeit- und arbeitsaufwendig. Da die experimentellen Techniken zahlreiche Nachteile und Einschränkungen aufweisen, besteht ein Markt für In-silico-Ansätze , die potenzielle Inhibitoren effizienter und präziser identifizieren können [38].

Durch die Kombination mehrerer sequenz- und strukturbasierter Vorhersageansätze, die aus mehreren Algorithmen bestehen, entsteht ein effektives Werkzeug, das präzise und genaue Vorhersagen liefert **[66].**

Das von Clostridium histolyticum **produzierte Hauptenzym Kollagenase** erfährt **aufgrund seiner Schlüsselrolle beim Abbau von Gewebe und der Wundheilung große** Aufmerksamkeit als vielversprechendes Ziel für medikamentöse Eingriffe **[67]. Das in der extrazellulären Matrix oder äußeren Schicht des Bindegewebes am häufigsten vorkommende Protein** Kollagen wird durch das von Clostridium histolyticum **produzierte Hauptenzym Kollagenase abgebaut [10]. Die zugrundeliegenden Ursachen bestimmter Erkrankungen wie der Dupuytren-Kontraktur, der Peyronie-Krankheit sowie die Wundheilung und der Gewebeumbau werden alle erheblich von der Aktivität des Enzyms beeinflusst [68].**
Das gezielte Angreifen der wichtigsten Kollagenaseenzyme über spezifische Inhibitoren hat erhebliches Potenzial, den Gewebeabbau zu regulieren, Wundheilungsmechanismen zu verändern und möglicherweise Symptome im Zusammenhang mit Erkrankungen, die Kollagen betreffen, zu lindern [69]. Die Entwicklung von Medikamenten, die **das wichtigste Kollagenaseenzym von** Clostridium histolyticum **effizient** angreifen , **ist daher nicht mit Hindernissen verbunden. Die Selektion gegenüber Wirtsenzymen muss aufrechterhalten und Nebenwirkungen müssen auf ein Minimum beschränkt werden [70].**

Unter Verwendung rechnergestützter Verfahren wurde eine umfassende In-silico-Studie durchgeführt, um potenzielle Inhibitoren gegen Clostridium histolyticum **mit dem Hauptenzym Kollagenase** zu identifizieren .
Unter Einsatz molekularer Dockingmodellierung führten wir ein Screening der MeFSAT-Bibliothek „Medicinal Fungi Secondary Metabolites And Therapeutics“ mit 1800 Verbindungen durch und identifizierten drei Leitverbindungen. MSID000001, MSID000002, MSID000003 zeigten vielversprechende Bindungswerte von ÿ10,7 kcal/mol, ÿ9,8 kcal/mol bzw. ÿ9,5 kcal/mol , während die Kontrollgruppe einen Bindungswert von ÿ8 kcal/mol an das aktive Zentrum des Enzyms aufwies. Bindungsmodus und Wechselwirkungen änderten sich während der simulierten Zeit nicht erkennbar. Diese Verbindungen erfüllten die erforderlichen Kriterien, um als arzneimittelähnlich zu gelten und wiesen zudem gute pharmakokinetische Eigenschaften auf. Darüber hinaus wurden MD-Simulationen eingesetzt, um die Dynamik und Stabilität der Protein-Liganden-Komplexe während des Simulationszeitraums darzustellen. Mithilfe der Trajektoriendatenanalyse wurden gute Bindungskonformationen und strukturelle Veränderungen im aktiven Zentrum der Collagenase bei der Ligandenbindung identifiziert.
Des Weiteren wurde die Dynamik der Enzym-Liganden-Systeme mittels Hauptkomponentenanalyse (PCA) untersucht, die Einblicke in die durch die Inhibitorbindung verursachten Konformationsänderungen bot. Zudem verdeutlichte die Forschung die Wirkung der Inhibitorinteraktion auf die sekundären Strukturelemente der Kollagenasen sowie die Rolle von Salzbrücken bei der Aufrechterhaltung der Stabilität von Enzym-Liganden-Komplexen. Die Kenntnis der genannten Daten ist erforderlich, um den Wirkungsmechanismus zu verstehen **und die Entwicklung von Leitsubstanzen für mehr Spezifität und Wirksamkeit zu optimieren .** In Anbetracht ihres Potenzials als neuartige Medikamente **bieten diese Substanzen weitere experimentelle Forschungsmöglichkeiten, um festzustellen, wie wirksam sie gegen** Clostridium histolyticum wirken. **Alles in allem deuten diese Erkenntnisse darauf hin, dass das Protein strukturell unverändert blieb, während die ausgewählten Liganden gefunden wurden, obwohl keine offensichtlichen Konformationsänderungen auftraten.**

Machine Translated by Google

Unsere Ergebnisse stimmen mit früheren Studien überein, in denen Inhibitoren gegen Kollagenasen von Clostridium histolyticum untersucht wurden. **[71] berichtete über eine Studie zur Entwicklung einer virtuellen Screening- Technik, die ligandenbasierte und strukturbasierte Methoden zur Arzneimittelentdeckung integrierte, um potenzielle Inhibitoren der bakteriellen Kollagenase A zu identifizieren. Drei von der FDA zugelassene Medikamente, Benzthiazid, Entacapon und Lodoxamid, erwiesen sich als starke Kandidaten für die Hemmung der bakteriellen Kollagenase. Diese Medikamente wurden aufgrund ihrer guten simulierten Wechselwirkungen mit bakterieller Kollagenase und ihres bewerteten Potenzials zur Blockierung des Enzyms ausgewählt.**

Die Studie unterstrich die Notwendigkeit weiterer Untersuchungen, um die vorhergesagte biologische Funktion dieser spezifischen Verbindungen zu überprüfen und ihre Wirksamkeit bei der Behandlung von durch bakterielle Kollagenase verursachten Infektionen zu beurteilen.

Die Identifizierung möglicher Inhibitoren von Clostridium histolyticum- **Kollagenasen könnte möglicherweise hilfreich sein, um Krankheiten wie Fibrose und chronische Wunden zu behandeln, die mit dem Abbau von Kollagen in Zusammenhang stehen. Die Enzymaktivität von Kollagenasen ist das Ziel dieser Inhibitoren, die Gewebeschäden reduzieren und die Geweberegeneration sowie Wundheilung fördern könnten . Die durch In-silico-Analysen gefundenen Leitverbindungen sollten unseren Erkenntnissen zufolge umfangreichen Validierungsexperimenten unterzogen werden, um ihre Wirksamkeit und Sicherheitsmerkmale zu beurteilen. Obwohl die In-silico-Analyse äußerst vielversprechend ist, weist diese Studie bestimmte Einschränkungen auf. Simulationsvariablen und die Qualität der Proteinstruktur sind Schlüsselfaktoren für die Rechengenauigkeit. Proteinflexibilität und Auswirkungen von Lösungsmitteln können bei Dockinganalysen übersehen werden, was die Wahrscheinlichkeit falsch positiver Ergebnisse erhöht. Die Notwendigkeit einer** multidisziplinären Zusammenarbeit und Validierung zur Bestätigung der Hemmwirkung wird **durch die begrenzten e**

Die Optimierung der Inhibitoreigenschaften und die experimentelle Validierung sollten die Hauptfelder künftiger Studien sein. Die Integration experimenteller und rechnergestützter Daten kann die Entwicklung neuer Medikamente für Erkrankungen vorantreiben, die mit Kollagen in Zusammenhang stehen. Kurz gesagt: Unsere Erkenntnisse erleichtern die Entdeckung von Medikamenten, indem sie die Behandlungsmöglichkeiten für Erkrankungen verbessern, die mit dem Abbau von Kollagen in Zusammenhang stehen. Zur Bekämpfung der antimikrobiellen Resistenz müssen jedoch noch weitere Validierungen durchgeführt werden .

5. Schlussfolgerungen

Ziel dieser Forschung war es, Inhibitoren der C. histolyticum- **Kollagenase G zu identifizieren. Mithilfe von Computermodellen und einem In-silico-Ansatz konnten wir die drei wichtigsten Verbindungen als MSID000001, MSID000002 und MSID000003 identifizieren, die das Potenzial zeigten, die Aktivität des Enzyms wirksam zu hemmen. Diese Erkenntnisse stellten einen Schritt in Richtung der Entwicklung und Charakterisierung neuer Inhibitoren dar, die auf die** C. histolyticum- **Peptidase -G-Domäne abzielen. Um das besagte Enzym wirksam zu hemmen, müssen weitere Untersuchungen durchgeführt werden . Im weiteren Verlauf müssen experimentelle Untersuchungen durchgeführt werden, um die rechnergestützten Ergebnisse dieser Forschung zu bestätigen.**

Ergänzende Materialien: Die folgenden unterstützenden Informationen können unter folgender Adresse heruntergeladen werden: https://www. mdpi.com/article/10.3390/computation12080153/s1, Abbildung S1: Die Sekundärstruktur der drei oberen Komplexe MSID000001 (A), MSID000002 (B), MSID000003 (C) und Kontrolle (D).

Abbildung S2: Die Salzbrückeninteraktion der drei oberen Komplexe MSID000001, MSID000002, MSID000003 und Kontrolle ist in der oben angegebenen Abbildung dargestellt. Tabelle S1: Pharmakokinetisches Profil von MSID000001, MSID000002, MSID000003 und Kontrolle. Tabelle S2: Lipophilieeigenschaften der untersuchten Verbindungen. Tabelle S3: Physiochemische Eigenschaften der ausgewählten Verbindungen. Tabelle S4: Arzneimittelähnlichkeit der untersuchten Verbindungen.

Beiträge der Autoren: Konzeptualisierung, FA; Methodik, FA, AH, NAA und FAA; Software, NH; Validierung, AAA; formale Analyse, AAA; Untersuchung, MB; Ressourcen, AS; Datenkuratierung, NAA und AAA; Schreiben – Vorbereitung des Originalentwurfs, HJB; Schreiben – Überprüfung und Bearbeitung, AA; Visualisierung, MIN; Aufsicht, FA; Projektverwaltung, FA; Mittelbeschaffung, FA. Alle Autoren haben die veröffentlichte Version des Manuskripts gelesen und stimmen ihr zu.

Finanzierung: Diese Forschung wurde von der Taif University, Saudi-Arabien, Projektnummer (TU-DSPP-2024-140), finanziert.

Erklärung zur Datenverfügbarkeit: Alle in der aktuellen Forschung generierten Daten werden im Manuskript präsentiert.

Machine Translated by Google

Danksagungen: Die Autoren bedanken sich bei der Taif University, Saudi-Arabien, für die Unterstützung dieser Arbeit durch die Projektnummer (TU-DSPP-2024-140).

Interessenkonflikte: Die Autoren erklären, dass keine Interessenkonflikte bestehen.

Verweise

1. **Alhayek, A.; Abdelsamie, AS; Schönauer, E.; Camberlein, V.; Hutterer, E.; Posselt, G.; Serwanja, J.; Blöchl, C.; Huber, CG; Haupenthal, J.; et al. Entdeckung und Charakterisierung synthetisierter und von der FDA zugelassener Inhibitoren von Clostridien- und Bazillenkollagenasen .** J. Med. Chem. **2022,** 65, **12933–12955.** [CrossRef] [PubMed]
2. **Muteeb, G.; Rehman, MT; Shahwan, M.; Aatif, M. Ursprung von Antibiotika und Antibiotikaresistenz und ihre Auswirkungen auf die Arzneimittel Entwicklung: Eine narrative Übersicht.** Pharmaceuticals **2023,** 16, **1615.** [CrossRef] [PubMed]
3. **Calvert, MB; Jumde, VR; Titz, A. Pathoblocker oder Antivirulenz-Medikamente als neue Option zur Behandlung bakterieller Infektionen** Beilstein J. Org. Chem. **2018,** 14, **2607–2617.** [CrossRef] [PubMed]
4. **Popoff, MR; Bouvet, P. Genetische Eigenschaften toxigener Clostridien und Evolution der Toxin-Gene.** Toxicon **2013,** 75, **63–89.** [Querverweis] [PubMed]
5. **Brown, RL; Larkinson, MLY; Clarke, TB Immunologisches Design von Kommensalgemeinschaften zur Behandlung von Darminfektionen und Entzündung.** PLoS Pathog. **2021,** 17, **e1009191.** [CrossRef] [PubMed]
6. **Palmer, JS; Hough, RL; West, HM; Avery, LM Eine Überprüfung der Häufigkeit, des Verhaltens und der Erkennung von Clostridien-Erregern in landwirtschaftlichen Böden.** Eur. J. Soil Sci. **2019,** 70, **911–929.** [CrossRef]
7. **Gabrielson, AT; Spitz, JT; Hellstrom, WJG Kollagenase Clostridium Histolyticum bei der Behandlung urologischer Erkrankungen: Aktuelle und zukünftige Auswirkungen.** Sex. Med. Rev. **2018, 6, 143–156.** [CrossRef] [PubMed]
8. **Popoff, MR Überblick über bakterielle Proteintoxine aus pathogenen Bakterien: Wirkungsweise und Einblicke in die Evolution.** Toxins **2024,** 16, **182.** [CrossRef] [PubMed]
9. **Kaya, C.; Hirsch, AKH Zielgerichtete Entwicklung extrazellulärer bakterieller Proteasen zur Entwicklung neuartiger antivirulenter Wirkstoffe.** Chimia **2022,** 76, **402–408.** [CrossRef] [PubMed]
10. **Eckhard, U.; Huesgen, PF; Brandstetter, H.; Insgesamt zeigt das CM-proteomische Protease-Spezifitätsprofil von Clostridien-Kollagenasen deren intrinsische Natur als dedizierte Kollagenabbauer.** J. Proteom. **2014,** 100, **102–114.** [CrossRef] [PubMed]
11. **Shekhter, AB; Balakireva, AV; Kuznetsova, NV; Vukolova, MN; Litvitsky, PF; Zamyatnin Jr, AA Kollagenolytische Enzyme und ihre Anwendungen in der Biomedizin.** Curr. Med. Chem. **2019,** 26, **487–505.** [CrossRef] [PubMed]
12. **Sargsyan, A.; Hakobyan, H.; Mardiyan, Z.; Jamharyan, S.; Dadayan, A.; Sargsyan, T.; Hovhannisyan, N. Modellierung, Synthese und In-vitro-Screening ungewöhnlicher Aminosäuren und Peptide als Proteaseinhibitoren.** J. Chem. Technol. Metall. **2023,** [Querverweis]
13. María, **RR; Arturo, CJ; Alicia, J.; Paulina, MG; Gerardo, A. Der Einfluss der Bioinformatik auf Impfstoffdesign und -entwicklung** Impfstoffe **2017, 2, 3–6.**
14. **dos Santos Nascimento, IJ; da Silva Rodrigues, É.E.; da Silva, MF; de Araújo-Júnior, JX; de Moura, RO Fortschritte bei Computermethoden zur Entdeckung neuer NS2B-NS3-Inhibitoren, die gegen Dengue- und Zika-Viren nützlich sind.** Curr. Spitze. Med. Chem. **2022,** 22, **2435–2462.** [CrossRef] [PubMed]
15. **Saha, M.; Sarkar, A. Überblick über die zahlreichen Facetten der Arzneimittelresistenz: Eine wachsende Herausforderung im 21. Jahrhundert.** J. Xenobiotics **2021,** 11, **197–214.** [CrossRef] [PubMed]
16. **Kore, PP; Mutha, MM; Antre, RV; Oswal, RJ; Kshirsagar, SS Computergestütztes Arzneimitteldesign: Ein innovatives Werkzeug zur Modellierung.** Open J. Med. Chem. **2012, 2, 26238.** [CrossRef]
17. **Sarkar, S.; Gulati, K.; Kairamkonda, M.; Mishra, A.; Poluri, KM Aufklärung von Protein-Protein-Interaktionen durch rechnergestützte Ansätze und Entwicklung kleiner Molekülinhibitoren dagegen für verschiedene Krankheiten.** Curr. Top. Med. Chem. **2018,** 18, **1719–1736.** [CrossRef]
18. **Palchevskyi, S.; Czarnocki-Cieciura, M.; Vistoli, G.; Gervasoni, S.; Nowak, E.; Beccari, AR; Nowotny, M.; Talarico, C. Struktur von Menschlicher TRPM8-Kanal.** Commun. Biol. **2023, 6, 1065.** [CrossRef]
19. **Kaliappan, S.; Bombay, IIT UCSF Chimera—Overview. 2018. Online verfügbar: https://www.cgl.ucsf.edu/chimera/ (Zugriff am 20. Juli 2024).**
20. **Pencheva, T.; Lagorce, D.; Pajeva, I.; Villoutreix, BO; Miteva, MA AMMOS: Automatisierte Molekularmechanik-Optimierung Werkzeug für In-Silico-Screening.** BMC Bioinform. **2008, 9, 438.** [CrossRef] [PubMed]
21. **Bhowmick, S.; Saha, A.; Osman, SM; Alasmary, FA; Almutairi, TM; Islam, MA Strukturbasierte Identifizierung von SARS-CoV-2-Hauptproteaseinhibitoren aus antiviralen spezifischen chemischen Bibliotheken: Ein umfassender computergestützter Screening-Ans** Divers. **2021,** 25, **1979–1997.** [CrossRef] [PubMed]
22. **Zothantluanga, J.; Aswin, SK; Rudrapal, M.; Chetia, D. Antimalaria-Flavonoid-Glycosid aus Acacia Pennata mit inhibitorischer Potenzial gegen PfDHFR-TS: Eine In-Silico-Studie.** Biointerface Res. Appl. Chem **2021,** 12, **4871–4887.**
23. **Halgren, TA MMFF VII. Charakterisierung von MMFF94, MMFF94s und anderen weit verbreiteten Kraftfeldern für Konformationsenergien und für intermolekulare Wechselwirkungsenergien und -geometrien.** J. Comput. Chem. **1999,** 20, **730–748.** [CrossRef]
24. **Olawale, F.; Iwaloye, O.; Elekofehinti, OO Virtuelles Screening von Naturstoffen als selektive Inhibitoren der Polo-ähnlichen Kinase-1 an der C-terminalen Polo-Box und der N-terminalen katalytischen Domäne.** J. Biomol. Struct. Dyn. **2022,** 40, **13606–13624.** [CrossRef] [PubMed]

Machine Translated by Google

25. Lavecchia, A.; Di Giovanni, C. Virtuelle Screening-Strategien in der Arzneimittelforschung: Eine kritische Übersicht. Curr. Med. Chem. **2013,** 20, **2839–2860.** [CrossRef] [PubMed]

26. Dallakyan, S.; Olson, AJ Screening von Bibliotheken kleiner Moleküle durch Andocken mit PyRx. In Chemische Biologie. Methoden in der Molekularbiologie Biologie; **Humana Press: New York, NY, USA, 2015; S. 243–250.**

27. Kumar, SP; Girija, ASS; Priyadharsini, JV Zielgerichtete NM23-H1-vermittelte Hemmung der Tumormetastasen bei viraler Hepatitis mit bioaktiven Verbindungen aus Ganoderma Lucidum: Eine computergestützte Studie. Indian J. Pharm. Sci. **2020,** 82, **300.** [CrossRef]

28. Bilal, MS; Ejaz, SA; Zargar, S.; Akhtar, N.; Wani, TA; Riaz, N.; Aborode, AT; Siddique, F.; Altwaijry, N.; Alkahtani, HM; et al. Computergestützte Untersuchung von 1, 3, 4 Oxadiazol-Derivaten als Leitinhibitoren von VEGFR 2 im Vergleich mit EGFR: Dichtefunktionaltheorie , molekulares Docking und molekulardynamische Simulationsstudien. Biomolecules **2022,** 12, **1612.** [CrossRef] [PubMed]

29. Masnabadi, N.; Thalji, MR; Alhasan, HS; Mahmoodi, Z.; Soldatov, AV; Ali, GAM Strukturelle, elektronische, Reaktivitäts- und Konformationsmerkmale von 2, 5, 5-Trimethyl-1, 3, 2-Diheterophosphinan-2-sulfid und seinen Derivaten: DFT-, MEP- und NBO-Berechnungen. Molecules **2022,** 27, **4011.** [CrossRef] [PubMed]

30. Hashem, HE; Ahmad, S.; Kumer, A.; Bakri, Y. El In Silico und in Vitro Vorhersage neuer synthetisierter N-heterozyklischer Verbindungen als Anti-SARS-CoV-2. Sci. Rep. **2024,** 14, **1152.** [CrossRef]

31. Fatima, A.; Pooja, K.; Savita, S.; Singh, M.; Verma, I.; Siddiqui, N.; Javed, S. Quantenchemische, experimentelle spektroskopische, Hirshfeld-Oberflächen- und molekulare Dockingstudien des antimikrobiellen Medikaments Sulfathiazol. J. Mol. Struct. **2021,** 1245, **131118.** [Querverweis]

32. Bruno, A.; Costantino, G.; Sartori, L.; Radi, M. Die in Silico Drug Discovery Toolbox: Anwendungen in Lead Discovery und Optimierung. Curr. Med. Chem. **2019,** 26, **3838–3873.** [CrossRef] [PubMed]

33. Lohohola, PO; Mbala, BM; Bambi, S.-MN; Mawete, DT; Matondo, A.; Mvondo, JGM In Silico ADME/T Eigenschaften von Chininderivate unter Verwendung von SwissADME- und PkCSM-Webservern. Int. J. Trop. Dis. Health **2021,** 42, **1–12.**

34. Makeneni, S.; Thieker, DF; Woods, RJ Anwendung von Pose Clustering und MD-Simulationen zur Eliminierung von False Positives in Molecular Docking. J. Chem. Inf. Modell. **2018,** 58, **605–614.** [CrossRef] [PubMed]

35. Shukla, R.; Tripathi, T. Molekulardynamische Simulation von Proteinen und Protein-Ligand-Komplexen. In Computer-Aided Drug Design; **Springer: Singapur, 2020; S. 133–161.**

36. Pujadas, G.; Vaque, M.; Ardevol, A.; Klinge, C.; Salvador, MJ; Blay, M.; Fernandez-Larrea, J.; Arola, L. Protein-Ligand-Docking: A Überblick über aktuelle Fortschritte und Zukunftsperspektiven. Curr. Pharm. Anal. **2008, 4, 1–19.** [CrossRef]

37. Alamri, MA; Mirza, MU; Adeel, MM; Ashfaq, UA; Tahir Ul Qamar, M.; Shahid, F.; Ahmad, S.; Alatawi, EA; Albalawi, GM; Allemailem, KS; et al. Strukturelle Aufklärung des Rift-Valley-Fieber-Virus-L-Proteins zur Entdeckung seiner potenziellen Inhibitoren. Pharmaceuticals **2022,** 15, **659.** [CrossRef] [PubMed]

38. Miandad, K.; Ullah, A.; Bashir, K.; Khan, S.; Abideen, SA; Shaker, B.; Alharbi, M.; Alshammari, A.; Ali, M.; Haleem, A.; et al. Virtuelles Screening von Phytochemikalien aus Artemisia Annua als potenzielle Inhibitoren des Hauptproteaseenzyms von SARS-CoV-2. Molecules **2022,** 27, **8103.** [CrossRef] [PubMed]

39. Rieder, SR; Ries, B.; Schaller, K.; Champion, C.; Barros, EP; Hünenberger, PH; Riniker, S. Replica-Exchange Enveloping Distribution Sampling unter Verwendung verallgemeinerter AMBER-Kraftfeldtopologien: Anwendung auf Berechnungen der relativen Hydratations-Freienergie für große Molekülsätze. J. Chem. Inf. Model. **2022,** 62, **3043–3056.** [CrossRef] [PubMed]

40. Fratev, F.; Sirimulla, S. Ein verbessertes Free Energy Perturbation FEP+ Sampling-Protokoll für flexible Ligandenbindungsdomänen. Sci. Rep. **2019, 9, 16829.** [CrossRef] [PubMed]

41. Tiwari, P.; Sharma, P.; Kumar, M.; Kapil, A.; Abdul Samath, E.; Kaur, P. Identifizierung neuer natürlicher MurD-Ligase-Inhibitoren als potenzielle antimikrobielle Wirkstoffe gegen Acinetobacter Baumannii: In-silico-Screening und biologische Bewert Struct. Dyn. **2022,** 40, **14051–14066.** [CrossRef] [PubMed]

42. Honarparvar, B.; Govender, T.; Maguire, GEM; Soliman, MES; Kruger, HG Integrierter Ansatz für strukturbasiertes enzymatisches Arzneimitteldesign: Molekulare Modellierung, Spektroskopie und experimentelle Bioaktivität. Chem. Rev. **2014,** 114, **493–537.** [CrossRef] [PubMed]

43. Zschau, RL; Zacharias, M. Mechanismus der B-Haarnadelbildung in AzoChignolin und Chignolin. J. Comput. Chem. **2023,** 44, **988–1001.** [CrossRef] [PubMed]

44. Justino, GC; Nascimento, CP; Justino, MC Molekulare Dynamik-Simulationen und Analysen für Bioinformatik-Studenten Studierende. Biochem. Mol. Biol. Educ. **2021,** 49, **570–582.** [CrossRef] [PubMed]

45. Brandsdal, BO; Österberg, F.; Almlöf, M.; Feierberg, I.; Luzhkov, VB; Åqvist, J. Freie Energieberechnungen und Ligandenbindung. Adv. Protein Chem. **2003,** 66, **123–158.** [PubMed]

46. Gul, S.; Ozcan, O.; Asar, S.; Okyar, A.; Barÿs, I.; Kavakli, IH In-Silico-Identifizierung weit verbreiteter und gut verträglicher Arzneimittel als potenzielle SARS-CoV-2-3C-ähnliche Protease- und virale RNA-abhängige RNA-Polymerase-Inhibitoren für den direkten Einsatz in klinischen Studien J. Biomol. Struct. Dyn. **2021,** 39, **6772–6791.** [CrossRef] [PubMed]

47. Miller III, BR; McGee Jr, TD; Swails, JM; Homeyer, N.; Gohlke, H.; Roitberg, AE MMPBSA. Py: Ein effizientes Programm für Berechnungen der freien Energie im Endzustand. J. Chem. Theory Comput. **2012, 8, 3314–3321.** [CrossRef] [PubMed]

48. Woods, CJ; Malaisree, M.; Michel, J.; Long, B.; McIntosh-Smith, S.; Mulholland, AJ Schnelle Zersetzung und Visualisierung der freien Protein-Ligand-Bindungsenergien durch Rückstände und Wasser. Faraday Discuss. **2014,** 169, **477–499.** [CrossRef] [PubMed]

Machine Translated by Google

49. Bergström, CAS; Larsson, P. Computergestützte Vorhersage der Arzneimittellöslichkeit in wasserbasierten Systemen: Qualitative und quantitative Ansätze, die in der aktuellen Arzneimittelforschung und -entwicklung verwendet werden. Int. J. Pharm. **2018,** 540, **185–193.** [CrossRef

50. Montgomerie, S.; Sundararaj, S.; Gallin, WJ; Wishart, DS Verbesserung der Genauigkeit der Vorhersage der Sekundärstruktur von Proteinen Verwenden von Strukturausrichtung. BMC Bioinform. **2006, 7, 301.** [CrossRef] [PubMed]

51. Tanwar, H.; Kumar, DT; Doss, CGP; Zayed, H. Bioinformatische Klassifizierung von Mutationen bei Patienten mit Mukopolysaccharidose IIIA. Metab. Brain Dis. **2019,** 34, **1577–1594.** [CrossRef] [PubMed]

52. Wang, J.; Yang, W.; Zhao, L.; Wei, B.; Chen, J. Bindungsmechanismus von Inhibitoren an BRD4 und BRD9 entschlüsselt durch mehrere unabhängige Molekulardynamiksimulationen und Deep Learning. Molecules **2024,** 29, **1857.** [CrossRef] [PubMed]

53. Henderson, R.; Anasti, K.; Manne, K.; Stalls, V.; Saunders, C.; Billign, Y.; Williams, A.; Bubphamala, P.; Montani, M.; Kachhap, S. Entwicklung von Immunogenen, die spezifische Mutationen in breit neutralisierenden HIV-Antikörpern selektieren. bioRxiv **2023.** [CrossRef]

54. Mortier, J.; Rakers, C.; Bermudez, M.; Murgueitio, MS; Riniker, S.; Wolber, G. Der Einfluss der Molekulardynamik auf das Arzneimitteldesign: Anwendungen zur Charakterisierung von Ligand-Makromolekül-Komplexen. Drug Discov. Today **2015,** 20, **686–702** [PubMed]

55. Ahmed, SA; Ali, N.; Qureshi, U.; Khalil, R.; Qasmi, Z.-UH Molekulardynamik-Simulation der menschlichen Pankreaslipase und des Lipase-Colipase-Komplexes: Einblick in die Strukturschwankungen und Konformationsänderungen. Int. J. Comput. Theor. **2020, 8, 19.** [CrossRef]

56. Elmaaty, AA; Darwish, KM; Khattab, M.; Elhady, SS; Salah, M.; Hamed, MIA; Al-Karmalawy, AA; Saleh, MM Auf der Suche nach potenziellen Wirkstoffkandidaten zur Bekämpfung von COVID-19: Computergestützte Studie enthüllt Salvianolsäure B als potenzielles Therapeutikum gegen 3CLpro und Spike-Proteine. J. Biomol. Struct. Dyn. **2022,** 40, **8866–8893.** [CrossRef] [PubMed]

57. Sun, Z.; Liu, Q.; Qu, G.; Feng, Y.; Reetz, MT Nutzen von B-Faktoren in der Proteinforschung: Interpretation von Rigidität, Flexibilität und interner Bewegung und technische Thermostabilität. Chem. Rev. **2019,** 119, **1626–1665.** [CrossRef] [PubMed]

58. Gewers, FL; Ferreira, GR; De Arruda, HF; Silva, FN; Comin, CH; Amancio, DR; Costa, LdF Hauptkomponentenanalyse: Ein natürlicher Ansatz zur Datenexploration. ACM Comput. Surv. **2021,** 54, **1–34.** [CrossRef]

59. Yoo, C.; Shahlaei, M. Die Anwendungen von PCA in QSAR-Studien: Eine Fallstudie zu CCR5-Antagonisten. Chem. Biol. Drug Des. **2018,** 91, **137–152.** [CrossRef]

60. Karnati, KR; Wang, Y. Strukturelle und bindende Einblicke in HIV-1-Protease- und P2-Ligand-Interaktionen durch Molekulardynamiksimulationen, Bindungsfreie Energie und Hauptkomponentenanalyse. J. Mol. Graph. Model. **2019,** 92, **112–122.** [Querverweis] [PubMed]

61. Chaudhary, K.; Kumar, K.; Venkatesu, P.; Masram, DT Proteinimmobilisierung auf Graphenoxid- oder reduzierter Graphenoxidoberfläche und ihre Anwendungen: Einfluss auf Aktivität, strukturelle und thermische Stabilität von Proteinen. Adv. C **2021,** 289, **102367.** [CrossRef] [PubMed]

62. Jamal, SB; Ismail, S.; Yousaf, R.; Qazi, AS; Iftkhar, S.; Abbasi, SW Erforschung neuer Inhibitoren auf Basis von 1-Hydroxynaphthalin-2-Carboxaniliden gegen C-Jun-N-terminale Kinasen durch molekulardynamische Simulation und WaterSwap Biochem. Biotechnol. **2023,** 196, **1803–1819.** [CrossRef] [PubMed]

63. Panday, SK; Ghosh, I. In-Silico-Strukturbasierte Vorhersage der Rezeptor-Ligand-Bindungsaffinität: Aktuelle Fortschritte und Herausforderungen. In Strukturelle Bioinformatik: Anwendungen im präklinischen Arzneimittelentdeckungsprozess. Herausforderungen und Fortschritte in der Computerchemie und Physik; **Springer: Cham, Schweiz, 2019; S. 109–175.**

64. Kirby, JP Die Amidinium-Carboxylat-Salzbrücke und Elektronentransferreaktionen; **Michigan State University: East Lansing, MI, USA, 1997; ISBN 0591744015.**

65. Gupta, MN; Uversky, VN Biologische Bedeutung von Arginin: Eine umfassende Überprüfung der Rollen in Struktur, Unordnung und Funktionalität von Peptiden und Proteinen. Int. J. Biol. Macromol. **2023,** 257, **128646.** [CrossRef] [PubMed]

66. Pakhrin, SC; Shrestha, B.; Adhikari, B.; Kc, DB Fortschritte bei der Vorhersage von Proteinstrukturen auf Basis von Deep Learning. Int. J. Mol. Sci. **2021,** 22, **5553.** [CrossRef] [PubMed]

67. Gomes, D.; Silvestre, S.; Duarte, AP; Venuti, A.; Soares, CP; Passarinha, L.; Sousa, Â. In-Silico-Ansätze: Ein Weg zur Entwicklung neuartiger Therapeutika für die Behandlung von Gebärmutterhalskrebs. Pharmaceuticals **2021,** 14, **741.** [CrossRef] [PubMed]

68. Al-Thakafi, S.; Al-Hathal, N. Peyronie-Krankheit: Ein Literaturüberblick über Epidemiologie, Genetik, Pathophysiologie, Diagnose und Aufarbeitung. Übers. Androl. Urol. **2016, 5, 280.** [CrossRef] [PubMed]

69. Alipour, H.; Raz, A.; Zakeri, S.; Djadid, ND Therapeutische Anwendungen von Kollagenasen (Metalloproteasen): Ein Überblick. Asian Pac. J. Trop. Biomed. **2016, 6, 975–981.** [CrossRef]

70. Supuran, CT; Scozzafava, A.; Mastrolorenzo, A. Bakterielle Proteasen: Aktuelle therapeutische Nutzung und zukünftige Aussichten für die Entwicklung neuer Antibiotika. Expertenmeinung. Ther. Pat. **2001,** 11, **221–259.** [CrossRef]

71. Nitulescu, G.; Nitulescu, GM; Zanfirescu, A.; Mihai, DP; Gradinaru, D. Kandidaten für die Umwidmung als Antivirulenzmittel basierend auf der Strukturprofilanalyse mikrobieller Kollagenaseinhibitoren. Pharmaceutics **2021,** 14, **62.** [CrossRef] [PubMed]

Haftungsausschluss/Anmerkung des Herausgebers: Die in allen Veröffentlichungen enthaltenen Aussagen, Meinungen und Daten sind ausschließlich die der einzelnen Autoren und Mitwirkenden und nicht die von MDPI und/oder den Herausgebern. MDPI und/oder die Herausgeber lehnen jegliche Verantwortung für Personen- oder Sachschäden ab, die aus den im Inhalt erwähnten Ideen, Methoden, Anweisungen oder Produkten resultiere

Machine Translated by Google

Berechnung

MDPI

Artikel

Bayesianischer Ansatz zur stochastischen Schätzung der Bevölkerung Überlebenskurven in Chile unter Verwendung von ABC-Techniken und ihre Auswirkungen auf soziale Strukturen

Rolando Rubilar-Torrealba und Claudio Elórtegui-Gómez [1], Karime Chahuán-Jiménez [2,*], Hanns de la Fuente-Mella [3] [4]

[1] Departamento de Industrias, Universidad Técnica Federico Santa María, Valparaíso 2090123, Chile; rolando.rubilar@usm.cl

[2] Escuela de Auditoría, Centro de Investigación en Negocios y Gestión Empresarial, Universidad de Valparaíso, Valparaíso 2361891, Chile Instituto de Estadística,

[3] Facultad de Ciencias, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Valparaíso 2340031, Chile; hanns.delafuente@pucv.cl Escuela de Periodismo, Facultad

[4] de Ciencias Económicas y Administrativas, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Valparaíso 2373223, Chile; claudio.elortegui@pucv.cl * Korrespondenz: karime.chahuan@uv.cl

Zusammenfassung: In Chile und weltweit ist die Lebenserwartung in den letzten sechs Jahrzehnten kontinuierlich gestiegen. Der Zweck dieser Studie bestand daher darin, die Bevölkerungssterblichkeitsraten in Chile zu ermitteln, zu messen und zu schätzen. Sterblichkeitsschätzungen werden zur Berechnung der Lebenserwartung bei der Erstellung von Sterbetafeln verwendet. Der Bayes-Ansatz, insbesondere durch Approximate Bayesian Computation (ABC), wird verwendet, um die Parameterauswahl für diese Berechnungen zu optimieren. ABC entspricht einer Klasse von Rechenmethoden, die auf Bayes-Statistiken basieren und zur Schätzung der Posterior-Verteilungen der Modellparameter verwendet werden könnten. Für diese Untersuchung wurde ABC angewendet, um die Sterblichkeitsraten in Chile zu schätzen, wobei die von 2004 bis 2021 verfügbaren Informationen verwendet wurden. Die Ergebnisse zeigten Heterogenität bei der Auswahl des besten Modells. Darüber hinaus war es möglich, Prognosen für die nächsten 10 Jahre für die in der Untersuchung analysierten Reihen zu erstellen. Schließlich besteht der Hauptbeitrag dieser Untersuchung darin, dass wir die Bevölkerungssterblichkeitsraten in Chile gemessen und geschätzt und die optimale Parameterauswahl definiert haben, um zur Schaffung einer Verbindung zwischen Sozial- und Technikwissenschaften beizutragen, um das aktuelle Wissen im Bereich der sozialen Strukturen voranzu

Schlüsselwörter: Mortalität; ältere Bevölkerung; Lebenserwartung; stochastische Prozesse; Bayesianische Analyse

check for updates

Zitat: Rubilar-Torrealba, R.; Chahuán-Jiménez, K.; de la Fuente-Mella, H.; Elórtegui-Gómez, C. Bayesianischer Ansatz zur stochastischen Schätzung von Bevölkerungsüberlebenskurven in Chile unter Verwendung von ABC-Techniken und seine Auswirkungen auf soziale Strukturen. Computation 2024, 12, 154. https://doi.org/10.3390/ calculation12080154

Wissenschaftliche Herausgeber: Minzhang Zheng und Pedro D. Manrique

Erhalten: 2. Juli 2024
Überarbeitet: 19. Juli 2024
Akzeptiert: 25. Juli 2024
Veröffentlicht: 29. Juli 2024

Copyright: © 2024 bei den Autoren. Lizenznehmer MDPI, Basel, Schweiz.

Dieser Artikel ist ein Open Access-Artikel vertrieben unter den Bedingungen und Bedingungen der Creative Commons Namensnennungslizenz (CC BY) (https:// creativecommons.org/licenses/by/ 4.0/).

1. Einleitung

Gesundheit wird zunehmend als entscheidender Aspekt des Wirtschaftswachstums angesehen, und die Verfolgung der gesunden Lebenserwartung ist für die Beurteilung der finanziellen Nachhaltigkeit von Gesundheits- und Sozialfürsorgesystemen von entscheidender Bedeutung [1]. Die Autoren von [2] stellten fest, dass die Lebenserwartung häufiger in Screening- und Behandlungsrichtlinien als Beweismittel zur Erleichterung klinischer Entscheidungen in Bezug auf den Patienten einbezogen wurde und dass die Lebenserwartung, die den Gesundheitszustand berücksichtigt, erheblich von den Sterbetafeln und dem Gesundheitszu

Laut [3] ist der Anstieg der Lebenserwartung in den Ländern mit hohem Einkommen im asiatisch-pazifischen Raum größtenteils auf eine Verschiebung der Sterblichkeit von nicht übertragbaren Krankheiten hin zum Alter zurückzuführen, was zu einer raschen Alterung der Bevölkerung geführt hat und eine Politik erfordert, die sich auf gesunde Jahre im Alter konzentriert. Andererseits deuten Prognosen der Lebenserwartung in westlichen Ländern darauf hin, dass die Lebenserwartung in den meisten westlichen Ländern tatsächlich weiter steigen wird, aber eine wichtige offene Frage ist, ob eine längere Lebenserwartung mit mehr oder weniger Jahren schlechter Gesundheit verbunden sein wird . Es ist daher sinnvoll, Prognosen der Lebenserwartung durch Prognosen der Gesundheitserwartung zu ergänzen. Die Autoren von [4] weisen darauf hin, dass bei der Wahl einer Politik

Machine Translated by Google

zur Berechnung der Lebenserwartung und von Sterbetafeln, mit Schwerpunkt auf Bedürfnissen, Publikum und Kommunikationsstrategie; gemeinschaftlichen Werten und Normen, um Ungleichheiten explizit anzusprechen; und analytischen Fähigkeiten.

Der demografische Wandel mit der Alterung der Gesellschaften und der epidemiologische Wandel mit der Zunahme chronischer Krankheiten sind weltweit unbestreitbar. Zu den Folgen dieser Veränderungen gehören die Zunahme von Multimorbidität und Fragilität sowie andererseits die steigende Lebenserwartung – was eine steigende Nachfrage nach Gesundheits- und Sozialdiensten bedeutet. Dieses Szenario bringt Komplexität in der Verwaltung und Organisation der Versorgung mit sich, die eine strukturelle und funktionale Anpassung der verfügbaren Gesundheitsressourcen erfordert, wenn wir sie erhalten und nachhaltig gestalten wollen. Die Auswirkungen der Entscheidungsfindung auf mittlere und lange Sicht in Gesundheitssystemen stellen jedoch ohne die Hilfe von Technologie, d. h. ohne den Einsatz von Computertools und mathematischen Modellen, eine große Herausforderung dar. Dies ist keine neue Herausforderung – Wissenschaftler aus verschiedenen Wissensbereichen stellen die Machbarkeit und Nachhaltigkeit von Gesundheitssystemen schon seit Jahrzehnten in Frage. In diesem Zusammenhang ist es wichtig, die Verbindung zwischen Sozial- und Technikwissenschaften für die Weiterentwicklung und Umsetzung des aktuellen Wissens auf diesem Gebiet hervorzuheben.

Die Überwachung der Lebenserwartung in kleinen Gebieten ist für die Gesundheitspolitik wichtig, stellt jedoch für die konventionelle Sterbetafelanalyse Schwierigkeiten dar [5]. Darüber hinaus beinhaltet das implizite Modell, das der konventionellen Sterbetafelanalyse zugrunde liegt, einen parametrisierten Fixeffektansatz. Laut der sozialen Klassenrangfolge besteht ein klarer Zusammenhang zwischen Bildungsabschluss und Lebenserwartung . Die soziale Klassenrangfolge ist für die Gesundheitserwartung sogar

Um darauf hinzuweisen, dass es in der demografischen Literatur eine Lücke im Zusammenhang mit der Interpretation periodischer Trends der Lebenserwartung gibt, werden die Tempoeffekte [6] vorgestellt; dies ist der Fall, wenn eine große Anzahl von Todesfällen plötzlich aufgeschoben wird. Unter den oben genannten Bedingungen erhöht die Sterbetafel die Langlebigkeit der Bevölkerung, indem sie aufgeschobene Todesfälle mit der verbleibenden Lebenserwartung gewichtet. Die Studie von [7] zeigt, dass die Lebenserwartung im Alter von 50 Jahren zwischen dem höchsten und dem niedrigsten Einkommensquintil um 8,6 Jahre für Männer und 5,5 Jahre für Frauen abweicht . Der Unterschied in der behinderungsfreien Lebenserwartung beträgt 12,8 bzw. 11,0 Jahre für Männer und Frauen. Der Mortalitätseffekt trägt in gleichem Maße zum Unterschied in der behinderungsfreien Lebenserwartung bei Männern und etwas mehr bei Frauen bei.

Die Forschung von [8] zeigt, dass Frauen länger leben, aber mehr Jahre in schlechter Gesundheit verbringen als Männer. Dieselben Autoren betonen die Notwendigkeit, geschlechtsspezifische Unterschiede bei der Nachfrage nach Gesundheitsversorgung zu berücksichtigen. Es ist auch wichtig, die Notwendigkeit von Maßnahmen zu berücksichtigen, die die Anzahl der Jahre erhöhen, die ältere Menschen bei guter Gesundheit leben können. Die Ergebnisse von [9] enthüllen die Existenz ethnisch-rassischer Ungleichheiten bei der Lebenserwartung in Chile und zeigen, dass die indigenen Völker der Mapuche in Bezug auf das Überleben benachteiligter sind als andere indigene und nicht-indigene Gruppen, was Auswirkungen auf die Entscheid

Was die Lebenserwartung betrifft, muss die aktuelle Gesundheitspolitik bei der Bestimmung von Bevölkerungsprognosen und der Zahlungsfähigkeit der Krankenversicherung die wachsende Zahl von Leistungsempfängern mit mehreren chronischen Krankheiten berücksichtigen [10]. Laut [11] ist die Lebenserwartung ein Maß, mit dem Unterschiede im Gesundheitszustand zwischen Bevölkerungen verglichen werden können. Die Verwendung kombinierter flexibler parametrischer Methoden zur Schätzung der Lebenserwartung in kleinen Stichproben hat vielversprechende Ergebnisse erbracht. Sie ermöglichen die Modellierung der Lebenserwartung nach exaktem Alter mit höherer statistischer Präzision und geringerer Verzerru

Zur Messung des Lebensrisikos wird in [12] darauf hingewiesen, dass jedes Individuum ein Leben hat und dieses Leben ein altersspezifisches Sterberisiko hat. Würde man dieses Sterberisiko eines Individuums mit seiner altersspezifischen Überlebenswahrscheinlichkeit berichtigen, würde sich die Lebenserwartung ändern.

Untersuchungen von [13] zeigen, dass sich die Lebenserwartungskurven von homogenen und inhomogenen Populationen in dem durchschnittlichen Alter schneiden, in dem die Gebrechlichsten gestorben wären, und in dem maximalen Lebensalter, in dem die Bevölkerung gelebt hätte (wenn die letzten Mitglieder der Kohorte gestorben wären).

Eine Analyse der Sterbetafeln deutet darauf hin, dass einige Einwanderergruppen unterschiedliche Lebenserwartungen haben, da die standardisierte Sterberate empfindlich auf demografische Unterschiede zwischen den verglichenen Gruppen reagiert [11]. Für [14] sind die Methoden

Machine Translated by Google

mit Sterbetafeln beinhalten normalerweise kein explizites statistisches Modell, aber die zugrunde liegenden statistischen Dichten werden angewendet, wenn Schätzungen von Standardfehlern erforderlich sind. Die Autoren schlagen eine Bayesianische Zufallseffektmethode [15–18] vor , die die Kräfte in Gebiete, Altersgruppen und Gruppen aggregiert und dabei Zufallseffektmethoden verwendet, die Folgendes tun: (a) Korrelationen zwischen benachbarten Gebieten und Altersgruppen identifizieren und (b) Ähnlichkeiten in räumlichen und Alterseffekten zwischen geschichteten demografischen Gruppen (z. B. Geschlecht) erkennen.

Einer der ersten Versuche, die menschliche Sterblichkeit zu modellieren, stammte von dem englischen Aktuar Benjamin Gompertz. Er argumentierte, dass ab einem bestimmten Alter der Logarithmus der Sterblichkeitskraft eine lineare Funktion des Alters ist. Diese Hypothese, später Gompertz'sches Gesetz genannt, wurde in den letzten zwei Jahrhunderten häufig für demografische und versicherungsmathematische Sterblichkeitsprognosen verwendet [19]. Die Autoren von [20] verwendeten die Rahmenbeziehung des Gompertz-Makeham-Sterblichkeitsmodells, die häufig in Studien zu Menschen und Wildtieren verwendet wird, wobei sie davon ausgingen, dass der Gompertz-Ratenparameter von individueller Heterogenität beeinflusst wird, und zeigten, dass das Modell in den Ergebnissen einer Simulationsstudie die für die Simulation verwendeten Parameter angemessen wiederherstellt .

Laut [21] können Mortalitätsmodelle in statische (nur Funktionen des Alters) und dynamische (Funktionen des Alters und des aktuellen Jahres) sowie in deterministische und stochastische Modelle unterteilt werden. Die Autoren betrachteten die Modelle von Gompertz und Makeham, die deterministisch und statisch sind, sowie die Lee-Carter-Methode, die die Mortalität stochastisch als Zufallsverlauf mit Drift vorhersagt. Darüber hinaus wiesen die Autoren darauf hin, dass Modelle, die auf Gompertz und Makeham basieren, häufig für Bildungs-, Prognose- und Risikobewertungszwecke verwendet werden , und dass es sich um die bedeutendsten jüngsten Fortschritte bei der Modellierung und Prognose der Mortalität handelt: die Lee-Carter-Methode.

Sterblichkeitsschätzungen werden zur Berechnung der Lebenserwartung bei der Erstellung von Sterbetafeln verwendet . Beim Vergleich verschiedener Schätzungen der Lebenserwartung zeigen die Ergebnisse von [22] , dass das Lee-Carter-Modell ohne die Langzeitgedächtniskomponente zu Unterschätzungen der Lebenserwartung führen kann, während Erweiterungen der Struktur des Langzeitgedächtnismodells diesen Effekt verringern. Die empirischen Ergebnisse zeigen jedoch, dass die Schätzung mit der Gompertz- Makeham-Methode der Lee-Carter-Methode ähnlich ist [21]. Aus diesem Grund wird in dieser Untersuchung die weithin bekannte Gompertz-Makeham-Methode verwendet.

Laut [23] ist die Verbesserung der Sterblichkeitsraten eine Herausforderung für die öffentliche Rentenplanung und das private Rentengeschäft. Die Vorhersage künftiger Sterblichkeitsraten ist sowohl für die öffentliche Politik als auch für das Management von Finanzinstituten von Bedeutung. Da die Sterblichkeitsraten der Bevölkerung sinken, überarbeiten die nationalen Sozialversicherungssysteme und Versicherungsgesellschaften in den meisten Industrieländern ihre Sterbetafeln, um dem Langlebigkeitsrisiko

Unter Berücksichtigung der Lebenserwartung und ihrer Auswirkungen auf die Regierungspolitik sowie der bestehenden Sterbetafel zielt diese Forschung darauf ab, die Sterblichkeitskurven der männlichen und weiblichen Bevölkerung zu schätzen, basierend auf Projektionen der Parameter, die die Sterblichkeit jeder Kohorte bestimmen, unter Verwendung der ABC-Methode (Approximate Bayesian Computation). Der ABC- Ansatz bietet uns eine flexible Methodik, die an hochkomplexe Schätzprobleme angepasst werden kann [6,25–29], wie z. B. die Schätzung des Sterblichkeitsgesetzes einer Bevölkerung. In dieser Hinsicht können wir verschiedene Modelle des Sterblichkeitsverhaltens der Bevölkerung testen, ohne die Struktur der Methodi

Dieses Manuskript ist in vier Hauptabschnitte unterteilt, die die Materialien und Methoden, Ergebnisse, Diskussion und schließlich die Schlussfolgerungen.

2. Materialien und Methoden

Für diese Untersuchung verwendeten wir offizielle Daten der chilenischen Regierung zu Bevölkerungsstatistiken, die wir von https://www.ine.gob.cl/estadisticas/sociales/demografia-y-vitales/ bezogen haben. nacimientos-matrimonios-y-defunciones (abgerufen am 29. April 2024). Konkret haben wir Statistiken über die Zahl der Todesfälle für jede Kohorte verwendet, wobei Informationen von 2004 bis 2021 verfügbar waren, die die konsolidierten offiziellen Daten für die vorzunehmenden Schätzungen und Prognosen berücksichtigten.

Machine Translated by Google

Abbildung 1 zeigt die Entwicklung der Lebenserwartung der chilenischen Bevölkerung im Laufe der Zeit. Wir können beobachten, dass die Lebenserwartung in den letzten sechs Jahrzehnten kontinuierlich gestiegen ist. Dieser Anstieg der Lebenserwartung ist kein Einzelfall in Chile, sondern ein weltweiter Trend. Die Gründe für die Verbesserung der Lebenserwartung liegen in der nachhaltigen Verbesserung der Lebensqualität und in erhöhten Ausgaben für die Gesundheitsversorgung, neben anderen sozialen Variablen, die in der Literatur ausführlich untersucht wurden [30,31].

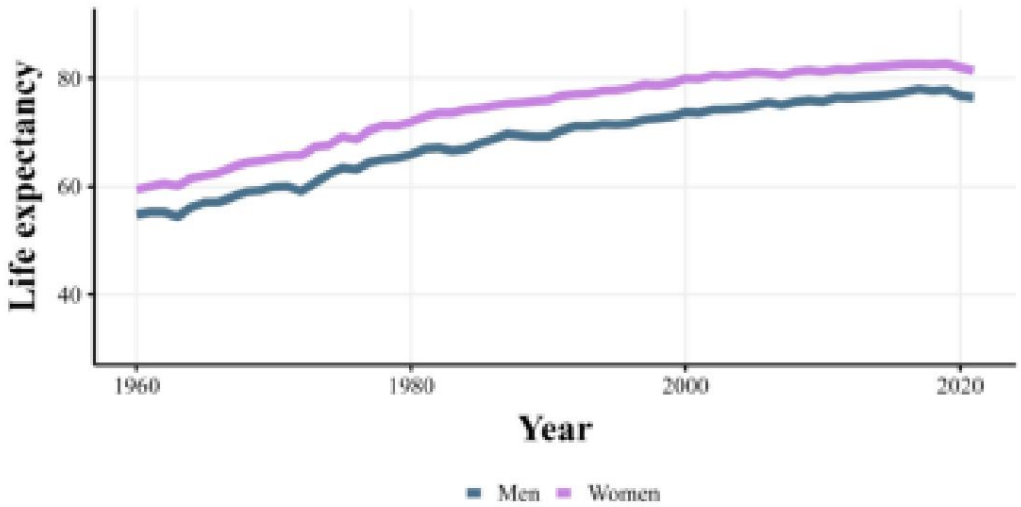


Abbildung 1. Entwicklung der Lebenserwartung in Chile.

Die Konzentration auf die Lebenserwartung macht es erforderlich, das Überleben für jede spezifische Kohorte zu modellieren und so verschiedene öffentliche Maßnahmen zu entwickeln, die sich an demografischen Aspekten orientieren. Wenn wir die statische Analyse jedoch auf eine zeitliche Analyse ausweiten, wirft dies Fragen zur Stabilität der Parameter auf , die die Sterblichkeit der Bevölkerung definieren, und bietet die Möglichkeit, methodische Verbesserungen für die Projektion der Lebenserwartung der Bevölkerung und ihrer Entwicklung im Laufe der Zeit zu entwickeln.

2.1. Gompertz-Makeham-Gesetz

Eines der bekanntesten und am weitesten verbreiteten Modelle zur Schätzung der Bevölkerungssterblichkeitsraten entspricht den ursprünglich von Gompertz [32] und Makeham [33] entwickelten Modellen und wird unter Verwendung der momentanen Sterblichkeitskraft ÿ(i) erstellt, wobei i dem Alter der jeweiligen Kohorte entspricht. Die Schätzung des Gompertz-Gesetzes erfordert die Schätzung zweier Parameter, die mit Standard-Statistiktechniken im Zusammenhang mit der Entwicklung des Alters der Bevölkerung geschätzt werden können. Die Entwicklung von Makeham fügt dem Schätzprozess jedoch einen dritten Parameter hinzu, der numerische Näherungstechniken erfordert, aber durch Berücksichtigung eines extrinsischen Sterblichkeitseffekts eine bessere Anpassung an die Bevölkerungsdaten liefert [34,35]. In dieser Forschung verwenden wir eine Version des Modells von Gompertz–Makeham, die wir als

$$\ddot{y}(i) = C + \frac{t^{(i\ddot{y}m)/b}}{B}, \quad (1)$$

Dabei entspricht der Parameter C dem äußeren Effekt der Sterblichkeit, b einer exponentiellen Anpassungskonstante und m einem Faktor, den wir als Gesetz des Bevölkerungsabnahmes über die Zeit interpretieren können und der mit der Lebenserwartung der Bevölkerung zusammenhängt. Weitere Referenzen zur Modellierung des Gompertz-Makeham-Gesetzes finden Sie unter [36,37].

Zur Berechnung der Sterbewahrscheinlichkeit im Folgezeitraum $q_{\ddot{u}}^{T} = 1 \ddot{y} p_{ich}^{T}$, wobei $p_{\ddot{u}}^{T} = \Pr(Ti \ddot{y} t)$, verwenden wir die folgende Definition der Überlebensfunktion

$$t p = \exp \ddot{y} i^{\ddot{u}} \quad \text{Die Gleichung lautet: } i+t \ddot{y}(s)ds . \quad (2)$$

Machine Translated by Google

Proposition 1. Nach dem Mortalitätsgesetz von Gompertz–Makeham (Gleichung (1)) mit C = 0 ist die Überlebenswahrscheinlichkeit bis zum Zeitraum t

$$(iÿ\ m)\ /\ b1\ ÿ\ etp = expei^{t/b} \quad . \tag{3}$$

Beweis. Aus den Gleichungen (1) und (2) folgt die folgende Definition

$$P_{\cdot\cdot}^{\tau} = \exp ÿ \int_{\cdot\cdot}^{ich+t} C + \frac{t^{(sÿm)/b}}{B} ds .$$

Wenn wir das bestimmte Integral der obigen Gleichung lösen, erhalten wir

$$P_{\cdot\cdot}^{\tau} \exp ÿ\ Ct + e \qquad (iÿm)/b1\ ÿ\ e = {}^{t/b} \quad .$$

Unter der Annahme von C = 0 beträgt die Überlebenswahrscheinlichkeit

$$P_{\cdot\cdot}^{\tau} \exp e \qquad (iÿm)/b1\ ÿ\ e = {}^{t/b} \quad .$$

□

Abbildung 2 zeigt die Entwicklung des Bevölkerungsrückgangs unter verschiedenen Parametern , ausgehend von einem Anfangsalter von 50 Jahren. Diese Abbildung veranschaulicht, wie die Bevölkerung mit zunehmendem Alter abnimmt, und ermöglicht die Prognose der Alterszusammensetzung der Bevölkerung, was die Entwicklung spezifischer, auf die soziale Realität zugeschni

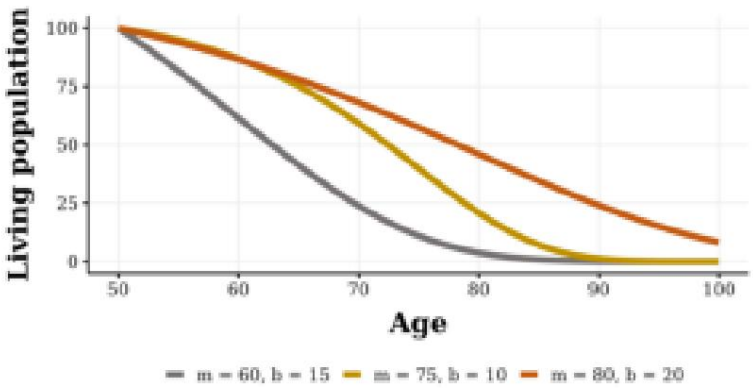


Abbildung 2. Verschiedene Überlebenskurven mit synthetischen Daten.

Um die Parameter schätzen zu können, die das Gompertz- Makeham-Gesetz definieren, ist es wichtig, die Sterblichkeitsdynamik verschiedener Bevölkerungskohorten zu verstehen . Mit Sterblichkeitsdaten aus verschiedenen Kohorten erstellen wir Anpassungen und Schätzungen der Parameterwerte für die Gleichung (3).

2.2. Sterblichkeitsraten

Die Sterberatentabellen werden für verschiedene Zwecke verwendet, beispielsweise zur Schätzung der Lebenserwartung und zur Berechnung der Höhe von Lebensrenten, um nur einige zu ne

Die Sterberatentabellen entsprechen einer Matrix von Werten, die zu einem bestimmten Zeitpunkt t zu einer bestimmten **Kohorte i** gehören , **was uns erlaubt, die zeitliche Entwicklung der Sterberaten zu verstehen . Wir definieren Xi,t = (x1,i,t , x2,i,t , ..., xNi ,i,t) als Vektor, der den Anteil der Überlebenden im folgenden Jahr für die Anzahl der Personen in der bestimmten Kohorte i zu einem Zeitpunkt t darstellt. Die Wahrscheinlichkeitsdichte jedes Elements des Vektors Xi,t wird wie folgt definiert:**

$$xn,i,t = F(ÿi,t), \tag{4}$$

Machine Translated by Google

wobei ÿi,t = (ÿ1,i,t , ÿ2,i,t , . . . ÿJ,i,t) dem Parametersatz der Kohorte i im Zeitraum t entspricht , **der das stochastische Verhalten der Elemente des Vektors Xi,t** definiert . **Wir beschreiben die Entwicklung der Parameterwerte, die die Dichtefunktion definieren, als**

$$\ddot{y}j,i,t = Hj(i, t) + \ddot{y}i,t , \quad (5)$$

wobei Hj(·) **einer bestimmten Funktion des Parameters j** entspricht, die von der Kohorte **i im Zeitraum** t **abhängt ; ŷt ÿ N(0,** *ÿ ÿ)* **entspricht einem Fehlerterm mit einer Normalverteilung** ²ÿ **der Varianz** *ÿ* . **Diese Beschreibung ermöglicht es uns, die Entwicklung der Parameterwerte, die das Überlebensverhalten von Mitgliedern einer bestimmten Kohorte definieren, als Zufallsphänon Als Beispiele für Funktionen, die die stochastische zeitliche Entwicklung von Parametern modellieren, können wir unter anderem die Autoren [38,39] nennen .**

Für diese Untersuchung nehmen wir an, dass die Funktion, die das Überleben eines Individuums aus Kohorte i für das folgende Jahr beschreibt, einer Zufallsvariablen entspricht, die Bernoulli- verteilt ist mit dem Parameter gi,t , wobei der Parameter gi,t als der ungefähre Anteil der Individuen in Kohorte i interpretiert werden kann , die im nächsten Zeitraum sterben werden,

$$xj,i,t \ddot{y} Bernoulli(gi,t). \quad (6)$$

Andererseits schlagen wir vor, dass sich der Parameter gi,t im Laufe der Zeit gemäß einem autoregressiven integrierten gleitenden Durchschnittsmodell (ARIMA) in Bezug auf dieselbe Kohorte entwickelt. In diesem Sinne entspricht der autoregressive Faktor derselben Kohorte dem natürlichen Überlebensfaktor in einem bestimmten Alter und der gleitende Durchschnitt hängt mit dem Verhalten des Fehlerterms zusammen. Wir beschreiben das ARIMA(S, 0, Z)-Modell und das ARIMA(S, 1, Z)-Modell in den folgenden Gleichungen

$$gi,t = \mu i + \sum_{s=1}^{S} \ddot{y}\,\ddot{y}i,sgi,t\ddot{y}s + \sum_{z=1}^{Z} \ddot{y}\,\ddot{y}i,z\ddot{y}i,t\ddot{y}z + \ddot{y}i,t , \quad (7)$$

$$\ddot{y}gi,t = \sum_{s=1}^{S} \ddot{y}\,\ddot{y}i,s\ddot{y}gi,t\ddot{y}s + \sum_{z=1}^{Z} \ddot{y}\,\ddot{y}i,z\ddot{y}i,t\ddot{y}z + \ddot{y}i,t . \quad (8)$$

Diese Formulierung ermöglicht es uns, die Entwicklung von Parametern im Laufe der Zeit zu verstehen und ihre Stabilität als Zufallsphänomen zu begreifen. Ein weiterer wichtiger Aspekt ist, dass sie uns ein interessantes Instrument zur Prognose des individuellen Überlebens und damit der Alterszusammensetzung der Gesellschaft bietet. Ein zu berücksichtigendes Element betrifft die Einschränkungen von Zeitreihentechniken bei der Prognose, insbesondere wenn sie sich über einen sehr großen Zeitraum erstrecken.

2.3. Schätzung von Parametern mit ABC-Techniken In

diesem Abschnitt definieren wir das Verfahren zur Parameterschätzung für das Gompertz-Gesetz mit Techniken, die auf der Bayesschen Inferenz basieren. In der Bayesschen Analyse wird der unbekannte Parameter, der das Sterblichkeitsverhalten der Bevölkerung definiert, als Zufallsvariable *ÿ* **mit einer Wahrscheinlichkeitsverteilung** *ÿ(ÿ) dargestellt,* **die als Vorverteilung bezeichnet wird. Die Vorverteilung fasst die anfänglichen Annahmen des Forschers über die Parameterwerte zusammen, die auf der Grundlage der durch die beobachteten Daten erbrachten Beweise akt**

Bei einem gegebenen Parametersatz ÿ folgen die beobachteten Daten X = x1, x2, . . . , xn einer Dichtefunktion f(X|ÿ), die ein parametrisches Modell mit dem Parameterwert ÿ definiert, der das Verhalten der Zufallsvariable bestimmt. Vor diesem Hintergrund können wir die gemeinsame Verteilung wie folgt definieren:

$$f(X, \ddot{y}) = f(X|\ddot{y})\ddot{y}(\ddot{y}), \quad (9)$$

Machine Translated by Google

und die Randdichte von X wird wie folgt definiert:

$$f(X) = f(X, ÿ)dÿ = f(X|ÿ)f(ÿ)dÿ. \quad (10)$$

Die bedingte Dichte von $ÿ$ bei den beobachteten Werten von X entspricht f(ÿ|X) und wird als Posterior-Verteilung bezeichnet. Die Posterior-Verteilung ist definiert als

$$\text{Posterior-Dichte } ÿ \text{ Wahrscheinlichkeit} \times \text{Prior-Dichte.} \quad (11)$$

Zu den modernen Techniken zur Schätzung der Posterior-Verteilungen von Parametern, die Zufallsphänomene definieren, zählen Methoden wie die Approximate Bayesian Computation (ABC). In der Literatur finden sich bemerkenswerte Erwähnungen unter anderem in [6,25–29]. ABC-Techniken umfassen eine Reihe von Akzeptanz-Ablehnungs-Algorithmen, die zusammenfassende Statistiken aus einer Zufallsstichprobe verwenden, die um einen Zielwert gruppiert ist, um die Posterior-Verteilung von Parametern zu schätzen. Diese Techniken haben aufgrund der einfachen Generierung unabhängiger Zufallsstichproben eine erhebliche Flexibilität bewiesen und ermöglichen Annäherungen an die wahren Parameterverteilungen, wenn eine a

Algorithmus 1 zeigt, wie ABC-Techniken zur Schätzung des Bevölkerungsrückgangs angewendet werden, wobei Gleichung (3) als Grundlage dient. Der Algorithmus geht zu Beginn von den folgenden Anforderungen aus: Nm entspricht der Anzahl Stichproben, die zur Berechnung einer Wahrscheinlichkeitsdichte der Parameter erforderlich sind; ÿm entspricht der a priori Dichte des Parameters m; ÿb entspricht der a priori Dichte des Parameters b; initial entspricht dem Anfangsalter, für das der Bevölkerungsrückgang geschätzt werden soll; terminal entspricht dem Endalter für die Beurteilung des Bevölkerungsrückgangs; Mortality entspricht der jährlichen Mortalität, auf deren Grundlage die Schätzung vorgenommen wird, und die aus den beobachteten Mortalitätsdaten einer Bevölkerung oder ihrer Projektion gewonnen werden kann ; und ÿ entspricht dem Fehlerwert, den wir für die Generierung der Wahrscheinlichkeitsdichte der Parameter zu akzeptieren bereit sind.

Algorithmus 1: Modellierung des Bevölkerungsrückgangs.

```
Erforderlich: N, ÿm, ÿb , Anfangs-, End-, Sterblichkeitsrate, ÿ.
  j ÿ 0
  solange j < N do m ÿ Uni
      f orm(0, ÿm) b ÿ Uni f orm(0, ÿb )
      population ÿ 1 popsim ÿ 1 für i
      = initial bis (terminal ÿ
      1) do population[i
      + 1] ÿ population[i] × (1 ÿ Mortalität[i]) (iÿm)/b 1 ÿ e 1/
          b popsim[i + 1] ÿ popsim[i] × (1 ÿ exp e end für terminal wenn ÿ
                                                                    )
          i = Anfangs |population[i] ÿ popsim[i]| < ÿ dann
          M[j] ÿ m
          B[j] ÿ bj
          ÿ j + 1
      Ende
  wenn Ende während
```

Einer der wichtigsten Schritte bei Bayes'schen Methoden ist die Auswahl der a priori- Parameter m und b . Eine geeignete Auswahl der a priori-Parameter verbessert die Schätzergebnisse der a posteriori-Verteilung [40] und beschleunigt die Berechnungen, wodurch die Anwendung dieser Methoden in vielen Fällen sinnvoll ist. Oftmals gibt es jedoch keine Informationen über die beste a priori-Verteilung, die verwendet werden kann, und es muss eine nicht informative Verteilung wie eine Gleichverteilung verwendet werden, wobei die Möglichkeit von Verzerrungen in den Ergebnissen in Betracht gezo

Machine Translated by Google

durch geeignete Auswahl der Vorverteilung korrigiert. In unserem Verfahren empfehlen wir, eine gleichmäßige Verteilung für die Charakterisierung der Vorverteilung zu verwenden, da uns keine Informationen über das Verhalten aller Mortalitätsparameter als Ganzes vorliegen.

Im nächsten Schritt müssen Werte für m und b nach dem Zufallsprinzip ausgewählt werden, wobei die für die Parameter ermittelten Prioren verwendet werden. Anschließend wird der Rückgang der tatsächlichen Sterblichkeit und der auf Grundlage der ausgewählten Parameter geschätzten Sterblichkeit berechnet. Sobald die tatsächlichen und auf Grundlage der ausgewählten Parameter ermittelten Abgänge vorliegen, wird die Differenz gemessen. Wenn die Differenz unter dem $\ddot{y}$- Wert liegt, wird sie akzeptiert und in die Vektoren M und B aufgenommen . Schließlich können wir die Posterior-Dichte unter Verwendung der Vektoren M und B berechnen.

Abbildung 3 zeigt eine Zusammenfassung der Methodik, die zur Schätzung der Überlebenskurven verwendet wurde. Zunächst müssen historische Mortalitätsdaten der Bevölkerung beschafft werden. Dadurch können wir den Wert der Mortalitätsparameter für jede Kohorte für jedes Jahr schätzen und so die Zeitreihe der geschätzten Parameterwerte erhalten. Zweitens projizieren wir die Parameterwerte für eine bestimmte Anzahl von Jahren, basierend auf der in den Gleichungen (7) und (8) beschriebenen Methodik. Drittens verwenden wir die Projektionen jeder Kohorte als Eingaben für Algorithmus 1 und erhalten so die Parameterdichten, die zur Kalibrierung der in Gleichung (3) beschriebenen Mortalitätskurve verwendet werden. Schließlich erhalten wir mithilfe der berechneten Dichten Zufallswerte für die Parameter in Gleichung (3) , um die Überlebensprojektion der Bevölkerung zu erhalten. Dies liefert eine Überlebensdichte für jedes der projizierten Altersgruppen, die für einige soziale Anwendungen im Zusammenhang mit der Bevölkerungsprojektion verwendet werden kann.

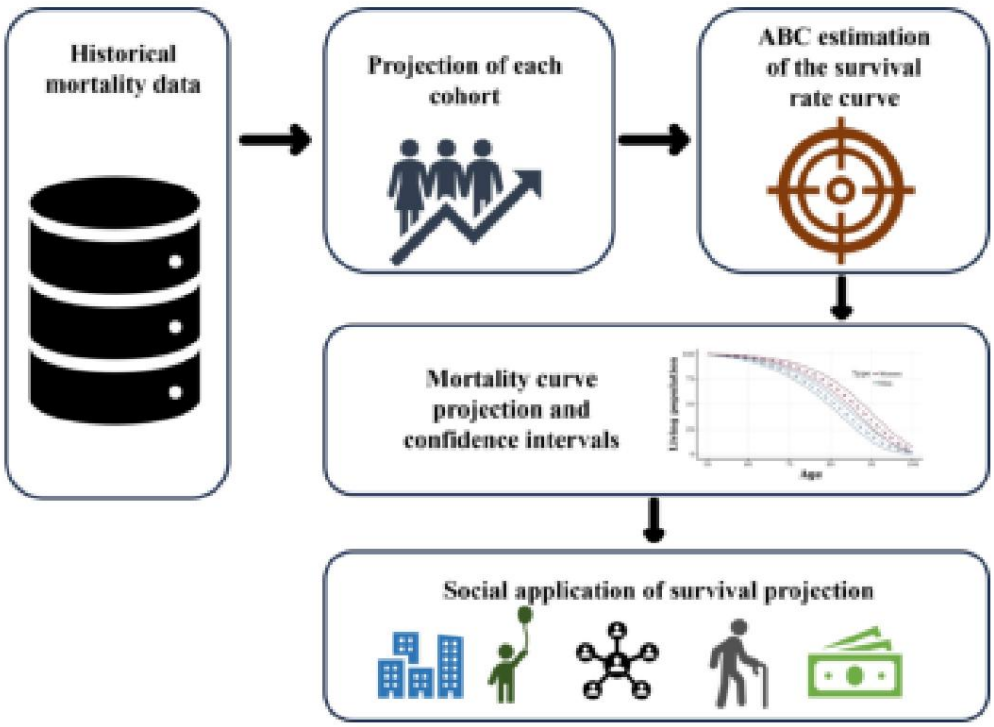


Abbildung 3. Zusammenfassung der in der Forschung verwendeten Methodik.

3. Ergebnisse

In diesem Abschnitt präsentieren wir die Ergebnisse der in den vorherigen Abschnitten vorgeschlagenen Methodik. Zunächst zeigen wir in Tabelle 1 die Ergebnisse einiger Regressionen, die bei der Schätzung der Projektionen der Parameterentwicklung im Zeitverlauf durchgeführt wurden, basierend auf dem allgemeinen Ausdruck der Gleichungen (7) und (8) für 2030. In diesem Fall haben wir das ARIMA-Modell mit den niedrigsten AIC-Kriterien ausgewählt , das die Kombination eines Modells mit geringer Varianz und einer begrenzten Anzahl zu schätzender Parameter ermöglicht , ein grundlegendes Element aufgrund der begrenzten Anzahl von Beobachtungen für jede Kohorte. Die Spalten AR, I und MA entsprechen der Anzahl der autoregressiven, Wir integrieren auch die Informationen der AIC- und BIC-Werte für die ausgewählten Modelle.

Machine Translated by Google

Tabelle 1. Parameterschätzung für eine ausgewählte Kohortenstichprobe.

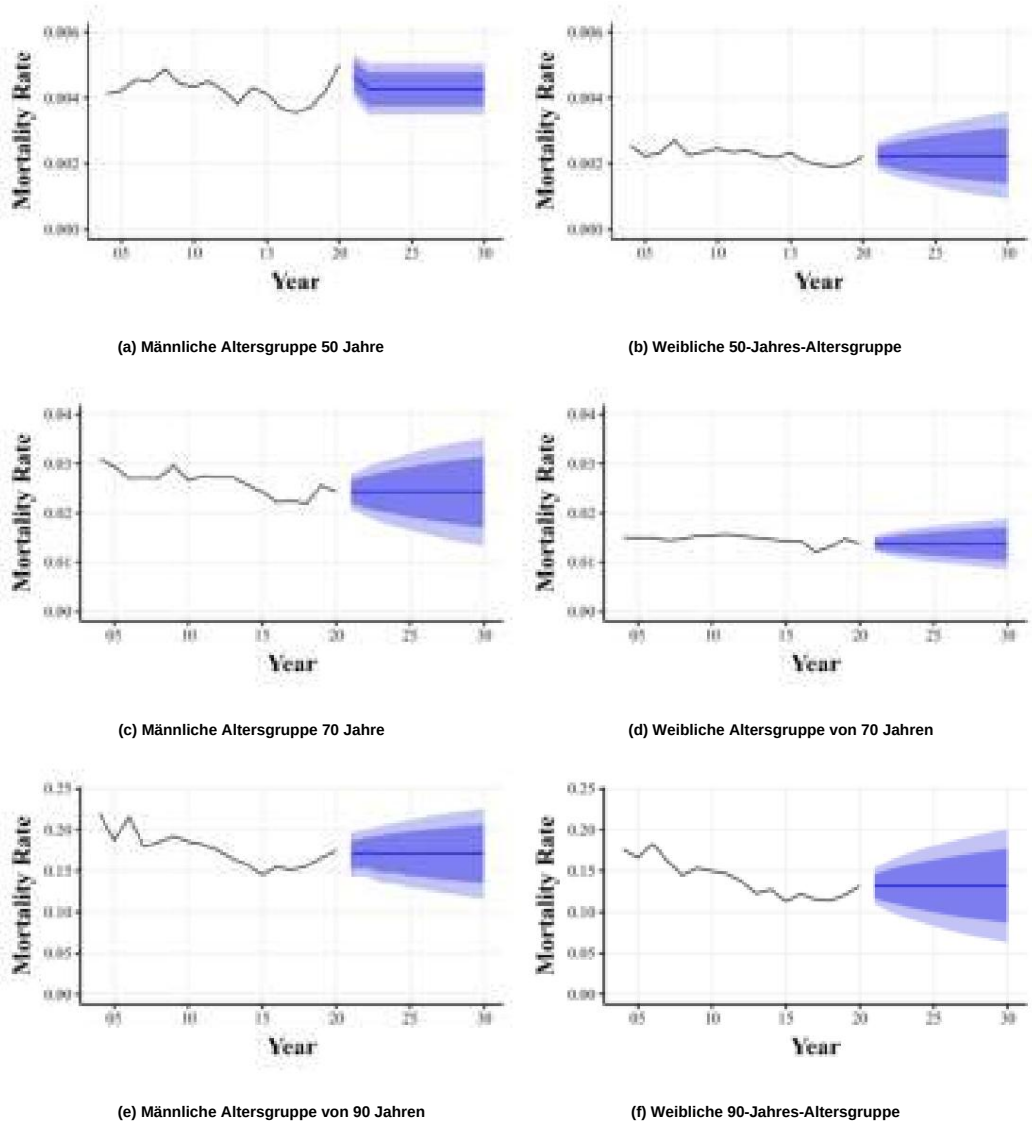
		AR	ICH	MA	AIC	Bankleitzahl
Weiblich	Alter 50	0		0	ÿ223,06	ÿ222,29
	Alter 55	0	1	0	ÿ241,18	ÿ239,51
	Alter 60	0	0 1	0	ÿ193,29	ÿ192,81
	Alter 65	0	1	0	ÿ195,04	ÿ194,27
	Alter 70	0	1	0	ÿ179,70	ÿ178,92
	Alter 75	0	1	0	ÿ158,23	ÿ157,46
	Alter 80	0	1	0	ÿ138,95	ÿ138,17
	Alter 85	0	1	0	ÿ121,86	ÿ121,09
	Alter 90	0	1	0	ÿ96,52	ÿ95,75
Männlich	Alter 50	0	0	1	ÿ218,45	ÿ215,95
	Alter 55	0	0	0	ÿ203,69	ÿ202,03
	Alter 60	0	1	0	ÿ176,22	ÿ175,45
	Alter 65	0	1	0	ÿ172,06	ÿ171,28
	Alter 70	0	1	0	ÿ155,15	ÿ154,38
	Alter 75	0	1	0	ÿ135,20	ÿ134,42
	Alter 80	0	1	0	ÿ129,22	ÿ128,45
	Alter 85	0	1	0	ÿ102,55	ÿ101,78
	Alter 90	1	1	0	ÿ89,32	ÿ87,77

Die Ergebnisse zeigen eine Heterogenität der Ergebnisse bei der Auswahl des besten Modells. In manchen Fällen genügt die Eliminierung des Trends durch Differenzbildung, um einen stationären Prozess, während in anderen Fällen die autoregressiven und gleitenden Durchschnitte berücksichtigt werden müssen Komponenten, um einen stationären Prozess zu erhalten.

Auf der Grundlage der ausgewählten Modelle erstellen wir dann Prognosen für die nächsten 10 Jahre, die gibt uns die möglichen Ergebnisse für den Parameter, der die Mortalität jedes Kohortenwertes definiert mit 95%iger Sicherheit. Diese Projektion ist in Abbildung 4 dargestellt, die Projektionen für Männer und Frauen im Alter von 50, 70 und 90 Jahren. Generell können wir feststellen, dass für alle Projektionen Die Sterblichkeitsrate bei Männern ist höher als bei Frauen, was auf einen signifikanten Unterschied hindeutet die Altersstruktur der älteren Bevölkerung. Mit diesen Projektionen können wir die Überlebenskurve, die in Gleichung (3) beschrieben ist, unter Verwendung der Methodik der Parameterschätzung unter Verwendung der in Algorithmus 1 beschriebenen ABC-Techniken , die ein notwendiges Element für die Generation sozialer Anwendungen, die den Einsatz von Bevölkerungsprognosen erfordern.

Tabelle 2 zeigt die Schätzung der Parameter für Gleichung (2), die das Verhalten beschreiben des Bevölkerungsrückgangs für Männer und Frauen, der als Hauptergebnis des Algorithmus 1 erhalten wurde. Die Schätzung verwendet den erwarteten Wert der Projektion der Parameter, die bestimmen die Sterberate für jede Kohorte; der 5. Perzentilfall entspricht dem besten Fall Szenario für jede der Kohorten, da es das Szenario mit der niedrigsten Sterblichkeit darstellt, auf das sich die Bevölkerung könnte ausgesetzt werden und der 95. Perzentilfall entspricht dem schlimmsten Fall Sterberate für jede Kohorte. Die Spalten geben den Durchschnittswert und den Standardwert an. Abweichung für die Parameter m und b für jeden der Fälle. Wir können beobachten, dass die Szenarien für den Parameter m für Männer liegen sie zwischen 79,34 und 90,14, während sie für den Parameter b zwischen zwischen 11,12 und 11,79; bei Frauen liegt der Parameter m zwischen 85,48 und 95,30 und Parameter b zwischen 9,57 und 11,30.

Machine Translated by Google



(a) Männliche Altersgruppe 50 Jahre

(b) Weibliche 50-Jahres-Altersgruppe

(c) Männliche Altersgruppe 70 Jahre

(d) Weibliche Altersgruppe von 70 Jahren

(e) Männliche Altersgruppe von 90 Jahren

(f) Weibliche 90-Jahres-Altersgruppe

Abbildung 4. Projektion des Parameters p für verschiedene Altersgruppen und Geschlechter.

Tabelle 2. Schätzung der Bevölkerungsabnahmeparameter für Männer und Frauen.

	M		B	
	Bedeuten	SD	Bedeuten	SD
Männlicher Mittelwert	83,39	0,60	11.12	0,96
Männlich niedrig	79,34	0,56	11,21	1.04
Männlich hoch	90,14	0,56	11,79	0,86
Weiblicher Mittelwert	88,92	0,64	9,95	0,79
Weiblich niedrig	85,48	0,62	9,57	0,77
Weiblicher Hoch	95,30	0,96	11,30	1.08

Abbildung 5 zeigt die Verschiebung der Überlebenskurve für Männer und Frauen unter Verwendung der Mittelwert der in Tabelle 2 angegebenen Parameter und verglichen mit der geschätzten Mortalität Kurve für 2000 als Basislinie. Es wird beobachtet, dass es in beiden Fällen eine Verbesserung gibt der Lebenserwartung, die sich auf die Altersstruktur der älteren Bevölkerung auswirkt und haben einen erheblichen Einfluss auf andere damit verbundene Elemente, wie etwa die Schätzung der Renten und Gesundheitsdienste, um nur einige zu nennen.

Machine Translated by Google

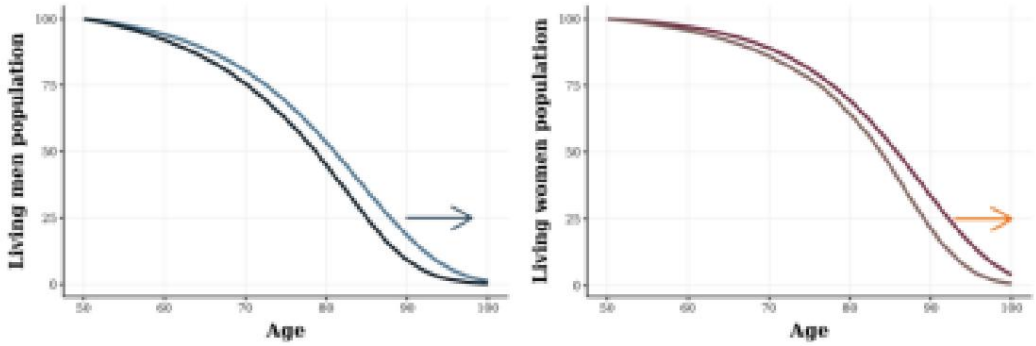


Abbildung 5. Entwicklung der Projektion für den erwarteten Wert des Bevölkerungsrückgangs. Die Verschiebung nach rechts impliziert eine Verbesserung der Lebenserwartung der Bevölkerung.

Abschließend generieren wir Konfidenzbänder für die Schätzung des Bevölkerungsabnahmeprozesses unter Verwendung der Werte, die dem 5. und 95. Perzentil der Projektionen der oben definierten Parameter zugeordnet sind, und verwenden Algorithmus 1 zur Abbildung 6 zeigt die Bevölkerungsabnahmeprojektion für Männer und Frauen mit den jeweiligen Konfidenzbändern. Es ist erwähnenswert, dass dieses Verfahren Konfidenzbänder generiert, die den „besten“ und „schlechtesten“ Fall in Bezug auf die Schätzung der Sterberatenparameter berücksichtigen, was diese Konfidenzbänder zu konservativen Szenarien in Bezug auf die Schätzung der Bevölkerungsabnahmeprojektion macht. Zur Generierung von Konfidenzbändern unter Berücksichtigung bestimmter Perzentile müssen für jede der Kohorten unabhängige Simulationen durchgeführt werden . Dann **muss** das in Algorithmus **1 definierte Parameterschätzungsverfahren für eine ausreichend große Anzahl jeder der Kohorten durchgeführt werden, um die Dichte der Abnahmeprojektion zu erhalten.**

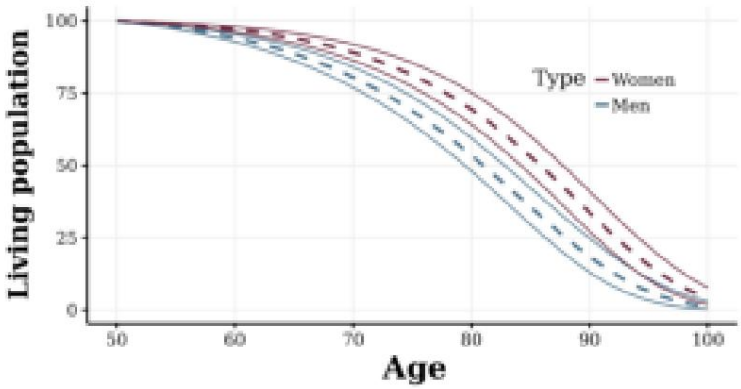


Abbildung 6. Schätzung der Bevölkerungsprognosen bis 2030. Die gepunkteten Linien entsprechen dem Mittelwert der Prognosen.

Bestimmung der Leibrente

Um zu verstehen, wie sich die vorgeschlagene Methode erheblich auf verschiedene Anwendungen auswirkt , gehen wir mit einem einfachen Beispiel der Ermittlung der Lebensrente eines Bürgers vor. In diesem Zusammenhang betrachten wir einen Mann, der im Alter von 65 Jahren mit einem angesparten Betrag von 100.000 USD in Rente geht. Darüber hinaus verwenden wir die Sterblichkeitsdaten von 2010 als Basis und vergleichen sie mit den Bevölkerungsdichteprognosen für 2030, die erstellt und in den Ergebnissen angezeigt werden. Die Lebensrente des Bürgers wird wie folgt berechnet:

$$\text{Lebensrenten} = \frac{Ws/(1 + ÿ))}{KI}, \quad (12)$$

wobei Ws dem Vermögen entspricht, über das die Person s zum Zeitpunkt des Renteneintritts verfügt; *ÿ* entspricht der Provision der Versicherungsgesellschaften beim Ange

Machine Translated by Google

den wir für dieses Beispiel als Null annehmen; ai entspricht dem versicherungsmathematischen Rentenfaktor (siehe [41]) im Alter i, was sich wie folgt berechnen lässt:

$$a_i = \ddot{y}_{t=0}^{\ddot{y}} \frac{P_{__}^{T}}{(1+r)^t} \quad (13)$$

wobei $p_{__}^{T}$ entspricht der in Gleichung (3) definierten Funktion , die die Wahrscheinlichkeit definiert des Überlebens im Rentenalter i in t Jahren in der Zukunft, und r stellt die effektive jährliche Bewertungssatz, der zur Diskontierung der Cashflows verwendet wird, den wir für dieses Beispiel als Wert betrachten von 3%.

Tabelle 3 zeigt die Schätzwerte für die Berechnung der Leibrente für einen Mann Pensionierung mit 65 Jahren. Die erste und fünfte Spalte entsprechen dem Alter der Person; der zweite und sechste entsprechen dem verwendeten Abzinsungsfaktor (3% pro Jahr); der dritte und Die siebte Spalte entspricht der geschätzten Überlebensrate des Individuums bis zum Alter der entsprechenden Zeile unter Berücksichtigung der Todesfälle von 2010; und schließlich die vierte und achte Spalte entsprechen der dritten und siebten Spalte, allerdings für die Projektion auf das Jahr 2030.

Tabelle 3. Werte zur Schätzung der Leibrente.

Alter	$1/(1+i)^T$	$P^T_{ich,2010}$	$P^T_{ich,2030}$	Alter	$1/(1+i)^T$	$P^T_{ich,2020}$	$P^T_{ich,2030}$
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

Schließlich zeigt Tabelle 4 die Ergebnisse der Berechnung der Leibrente für den 65-jährigen Rentner. Die erste Spalte entspricht der Schätzung der versicherungsmathematischen R Faktor, unter Berücksichtigung der Todesfälle im Jahr 2010; die zweite Spalte entspricht der Schätzung von der versicherungsmathematische Rentenfaktor, jetzt jedoch unter Berücksichtigung der Projektion für 2030; der dritte und vierte Spalten entsprechen der berechneten Annuität; und die fünfte Spalte zeigt den Prozentsatz Variation zwischen den Renten. Es wird beobachtet, dass mit der Verbesserung der Lebenserwartung, basierend auf der vorgeschlagenen Methode sinken die Renten, je länger die Menschen leben. Der Betrag muss über eine längere erwartete Lebensdauer verteilt.

Tabelle 4. Ergebnisse zu den Auswirkungen der Entwicklung der Sterblichkeit.

$a_{i,2010}$	$a_{i,2030}$	lebensdauer_annuity2010	lebensdauer_annuity2030	Variation %
11.887	12.571	8412	7955	ÿ5,43 %

Machine Translated by Google

4. Diskussion

Die Debatte über die Gesundheit und ihre verschiedenen Auswirkungen auf die Bevölkerung ist in verschiedenen Ländern auf der ganzen Welt ein Aspekt von wiederkehrender und erheblicher Bedeutung im Zusammenhang mit bürgerschaftlichen, politischen und wirtschaftlichen Notlagen .

Die Literatur zeigt, dass ein wachsender Bedarf an einer angemessenen Schätzung der Lebenserwartung besteht, um Bevölkerungsdynamiken vorherzusagen und politische Entscheidungen zu treffen [42,43]. Die Einführung neuer Schätzmethoden bietet jedoch einen neuen Rahmen für diese Prognosen.

In diesem Sinne erlauben uns die drei Schritte der in dieser Untersuchung vorgeschlagenen Methodik, (1) Schätzung der Überlebenskurve der Bevölkerung, (2) Projektion der Parameter, die die Mortalität jeder Kohorte bestimmen, und (3) Schätzung der Parameter mit Hilfe einer Bayes'schen Methode , die Projektionen der Überlebenskurven als Zufallsphänomen zu verstehen, im Gegensatz zu den meisten Näherungen, die in der Literatur vorgenommen werden [36,37,44].

Die angemessene Schätzung von Überlebenskurven stellt aufgrund der Heterogenität der Bevölkerung ein inhärentes Problem dar. Länder mit hohem Einkommen haben eine höhere Lebenserwartung aufgrund der Behandlung von Krankheiten [3] und des Unterschieds zwischen der ländlichen Bevölkerung gegenüber der städtischen Bevölkerung [45], neben anderen Variationsquellen, was es komplex macht, eine einzige Funktion zu haben, die die Entwicklung der Bevölkerung mit zunehmendem Alter beschreibt.

Die vorgeschlagene Methodik ermöglicht es uns , mithilfe der in dieser Untersuchung vorgestellten Bayes-Methodik eine Vielzahl möglicher Ergebnisse für die Bevölkerungsprognose zu generieren und berücksichtigt dabei sowohl technologische Veränderungen, die zu einer drastischen Verbesserung der Lebenserwartung führen können , als auch Katastrophen, die zu einem Anstieg der Sterblichkeit führen können.

Die Ergebnisse der Studie zeigen einen Unterschied in der Einschätzung der Parameter, die die Überlebenskurve von Männern und Frauen definieren. Dies zeigt ein differenziertes Verhalten, das eine neue Prognose der Bevölkerungspyramide erfordert, die wesentliche Elemente für die Entwicklung einer geschlechtsspezifischen öffentlichen Politik mit Fokus auf ältere Menschen sind. Diese allgemeinen Ergebnisse deuten darauf hin, dass ein erheblicher Anteil älterer Frauen in naher Zukunft spezialisierte soziale Dienste benötigen wird.

Andererseits können wir als Zwischenergebnis die Schätzung von Modellen beobachten, die die zeitliche Entwicklung der Mortalitätsparameter jeder Kohorte der Bevölkerung definieren. Generell können wir beobachten, dass bei einem erheblichen Anteil der Kohorten das beste Modell, das den zeitlichen Verlauf der Parameter definiert, auf einer einfachen Differenzbildung basiert; andere Kohorten erstellen jedoch komplexere Modelle für die Dynamik.

Generell können wir erwähnen, dass die Methodik Flexibilität innerhalb verschiedener Populationen und anderer Anwendungen ermöglicht, bei denen die Überlebensdynamik einer Population ermittelt werden muss.

Unser Ansatz unterscheidet sich von anderen wichtigen Methoden wie der Schätzung von Mortalitätskurven [19,46–48]. In unserem Fall betrachten wir die Projektion der Parameter, die die Mortalität definieren, als grundlegenden Input für die Schätzung von Mortalitätskurven. Darüber hinaus ermöglicht uns die vorgeschlagene Methodik, die als modulare Komponenten konzipiert ist – wobei die Verwendung des Gompertz- Makeham-Gesetzes eines dieser Module ist –, andere Schätzansätze für Mortalitätskurven zu verwenden, die als Modellkontraste dienen können.

Ein wichtiges zu berücksichtigendes Element ist die Auswahl der **im Algorithmus implementierten Vorverteilung .** In unserem Fall wird **für die Methodik eine nicht informative Verteilung (Gleichverteilung) verwendet, wobei Rechenkosten und potenzielle Verzerrungen aufgrund der unzureichenden Auswahl der Verteilung** angenommen werden [40]. Dieser Punkt sollte bei zukünftigen **Untersuchungen mit einer größeren Menge an für Schätzungen verfügbaren Daten berücksichtigt werden,** da kleine Schwankungen **in den Schätzungen erhebliche Auswirkungen auf die Projektionen haben k**

5. Schlussfolgerungen

In der vorliegenden Untersuchung haben wir offizielle Daten der chilenischen Regierung zu Statistiken zur Sterblichkeit verwendet. Konkret wurden Statistiken zur Anzahl der Todesfälle für jede Kohorte verwendet, wobei Informationen von 2004 bis 2021 verfügbar waren, wobei die konsolidierten offiziellen Daten für die vorzunehmenden Schätzungen und Prognosen berücksichtigt wurden.

Machine Translated by Google

Es lässt sich beobachten, dass die Lebenserwartung in den letzten sechs Jahrzehnten stetig gestiegen ist. Dieser Anstieg der Lebenserwartung ist kein Einzelfall in Chile, sondern ein globales Phänomen. Die Gründe für die Verbesserung der Lebenserwartung liegen in der anhaltenden Verbesserung der Lebensqualität und den steigenden Ausgaben für medizinische Leistungen sowie in anderen sozialen Variablen, die in der Literatur ausführlich untersucht wurden.

Wir haben eine Methode zur Schätzung der Kurven entwickelt, die die Lebenserwartung bestimmen. Sie basiert auf der zeitlichen Entwicklung der Parameter, die die Sterblichkeit der Bevölkerung bestimmen, und verwendet dazu ein ARIMA-Modell. Diese Methode basiert auf der Projektion der Parameter, um anschließend die Gompertz-Makeham-Kurve zu schätzen. Dabei kommt ein Bayes- Ansatz zum Einsatz, der als Approximate Bayesian Computation (ABC) bekannt ist.

Tatsächlich können Forschungsarbeiten wie die hier vorgestellten dazu beitragen, Arbeitsschwerpunkte, Monitoring und die Umsetzung von Maßnahmen zu definieren, um die festgestellten Schwächen in öffentlichen Systemen zu beheben, die ihre Dienstleistungen auf der Lebenserwartung der Bevölkerung basieren, erhebliche Auswirkungen auf die Wirtschaft haben und heute im Hinblick auf Renten- und Gesundheitssysteme ein hohes Maß an öffentlicher Aufmerksamkeit und Kontrolle seitens der für diese Dienstleistungen verantwortlichen Politiker und Arbeitgeber erfahren.

Die vorgestellte Methodik ermöglicht die Ermittlung des Mittelwerts der Verschiebung der Überlebenskurve für die Bevölkerung über 50 Jahre sowie die Projektionen des besten und des schlechtesten Szenarios, die als Konfidenzbänder für die Prognose des Überlebens der Bevölkerung interpretiert werden können.

Der Literatur zufolge könnte die Bedeutung des Gesundheitsbereichs für das Wirtschaftswachstum ein Arbeits- und Planungspfad für die beteiligten Parteien sein, mit dem Ziel, sich auf eines ihrer vorrangigen Probleme zu konzentrieren, wie etwa die Wiederbelebung der Wirtschaft mit dem Ziel, Wachstumsraten zu erzielen, was ein Grund dafür ist, dass dieser Bereich auf internationaler Ebene von Interesse ist, die Armut drastisch zu reduzieren und das Pro-Kopf-Einkommen zu erhöhen.

Was Einschränkungen und zukünftige Richtungen betrifft, planen wir, uns mit extremen Bedingungen wie Finanzkrisen oder Pandemien zu befassen und dabei alternative Methoden zur Entropieschätzung, wie die histogrammbasierte Methode, zu verwenden, um die Vorhersagbarkeit der Überlebenskurven in Chile mithilfe der Methode der maximalen Entropie zu bewerten, wobei wir Daten zur extremen Volatilität einbeziehen, die von sozialen Kontexten beeinflusst werden. Darüber hinaus könnte diese Studie als vergleichende Projektion das strategische Gewicht einer Reihe von Variablen analysieren, die im Mittelpunkt öffentlicher und privater Diskussionen standen , wie Bildung, Nachhaltigkeit, ökologisches Gleichgewicht, psychische Gesundheit, Gleichstellung der Geschlechter, die Modernisierung des Staates und die Demokratisierung digitaler Technologien.

Beiträge der Autoren: Datenkuratierung, HdlF-M., KC-J., CE-G. und RR-T.; formale Analyse, HdlF-M., KC-J. und RR-T.; Untersuchung, HdlF-M., KC-J., CE-G. und RR-T.; Methodik, HdlF-M., KC-J., CE-G. und RR-T.; Schreiben – Originalentwurf, HdlF-M., KC-J., CE-G. und RR-T.; Schreiben – Überprüfung und Bearbeitung, HdlF-M., KC-J., CE-G. und RR-T. Alle Autoren haben die veröffentlichte Version des Manuskripts gelesen und ihr zugestimmt.

Finanzierung: Die Forschungsarbeit von H. de la Fuente-Mella wurde teilweise vom Proyecto FONDECYT Regular unterstützt. Code des Projekts: 1230881. Agencia Nacional de Investigación y Desarrollo de Chile (ANID).

Erklärung zur Datenverfügbarkeit: Die zur Untermauerung der Ergebnisse dieser Studie verwendeten Daten sind auf Anfrage beim entsprechenden Autor erhältlich.

Interessenkonflikte: Die Autoren erklären, dass keine Interessenkonflikte vorliegen.

Verweise

1. Alaimo, LS; Levantesi, S.; Nigri, A. Fuzzy-Clustering der Zerlegung der gesunden Lebenserwartung: Eine Multipopulationsanalyse. Sozioökonomischer Plan. Sci. 2024, 92, 101805. [CrossRef]
2. Cho, H.; Wang, Z.; Yabroff, KR; Liu, B.; McNeel, T.; Feuer, EJ; Mariotto, AB Schätzung der Lebenserwartung, angepasst an den selbst eingeschätzten Gesundheitszustand in den Vereinigten Staaten: Nationale Gesundheitsinterviewumfrage im Zusammenhang mit der Sterblichkeit. BMC Public Health 2022, [Querverweis] [PubMed]

Machine Translated by Google

3. Jung, M.; Ko, W.; Muhwava, W.; Choi, Y.; Kim, H.; Park, YS; Jambere, GB; Cho, Y. Mind the gaps: Alters- und ursachenspezifische Mortalität und Lebenserwartung in der älteren Bevölkerung Südkoreas und Japans. BMC Public Health 2020, 20, 819. [CrossRef] [PubMed]
4. Roubal, AM; Pollock, EA; Gennuso, KP; Blomme, CK; Givens, ML Vergleichende methodologische und praktische Überlegungen zur Lebenserwartung als Sterblichkeitsmaß der öffentlichen Gesundheit. Public Health Rep. 2022, 137, 255–262. [CrossRef] [PubMed]
5. Congdon, P. Lebenserwartung für kleine Gebiete: Eine Bayesianische Zufallseffektmethode. Int. Stat. Rev. 2009, 77, 222–240. [Querverweis]
6. Peters, GW; Fan, Y.; Sisson, SA Über sequentielles Monte Carlo, partielle Zurückweisungskontrolle und ungefähre Bayes-Berechnung. Stat. Comput. 2012, 22, 1209–1222. [CrossRef]
7. Brønnum-Hansen, H.; Foverskov, E.; Andersen, I. Einkommensungleichheit in der Lebenserwartung und der behinderungsfreien Lebenserwartung in Dänemark. J. Epidemiol. Community Health 2021, 75, 145–150. [CrossRef]
8. Camargos, MCS; do Nascimento Rodrigues, R.; Machado, CJ Gesunde Lebenserwartung für brasilianische Älteste, 2003. Ciência Saúde Coletiva 2009, 14, 1903. [CrossRef]
9. Sandoval, MH; Alvear Portaccio, ME; Albala, C. Lebenserwartung nach ethnischer Herkunft in Chile. Vorderseite. Public Health 2023, 11, 1147542. [Querverweis]
10. DuGoff, EH; Canudas-Romo, V.; Buttorff, C.; Leff, B.; Anderson, GF Mehrere chronische Erkrankungen und Lebenserwartung: Eine Sterbetabellenanalyse . Med. Care 2014, 52, 688–694. [CrossRef]
11. Tyrer, F.; Chudasama, YV; Lambert, PC; Rutherford, MJ Flexible parametrische Methoden zur Berechnung der Lebenserwartung in kleinen Bevölkerungen. Popul. Health Metrics 2023, 21, 13. [CrossRef] [PubMed]
12. Kamerud, DB Mortalitätsrisiko und Lebenserwartung. J. Oper. Res. Soc. 1989, 40, 199–200. [CrossRef]
13. Wajiga, G.; Adekola, OA Lebenserwartung in einer nicht homogenen Bevölkerung. J. Oper. Res. Soc. 1998, 49, 1011–1012. [CrossRef]
14. Ho Dang, P.; Nguyen, TN Neue Methoden zur Schätzung der Lebenserwartung. Environ. Ecol. Stat. 2022, 29, 587–606. [CrossRef]
15. Cairns, AJ; Blake, D.; Dowd, K.; Coughlan, GD; Khalaf-Allah, M. Bayesianische stochastische Mortalitätsmodellierung für zwei Populationen. ASTIN Bull. J. IAA 2011, 41, 29–59.
16. Pham, H.; Pham, HT Ein Bayesianischer Ansatz für mehrstufige Modelle mit linearer zeitabhängiger Ausfallrate. Monte Carlo Methoden Appl. 2019, 25, 307–316. [CrossRef]
17. Kim, Y.; Kang, SB; Berliner, LM Bayesianische Diffusionsprozessmodelle mit zeitabhängigen Parametern. J. Korean Stat. Soc. 2012, 41, 137–144. [CrossRef]
18. Poon, A.; Zhu, D. Ein neues Bayes-Modell für Ansteckung und Interdependenz. Econom. Rev. 2022, 41, 806–826. [CrossRef]
19. Li, H.; Tan, KS; Tuljapurkar, S.; Zhu, W. Das Gompertz-Gesetz neu betrachtet: Sterblichkeitsprognose mit einem mehrfaktoriellen Exponentialmodell. Vers. Math. Econ. 2021, 99, 268–281. [CrossRef]
20. Colchero, F.; Kiyakoglu, BY Über das proportionale Gebrechlichkeitsmodell hinaus: Bayesianische Schätzung der individuellen Heterogenität auf die Sterblichkeit Parameter. Biom. J. 2020, 62, 124–135. [CrossRef]
21. Melnikov, A.; Romaniuk, Y. Bewertung der Leistung von Gompertz-, Makeham- und Lee-Carter-Mortalitätsmodellen für Risiko Management mit fondsgebundenen Verträgen. Insur. Math. Econ. 2006, 39, 310–329. [CrossRef]
22. Yan, H.; Peters, GW; Chan, J. Mortalitätsmodelle mit Langzeitgedächtnis zur Schätzung von Sterbetabellen: Eine umfassende Analyse. 2021, 15, 567–604. [CrossRef]
23. Delwarde, A.; Denuit, M.; Eilers, P. Glättung der log-bilinearen Modelle von Lee–Carter und Poisson zur Prognose der Sterblichkeit: bestrafter Log-Likelihood-Ansatz. Stat. Modell. 2007, 7, 29–48. [CrossRef]
24. Giacometti, R.; Bertocchi, M.; Rachev, ST; Fabozzi, FJ Ein Vergleich des Lee–Carter Modells und des AR–ARCH Modells für Prognose der Sterberaten. Insur. Math. Econ. 2012, 50, 85–93. [CrossRef]
25. Beaumont, MA; Cornuet, JM; Marin, JM; Robert, CP Adaptive approximative Bayesian calculation. Biometrika 2009, 96, 983–990. [CrossRef]
26. Toni, T.; Welch, D.; Strelkowa, N.; Ipsen, A.; Stumpf, MP Näherungsweises Bayesianisches Berechnungsschema für Parameterinferenz und Modellauswahl in dynamischen Systemen. JR Soc. Interface 2008, 6, 187–202. [CrossRef] [PubMed]
27. Sisson, SA; Fan, Y.; Tanaka, MM Sequentielles Monte Carlo ohne Wahrscheinlichkeiten. Proc. Natl. Acad. Sci. USA 2007, 104, 1760–1765. [Querverweis] [PubMed]
28. Marjoram, P.; Molitor, J.; Plagnol, V.; Tavaré, S. Markov-Kette Monte Carlo ohne Wahrscheinlichkeiten. Proc. Natl. Acad. Sci. USA 2003, 100, 15324–15328. [CrossRef]
29. Rubilar-Torrealba, R.; Chahuán-Jiménez, K.; de la Fuente-Mella, H. Eine stochastische Analyse der Auswirkungen von Handelsparametern auf die Stabilität der Finanzmärkte unter Verwendung eines Bayes'schen Ansatzes. Mathematics 2023, 11, 2527. [CrossRef]
30. Roffia, P.; Bucciol, A.; Hashlamoun, S. Determinanten der Lebenserwartung bei der Geburt: Eine Längsschnittstudie in OECD-Ländern. Int. J. Gesundheitsökonomie. Manag. 2023, 23, 189–212. [CrossRef]
31. Kabir, M. Determinanten der Lebenserwartung in Entwicklungsländern. J. Dev. Areas 2008, 41, 185–204. [CrossRef]
32. Gompertz, B. Über die Natur der Funktion, die das Gesetz der menschlichen Sterblichkeit ausdrückt, und über eine neue Methode zur Bestimmung des Wertes von Lebensereignissen. In einem Brief an Francis Baily, Esq. FRS &c. Von Benjamin Gompertz, Esq. FR S. Philos. Trans. R. Soc. Lond. 1825, 115, 252–253.
33. Makeham, WM Über das Gesetz der Sterblichkeit und die Erstellung von Rententabellen. J. Inst. Actuar. 1860, 8, 301–310. [CrossRef]
34. Hallén, A. Makehams Ergänzung zum Gompertz-Gesetz neu bewertet. Biogerontology 2009, 10, 517–522. [CrossRef] [PubMed]

Machine Translated by Google

35. Golubev, A. Wie konnte das Gompertz-Makeham-Gesetz entstehen? J. Theor. Biol. 2009, 258, 1–17. [CrossRef]
36. Missov, TI Gamma-Gompertz-Lebenserwartung bei der Geburt. Demogr. Res. 2013, 28, 259–270. [CrossRef]
37. Missov, TI; Lenart, A. Gompertz–Makeham Lebenserwartung: Ausdrücke und Anwendungen. Theor. Popul. Biol. 2013, 90, 29–35. [Querverweis] [PubMed]
38. Stock, JH; Watson, MW Mediane unvoreingenommene Schätzung der Koeffizientenvarianz in einem zeitabhängigen Parametermodell. J. Am. Stat. 1998, 93, 349–358. [CrossRef]
39. Zhou, X.; Sun, L. Additive Gefahrenregression mit fehlenden Zensurinformationen. Stat. Sin. 2003, 1237–1257. 40. van de Schoot,
R.; Depaoli, S.; King, R.; Kramer, B.; Märtens, K.; Tadesse, MG; Vannucci, M.; Gelman, A.; Veen, D.; Willemsen, J.; et al. Bayesianische Statistik und Modellierung. Nat. Rev. Methods Prim. 2021, 1, 1. [CrossRef]
41. Winklevoss, HE Pension Mathematics with Numerical Illustrations; University of Pennsylvania Press: Philadelphia, PA, USA, 1993.
42. Rostan, P.; Belhachemi, R.; Rostan, A. Beurteilung der finanziellen Nachhaltigkeit eines Rentensystems mit Signalverarbeitung. Stud. 2015, 33, 801–816. [CrossRef]
43. Queiroz, BL; Ferreira, MLA Die Entwicklung der Erwerbsbeteiligung und der erwarteten Rentendauer in Brasilien. J. Econ. Altern 2021, 18, 100304. [CrossRef]
44. Salinari, G.; De Santis, G. Eine oder mehrere Alterungsraten? Das erweiterte Gamma-Gompertz-Modell (EGG). Stat. Methods Appl. 2020, 29, 211–236. [CrossRef]
45. Baeten, S.; Van Ourti, T.; Van Doorslaer, E. Steigende Einkommens- und Gesundheitsungleichheit in China: Wer bleibt zurück? J. Health Econ. 2013, 32, 1214–1229. [CrossRef]
46. Carter, LR; Lee, RD Modellierung und Prognose geschlechtsspezifischer Sterblichkeitsunterschiede in den USA. Int. J. Forecast. 1992, 8, 393–411. [CrossRef]
47. Conde-Gutiérrez, R.; Colorado, D.; Hernández-Bautista, S. Vergleich eines künstlichen neuronalen Netzwerks und eines Gompertz-Modells zur Vorhersage der Dynamik der Todesfälle durch COVID-19 in Mexiko. Nonlinear Dyn. 2021, 104, 4655–4669. [CrossRef]
48. Mohamed, HS; Ali, MM; Yousof, HM Das Lindley Gompertz Modell zur Schätzung der Überlebensraten: Eigenschaften und Anwendungen in der Versicherung. Ann. Data Sci. 2023, 10, 1199–1216. [CrossRef]

Haftungsausschluss/Anmerkung des Herausgebers: Die in allen Veröffentlichungen enthaltenen Aussagen, Meinungen und Daten sind ausschließlich die der einzelnen Autoren und Mitwirkenden und nicht die von MDPI und/oder den Herausgebern. MDPI und/oder die Herausgeber lehnen jegliche Verantwortung für Personen- oder Sachschäden ab, die aus den im Inhalt erwähnten Ideen, Methoden, Anweisungen oder Produkten resultieren.

Machine Translated by Google

Berechnung

MDPI

Artikel

Eine dynamische Analyse eines polyartikulierten Roboters

Sorin Dumitru, Cristian Copilusi, Nicolae Dumitru * und Ionut Geonea

Fakultät für Mechanik, Universität Craiova, 200512 Craiova, Rumänien; sorin.dumitru@edu.ucv.ro (SD); cristian.copilusi@edu.ucv.ro (CC); ionut.geonea@edu.ucv.ro (IG)
* Korrespondenz: nicolae.dumitru@edu.ucv.ro

Zusammenfassung: In diesem Artikel werden die Kinematik und Dynamik eines Mehrgelenkroboters untersucht. Der Roboter kann an schwer zugänglichen Orten und in speziellen Umgebungen eingesetzt werden. Der Mehrgelenkroboter besteht aus zwei Hauptteilen: einer flexiblen Einheit und einer Betätigungseinheit. Die flexible Einheit besteht aus drei Modulen, die speziell für den Einsatz in einem komplexen 3D-Arbeitsbereich entwickelt wurden. Jedes Modul verfügt über flexible Wirbel und starre Scheiben. Die Simulation des Mehrgelenkroboters wird mit der Software MSC Adams 2012 und ANSYS R14.5 durchgeführt. Wir möchten daher feststellen, ob die Variationsgesetze von der Zeit der kinematischen Parameter für jedes Teil in einer bestimmten Bewegung abhängen, wobei jedes Teil als starrer oder verformbarer Körper agieren muss. Mithilfe der Methode der finiten Elemente werden die Spannungen und Verformungen für normale und kritische Positionen für den Mehrgelenkroboter berechnet. Zur Validierung der in dieser Forschung entwickelten Simulationsmodelle wird eine experimentelle Analyse des vorgeschlagenen Mehrgelenkroboters entwickelt. Die Befehls- und Kontrolleinheit wurde mit Bewegungssensoren aus

Schlüsselwörter: Dynamik; Simulation; Polyartikulierter Roboter

1. Einleitung

Heutzutage werden Gelenkroboter in Bereichen wie der Industrie, der Medizin , dem Militär und der Luft- und Raumfahrt häufig eingesetzt, da sie speziell für die Ausführung von Aufgaben in einem komplexen Arbeitsbereich konzipiert sind.

Ihr konzeptionelles Design ist inspiriert von Elefantenrüsseln, Schlangen und sogar Tintenfischtentakeln wie denen aus [1–6]. Diese zeichnen sich durch eine große Anzahl von Freiheitsgraden aufgrund ihrer hochartikulierten Struktur aus. Unter Berücksichtigung der zuvor erwähnten grundlegenden Domänen eignen sich diese Roboter daher gut für Erkundungsoperationen in stark eingeschränkten Umgebungen.

Die großen Freiheitsgrade werden durch die Verwendung einer Anzahl in Reihe geschalteter Glieder und betätigter Gelenke, wie [7,8], bei der Konstruktion solcher Roboter erreicht.

Eine wichtige Designaufgabe, die speziell für den medizinischen Bereich gilt, ist die Entwicklung einer miniaturisierten Strukturgröße für den Einsatz in der Endoskopie [9] oder Cholezystektomie [10]. Diese Designaufgabe wird also neue Probleme mit sich bringen, die gelöst werden müssen, wie Steifigkeit, erhöhte Fingerfertigkeit und präzise Steuerung [11].

Trotz der gestellten Aufgaben müssen diese Roboter mehrere Designphasen durchlaufen, die komplexe kinematische und dynamische Analysen der polyartikulierten Struktur beinhalten. Andererseits sollte die Befehls- und Kontrolleinheit eine spezifische Designarchitektur aufweisen, um perfekt mit einer polyartikulierten Struktur wie denen aus [12,13] zusammenzuarbeiten.

Betrachtet man Designkonzepte, die denen aus [14–17] ähneln, kann man ein wichtiges und gemeinsames Designziel für die polyartikulierte Roboterstruktur erkennen. Dieses Designziel besteht darin, eine S-förmige räumliche Trajektorie zu erreichen, die von der polyartikulierten Struktur in einem kartesischen Koordinatensystem entwickelt wird.

Ein weiteres Argument dieser Entwurfsaufgabe ist eine parametrisierte S-förmige räumliche Trajektorie. Dies erfordert komplexe dynamische Analysen, wie sie in [18–20] durchgeführt wurden.

check for updates

Zitat: Dumitru, S.; Copilusi, C.; Dumitru, N.; Geonea, I. Eine dynamische Analyse eines polyartikulierten Roboters. Berechnung 2024, 12, 156. https:// doi.org/ 10.3390/computation12080156

Wissenschaftlicher Herausgeber: Demos T. Tsahalis

Empfangen: 12. Juni 2024
Überarbeitet: 18. Juli 2024
Akzeptiert: 26. Juli 2024
Veröffentlicht: 2. August 2024

Copyright: © 2024 bei den Autoren. Lizenznehmer MDPI, Basel, Schweiz.

Dieser Artikel ist ein Open Access-Artikel vertrieben unter den Bedingungen und Bedingungen der Creative Commons Namensnennungslizenz (CC BY) (https:// creativecommons.org/licenses/by/ 4.0/).

Machine Translated by Google

Dies kann auch durch die Entwicklung eines Kontinuumsroboterkonzepts erreicht werden, das durch die Kombination von starren und flexiblen Körpern gekennzeichnet ist, wie [21–23].

Vor dem Hintergrund der in [20–22] vorgestellten Ansätze besteht unser Forschungsziel darin, einen Roboter mit einer vielgelenkigen Struktur zu entwerfen, der durch die Kombination von starren und flexiblen Körpern eine parametrisierte, S-förmige räumliche Flugbahn entwickeln kann.

Unser Beitrag zu diesem Forschungsfeld besteht daher darin, einen Prototyp zu entwickeln, zu entwerfen und zu testen, der die gewünschten Ziele erreichen kann. Eine weitere Besonderheit der Forschung besteht darin, die vorgeschlagenen Ziele durch den Einsatz moderner Entwurfstechniken und Software wie MSC Adams und ANSYS zu erreichen. Der Forschungskern basiert daher auf der in [23] vorgestellten Craig-Bampton-Methode zur Ausarbeitung der mathematischen Modelle, die in kinematischen und dynamis Ein weiterer origineller Beitrag ist die Architektur, obwohl ähnliche vielgliedrige Roboter zu finden sind, wie die aus [24–26].

Um die genannten Ziele zu erreichen, ist diese Forschung wie folgt organisiert. Ausgehend von unserem eigenen Beitrag haben wir ein Roboter-Designprinzip mit neun Freiheitsgraden entwickelt, das starre und flexible Körper kombiniert. Basierend auf diesem Prinzip werden zwei verschiedene flexible Einheiten – eine zylindrische und eine tronkonische – entworfen und experimentell getestet. Dies wird im zweiten Teil der Forschung zusammen mit dem Funktionsprinzip vorgestellt.

Die durch diese Forschung hervorgebrachte Neuheit betont einen ausgearbeiteten Prototyp, der sich durch konstruktive Einfachheit der flexiblen Einheit auszeichnet, das Design einer flexiblen Einheit in modularer Form, die jederzeit kombiniert werden kann (durch Verringern oder Erhöhen des Freiheitsgrads), und eine neue Form der flexiblen Einheit, nämlich eine tronkonische Form, die zur Verbesserung und Kontrolle einer variablen Steifigkeit beitragen wird. Durch die Betrachtung der verarbeiteten virtuellen Modelle werden mehrere Parameter für die Einrichtung virtueller Simulationen erwähnt, die für andere zukünftige Forschungen wertvoll sind.

Wie bereits erwähnt, konzentriert sich der Forschungsschwerpunkt auf eine dynamische Analyse der vorgeschlagenen polyartikulierten Einheit, und der Ansatz besteht in der Ausarbeitung eines mathematischen Modells auf Grundlage der Craig-Bampton-Methode aus [23], die im dritten Teil dieser Forschung vorgestellt wird . Dieses mathematische Modell stellt den Hintergrund für virtuelle Simulationen des polyartikulierten Roboters und die numerische Verarbeitung unter dynamischen Bedingungen mit Hilfe der Software MSC Adams und ANSYS dar .

Um das ausgearbeitete Konzept der Vielgelenkigkeit zu validieren, wurden mehrere virtuelle Simulationen in verschiedenen Umgebungen durchgeführt. Eine davon wird im MSC Adams durchgeführt, wo die Vielgelenkigkeitseinheit importiert und die Kombination zwischen flexiblen und starren Körpern richtig definiert wurde. Dies wird im vierten Teil der Forschung vorgestellt, wo durch die Berücksichtigung realitätsnaher auferlegter Einschränkungen signifikante Ergebnisse erzielt wurden.

Eine weitere Schnittstelle wurde in der ANSYS-Umgebung erstellt und es werden mehrere virtuelle Simulationen unter dynamischen Bedingungen durchgeführt, um den Kontakt zwischen den Einheitskomponenten des Mehrgelenkroboters zu untersuchen. Dieser Fall wird im fünften Teil der Untersuchung vorgestellt, in dem der Kontaktdefinition während der virtuellen Simulationen mehr Aufmerksamkeit gewidmet wird, um ein gutes Verhalten des gesamten Robotersystems zu erreichen und das vorgeschlagene Konzept zu validieren.

Basierend auf den erzielten signifikanten Ergebnissen wird im letzten Teil der Forschung der Prototyp vorgestellt und eine Reihe experimenteller Tests werden die Wirksamkeit der dynamischen Analysen beweisen, die mit Hilfe der Craig-Bampton-Methode in Kombination mit modernen Techniken durchgeführt werden.

2. Virtuelles Prototyping des Poly-Gelenkroboters

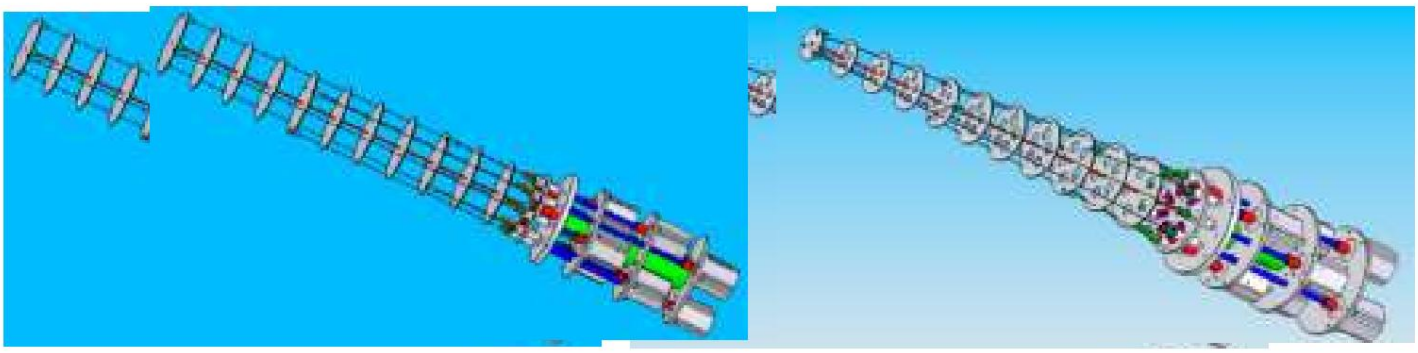
Es wurde ein vielgliedriges Robotersystem entwickelt, das aus zwei Haupteinheiten besteht: einer flexiblen Einheit und einer Betätigungseinheit.

Die flexible Einheitsstruktur besteht aus drei Modulen, und jedes Modul enthält drei flexible Wirbel und starre Bandscheiben. Diese Module sind durch ein flexibles Zentralelement verb Somit besteht die gesamte flexible Einheit aus neun flexiblen Wirbeln, die durch neun

Machine Translated by Google

Elektromotoren. Diese Elektromotoren stellen die Antriebseinheit dar und die Translationsbewegung wird über Schraub-Mutter-Getriebe sichergestellt.

Es wurden zwei Arten von flexiblen Einheiten entwickelt – eine zylindrische und eine tronkonische. Letztere, also die tronkonische Form, hat einen großen Vorteil, nämlich eine einfache und genaue Steuerung der Steifigkeit der flexiblen Einheit über alle drei Module hinweg. Das tronkonische Konzept der flexiblen Einheit gewährleistet eine variable Steifigkeit über ihre eigene Länge, was eine verbesserte Flexibilität des distalen Moduls gemäß Abbildung 1 gewährleistet.



(A) (B)

Abbildung 1. Im Rahmen dieser Forschung vorgeschlagene flexible Einheitentypen: (a) flexible Einheit mit zylindrischer Architektur und (b) flexible Einheit mit tronkonischer Form.

Die zylindrische Form der flexiblen Einheit bringt technologische Vorteile mit sich, so dass die Herstellungsprozesse viel einfacher sind als bei der tronkonischen Form und dass dies auch mit geringen Kosten möglich ist.

Der Roboterarbeitsbereich wurde durch die Mobilitätsgrenzen der flexiblen Einheit definiert und in modularer Form entworfen, um eine vereinfachte Steuerung der Roboterkonfiguration und ihres ausgewerteten Arbeitsbereichs zu ermöglichen. Die verformte Form der flexiblen Einheit scheint eine schlangenartige Form zu haben, und daher kann dem gesamten entworfenen System der Begriff „schlangenartiger Roboter“ zugewiesen werden .

Die mechanische Struktur des Roboters ist so ausgelegt, dass die axialen Verschiebungen eingestellt werden können, was die kinematische Präzision des Roboters gewährleistet. Insbesondere wurde die flexible Einheit für zwei Typen entworfen: einen mit zylindrischer Struktur und einen mit konischer Struktur. Die mechanischen Teile des Roboters wurden in den Laboren der Fakultät für Mechanik gebaut, und die Befehls- und Kontrolleinheit wurde an der Fakultät für Automatisierung, Computer und Elektronik der Universität Craiova entwickelt [21].

Daher wurde der Polygelenkroboter gemäß dem in Abbildung 2 dargestellten 3D-Modell entworfen. Abbildung 3 zeigt eine Explosionsansicht mit einer entsprechenden Identifizierung der Komponenten des 3D-Modells des Polygelenkrobotersystems.

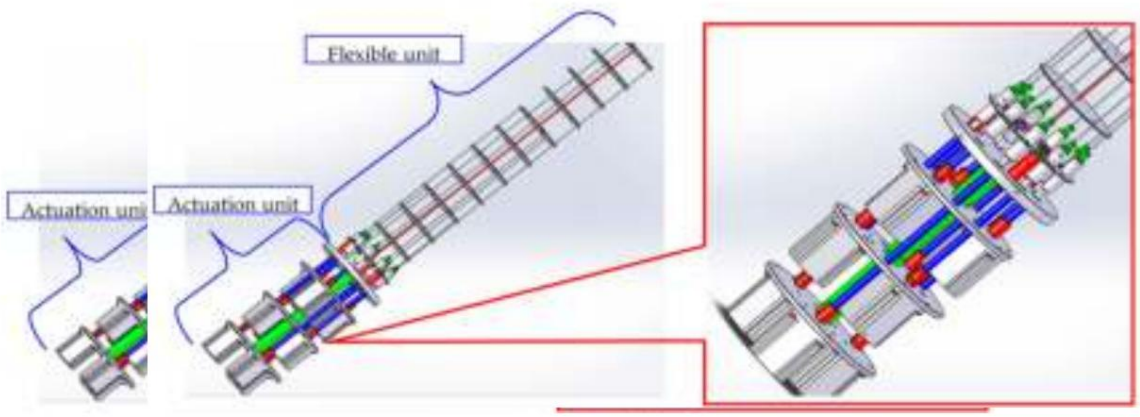


Abbildung 2. Virtuelles Modell des Polygelenkroboters in parametrisierter Form.

Machine Translated by Google

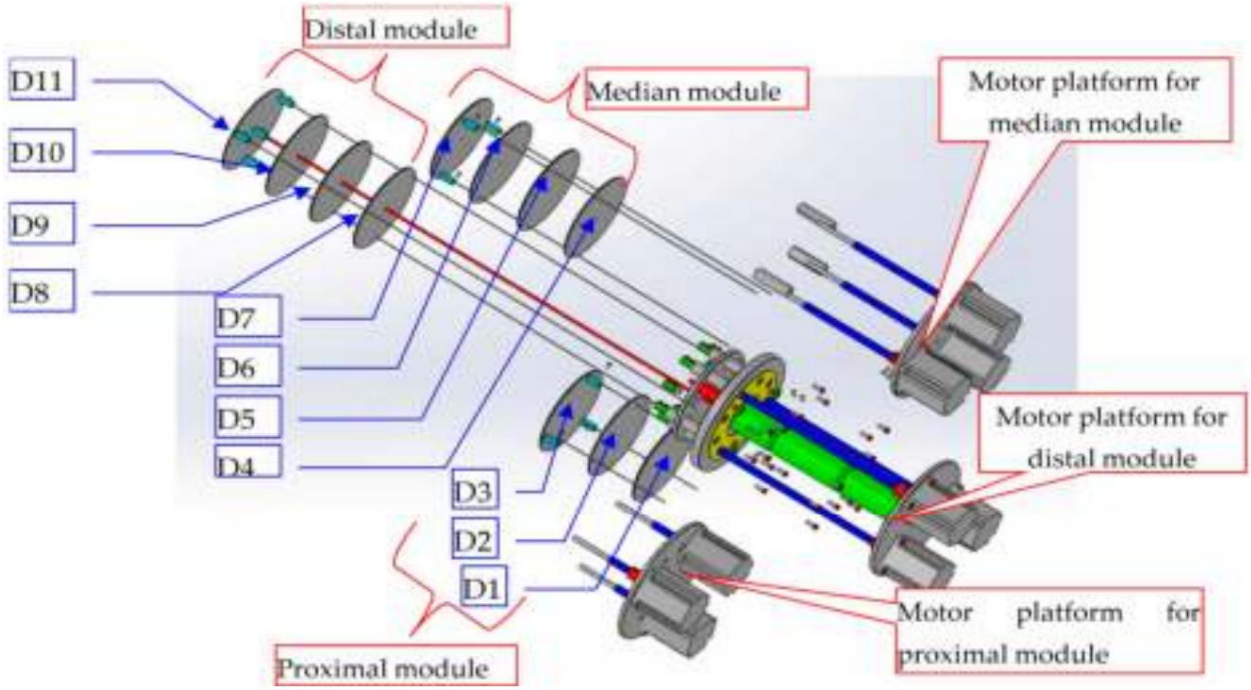
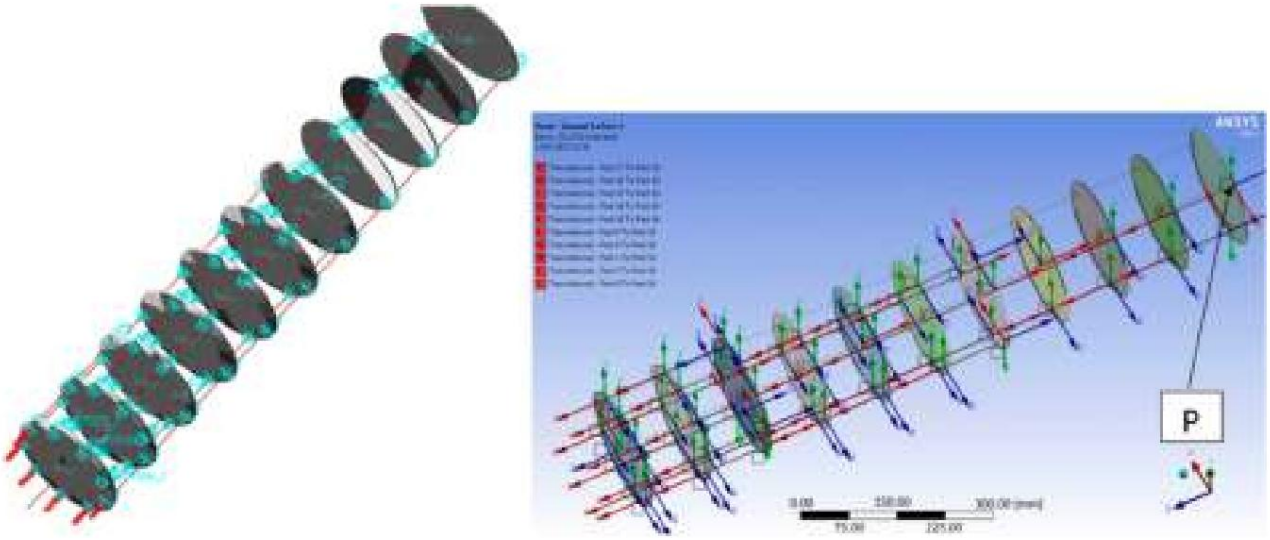


Abbildung 3. Ein virtuelles Modell des Polygelenkroboters – erweiterte Ansicht.

Das Funktionsprinzip des Roboters hängt von der Motorbetätigungssteuerung ab, die in diesem Fall durch die neun Schrittmotoren dargestellt wird. Die Roboterarchitektur besteht aus drei Modulen (proximal, medial und distal), und jedes Modul wird von drei Schrittmotoren betätigt, um kombinierte Bewegungen in einem 3D-Arbeitsraum zu entwickeln. Die Schrittmotoren sind direkt mit Kraftschraubengetrieben verbunden, die die Betätigungskabel ziehen oder lösen. Somit wandeln die Kraftschraubengetriebe die Drehbewegung der Schrittmotorwelle in eine Translationsbewegung um, die der mit einem Betätigungskabel verbundenen Mutterkomponente auferlegt wird. Somit basiert die Bewegung auf dem Ein- und Ausschrauben der Kraftgetriebe, die die Verkürzung oder Verlängerung der kontinuierlichen Roboterbewegung bestimmen . Auf diese Weise wird die Tentakelkrümmung durch die Variation der Betätigungskabel geändert.

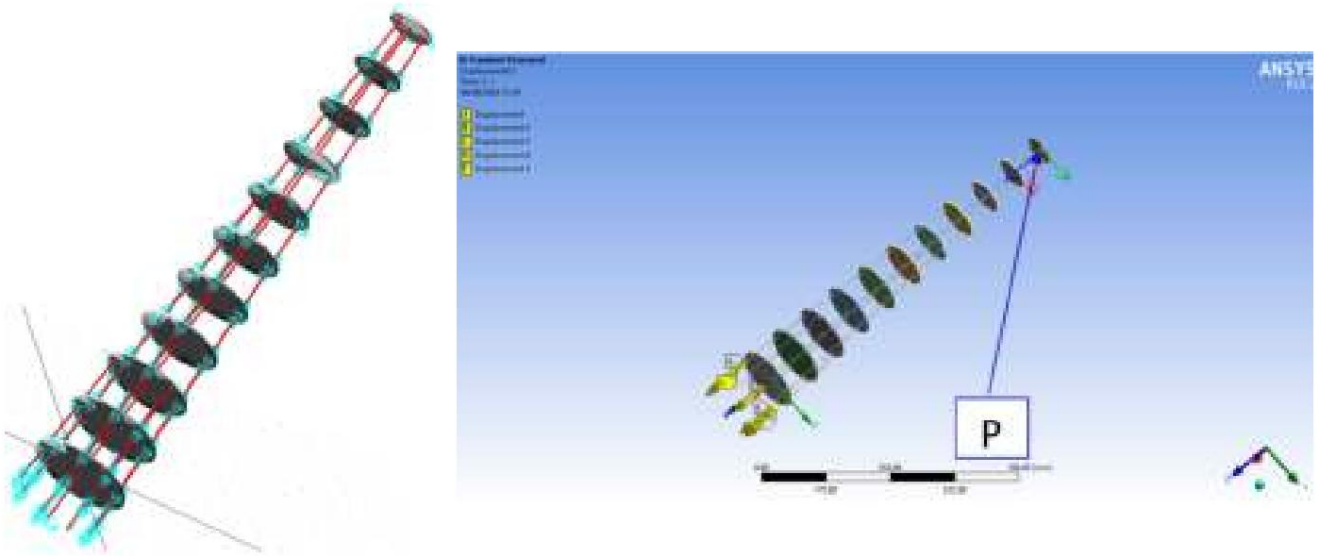
Abbildung 3 zeigt das Rückgrat des Tentakels – die zentrale Komponente, die rot markiert ist und einen elastischen Stab aus Stahl darstellt, der die gesamte Struktur stützt und die Biegesequenz ermöglicht. Das Funktionsprinzip hängt also davon ab, welches Kabel verkürzt oder verlängert wird, und der Tentakel biegt sich in verschiedenen Ebenen. Jedes Kabel trägt dazu bei, eine Bewegung mit unterschiedlichen Winkeln auszuführen, je nach dem anfänglichen Koordinatenrahmen, der an das Manipulatorsegment angeschlossen ist, und ermöglicht beispielsweise eine 3D-Bewegung. Abbildung 1 zeigt also beide flexiblen Einheitsmodelle, und es ist ersichtlich, dass sie dieselbe Anzahl von Komponenten verwenden, wobei der einzige Unterschied durch die Form der Scheiben gegeben ist. Dies wurde in einer parametrisierten Form entworfen, wobei die Definition der genauen Konturbedingungen berücksichtigt wurde. Das erhaltene Modell respektiert die kinematischen Bedingungen und wurde auch in zwei Varianten entworfen, die mit der Software MSC Adams 2012 und ANSYS R 14.5 kompatibel sind. Diese sind in **den Abbild**

Machine Translated by Google



(A) **(B)**

Abbildung 4. Polyartikulierte zylindrische Roboterkinematikmodelle unter Verwendung der Software (a) MSC Adams und (b) AN-SYS.



(A) **(B)**

Abbildung 5. Kinematische Modelle eines polyartikulierten tronkonischen Roboters unter Verwendung der Software (a) MSC Adams und (b) AN-SYS.

3. Mathematische Modelle

Im Falle der Roboteranalyse der MSC Adams Software ist das mathematische Modell basiert auf der Craig–Bampton Methode. Das Prinzip der Methode wird in [23] vorgestellt. **und geht von folgenden theoretischen Überlegungen aus: Durch die Transformation eines starren Körpers in einen flexibles Verfahren, das dadurch gekennzeichnet ist, dass nur die kleinen linearen Dehnungen berücksichtigt werden des vorgeschlagenen Körpers, abhängig von einem lokalen Referenzkoordinatensystem; die vorgeschlagene starrer Körper wird in finite Elemente vernetzt. Auf diese Weise wird eine endliche Anzahl von Freiheitsgraden identifiziert werden.**

Knotenverschiebungen können als lineare Kombination zwischen einem kleinen Anzahl von echten Vektoren, die Modalformen genannt und einem Ø´ - Parameter zugeordnet werden. Für eine verformbaren Körper „i“, diese werden dargestellt durch

$$y_i = \Phi_i \eta_i$$

Machine Translated by Google

$$u = \ddot{y} \sum_{i=1}^{M} \ddot{y}j \cdot qj \quad (1)$$

= ÿ ÿ ÿ,

wobei u – Knotenverschiebungen; M – Anzahl der Eigenformen; qj – Modalkoordinaten.

Gleichung (1) stellt auch die Verbindung zwischen einem breiten Satz physikalischer Koordinaten und einem kleinen Satz modaler Koordinaten dar, nämlich qj .

Die Craig-Bampton-Methode ermöglicht die Optimierung der erhaltenen modalen Basis durch Berücksichtigung von zwei DOF-Sätzen, d. h. Konturfreiheitsgrade uB, **die zum Aufbringen von Lasten oder zum Verbinden eines flexiblen Körpers mit einem starren verwendet werden; interne Freiheitsgrade** ul , **d. h. die internen Freiheitsgrade des flexiblen Elements, die mithilfe von Superelementtechniken verdichtet werden können .**

Für die kinematische Analyse eines flexiblen Körpers (Elements) werden zwei Elemente werden wie folgt betrachtet: T **für** **Referenzkoordinatensysteme** benötigt – i (xi ,yi ,zi) **– das Referenzko einen flexiblen Körper; T0** (X, Y, Z) – das **globale Referenzkoordinatensystem.**

Einige interessante Knoten können identifiziert werden, indem der flexible Körper in finite Elemente zerlegt wird. Auf den identifizierten interessanten Knoten können Markierungen mit geeigneten lokalen Referenzkoordinatensystemen platziert werden .

Somit kann einem flexiblen Körper eine Markierung „Pi“ **zugewiesen und seine Position in einem globalen Koordinatenreferenzsystem wie folgt definiert werden:**

$$\ddot{y}\, r_{pi} = \ddot{y}\, S\, ri + \ddot{y}\, pi + \ddot{y}\, Upi \quad (2)$$

wo r **i – der Positionsvektor des** T **Ursprung des lokalen Koordinatensystems, abhängig von der T0 globales Referenzsystem;** S **pi – Positionsvektor des Pi – Markers (unverformte Position), abhängig vom lokalen Koordinatensystem** T ; **Upi – der Positionsvektor des** P **i – Markierung, abhängig vom TPi-Referenzsystem, dessen Mittelpunkt der Pi-Marker ist.**

Abbildung 6 **zeigt ein Schema der Position des Koordinatensystems anhand eines vereinfachten Modells. Die Koordinatentransformationsmatrizen werden unter Berücksichtigung der Gleichung (2) ermittelt und folgende Ergebnisse erzielt:**

$$r_{Pi} = ri + AOi \cdot S_{Pi} + AOi \cdot U_{Pi} \quad (3)$$

$$r_{Pi} = ri + AOi \cdot (S_{Pi} + U_{Pi}) \quad (4)$$

wobei **die Ursprungsposition des** T **abhängig vom** globalen TO- **Referenzsystem lokales Referenzsystem, darstellt.**

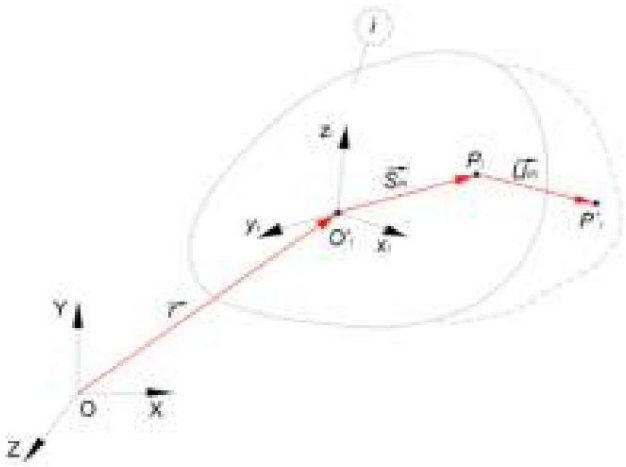


Abbildung 6. Position des Koordinatensystems auf einem flexiblen Körper für die Craig-Bampton-Methode.

Machine Translated by Google

Der verallgemeinerte Koordinatensystemvektor des flexiblen Körpers in einer unverformten Situation ist also

$$qri = [xi , yi , zi , ÿi , ÿi , ÿi]^{T} \quad \textbf{(5)}$$

wobei xi , yi , **zi die Koordinaten des ursprünglichen beweglichen Referenzsystems sind, nämlich** ÿich (xi , yi , Tzi) **fest, mit einem verformbaren Körper i;** ÿi , ÿi **und ÿi die Euler-Winkel, die die räumliche Orientierung des i-Körpers beschreiben ; A0i die Matrix der Koordinatentransformation, die aus den Direktorkosinus des lokalen Referenzsystems** T erstellt wurde, abhängig vom **globalen Referenzsystem T0 System; UÿPi – Deformationsvektor ausgedrückt in** T **lokales Referenzsystem.**

Der Verformungsverschiebungsvektor kann als modale Überlagerung in einer Matrixform ausgedrückt werden als

$$UPi = \textbf{ÿPi·qi} \quad \textbf{(6)}$$

wobei ÿPi ein Teil der Modalmatrix ist, der Pi entspricht – der Translationsfreiheitsgrade des Markers. Diese Matrix hat eine Dimension von 3 x M , **wobei** M **die Zahl der Modalformen darstellt; qi ist der Vektor verallgemeinerter modaler Koordinaten.**

Mit den vorherigen Gleichungen kann der verallgemeinerte Koordinatenvektor für einen flexiblen Körper wie folgt definiert werden:

$$ÿ = [xi , yi , zi , ÿi , ÿi , ÿi , qi]^{T} \textbf{; i = 1 . . .} M \quad \textbf{(7)}$$

Gleichung (7) zeigt die qi **-Modalkoordinaten** (i **= 1 ...** M), die die **verallgemeinerten Koordinaten des flexiblen Elements charakterisieren .**

Die Winkelverformung eines flexiblen Elements kann durch eine modale Überlagerung ermittelt werden:

$$ÿPi = ÿ \textbf{Þi·qi} \quad \textbf{(8)}$$

wobei ÿÿ ein Teil der Modalmatrix ist, der den Rotationsfreiheitsgraden pi **für den Pi-Knoten entspricht. Er hat eine Dimension von 3 ×** M , **wobei** M **die Modusnummer ist.**

Die festkörperdeformierbare Bewegung wird für einen Ki- Marker analysiert, der je nach seinem lokalen Referenzsystem Rotationen mit kleinen Winkeln ausführt.

Jeder Marker wird durch ein eigenes Koordinatensystem definiert. Im Falle der Ki-Markerorientierung , abhängig vom globalen Referenzsystem T0 , wurde eine Koordinatentransformationsmatrix angegeben, nämlich A0Ki, **wobei**

$$A0Ki = \textbf{A0i ·AiPi·APiKi} \quad \textbf{(9)}$$

wobei A0i die Transformationsmatrix ist, die durch Übergang vom lokalen Referenzsystem zum i-ten **Körper, also** T **zum globalen Referenzsystem T0, erhalten wird;** AiPi **ist die Transformationsmatrix, die sich aus der Änderung der Orientierung aufgrund der Pi-Knotenverformung ergibt;** APiKi **ist die konstante Transformationsmatrix, die definiert wurde, als der Marker auf dem flexiblen Körper platziert wurde. Die dargestellten Elemente stellen Eingabedaten für das verwendete Verfahren zur Umwandlung eines starren Körpers in einen verformbaren Körper mit Hilfe der MSC Adams-Software dar.**

4. Dynamische Modellierung mit MSC Adams

Die flexible Einheit wurde mit der Software MSC Adams 2012 analysiert. Daher wurde sie als flexible Schnittstelle zum Importieren der CAD-Geometrie der flexiblen Einheit in 2D und 3D in MSC Adams erstellt. Es wurden die Materialeigenschaften für die entsprechenden Komponenten definiert (Stahl für die Wirbel und Aluminium für die Scheiben), und es werden auch lokale Referenzsysteme für jede Komponente der flexiblen Einheit zugewiesen. Es wurden kinematische Gelenke zusammen mit den zugehörigen Referenzsystemen definiert. Diese bestehen aus 21 kinematischen Elementen, nämlich 10 flexiblen Elementen und 11 starren Elementen, die durch die Scheiben dargestellt werden, gemäß Abbildung 2. Die Verbindungen zwischen diesen kinematischen Elementen wurden durch 75 kinematische Gelenke bereitgestellt, nämlich 21 feste Gelenke und 54 Translationsgelenke mit einem einzigen Freiheitsgrad. Diese Einheit wurde durch 6 Gelenkmotoren angetrieben. Abbildung 7 zeigt die Definition der Motorgelenke. Die Bewegung wird durch die Vektoren MOTION_1, MOTIO

Machine Translated by Google

in Abbildung 7 stellen die Bewegung entlang der in Abbildung 3 gezeigten Mittelachse dar . Die Bewegungssequenz ist wie folgt: WENN (Zeit – 1: 0, 0, –2 × Zeit) – Bewegung_1 – proximales Modul; WENN (Zeit – 1: 0, 0, –1,5 × Zeit) – Bewegung_2 – mittleres Modul; WENN (Zeit – 2: –2 × Zeit, 0, 0) – Bewegung_3 – distales Modul.

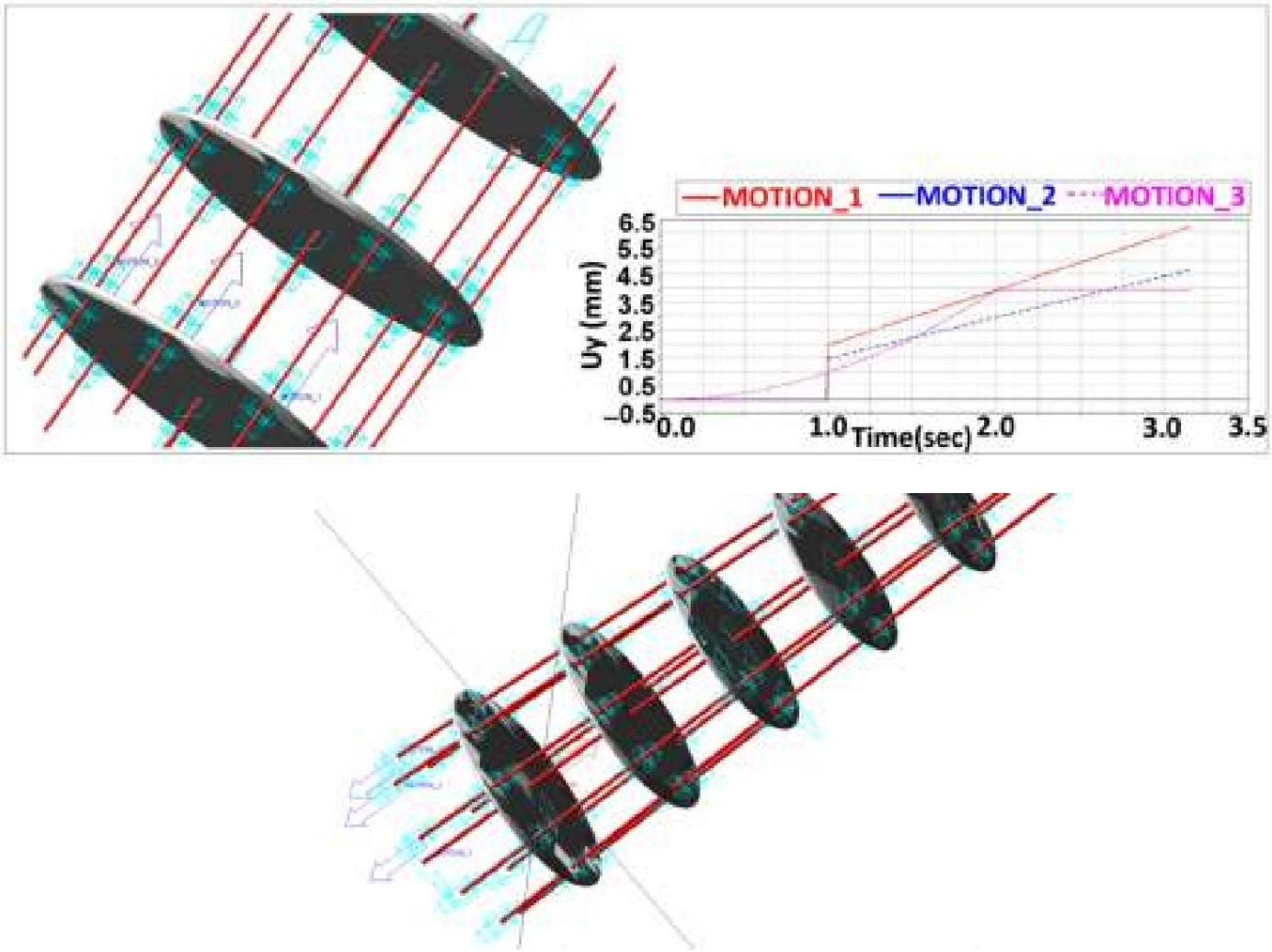


Abbildung 7. Aufbau der motorischen Gelenkverschiebung in einem 3-Sekunden-Zeitintervall für beide analysierten flexiblen Einheiten.

Dazu ist eine kinematische oder dynamische Bewegungsanalyse des Roboters möglich, indem die flexible Einheit als Mechanismus mit verformbaren Elementen betrachtet wird. Unter Berücksichtigung der ausgearbeiteten mathematischen Modelle von Craig und Bampton [9,20] ermöglicht die Software ADAMS 2012 die Durchführung einer modalen dynamischen Analyse jedes flexiblen mechanischen Systems durch Überlagerung der starr-festen Bewegung mit einer verformbaren fest

Neun Betätigungswirbel wurden wie folgt von starren in flexible Körper umgewandelt: Jeder Körper wurde in finite Elemente (Elementtyp: fest, Elementform: tetraedrisch, Elementreihenfolge: quadratisch und Kantenform: gemischt) eingebunden; die Verbindungsbedingungen mit anderen Elementen wurden durch ein Verfahren definiert, das aus **der Identifikation von Knoten vom Typ Master–Slave besteht .**

Die flexiblen Elemente – allgemein als elastische Wirbel bezeichnet – wurden in tetraedrische finite Elemente vernetzt. Die modaldynamische Analyse wurde für 77 Eigenformen du

Anschließend wurden die Eigenfrequenzen und Eigenschwingungsmodi bestimmt und auf diese Weise die geeigneten Bedingungen für die Anwendung der **Methode der modalen Überlagerung (Craig–Bampton) zur Durchführung der dynamischen Analyse des Mechanismus geschaffen .**

Machine Translated by Google

ff

Zum Lösen des Differentialgleichungssystems wurde das Integrationsmodul WSTIFF mit SI2-Formulierungen und einem Integrationsschritt von 0,01 verwendet.

Der Kontakt der Translationsgelenke war ein Satz von festen, starren und verformbaren Verbindungen.

Während der virtuellen Simulationen wurden im Fall des an den Enden der zentralen Wirbel platzierten Knotens kinematische Parameter-Bewegungsgesetze ermittelt, abhängig vom Referenzkoordinatensystem, das auf dem Massenmittelpunkt der ersten Scheibe platziert war, die für die Betätigungseinheit als räumlich feststehend betrachtet wurde.

Abbildung 8 zeigt einige flexible, einheitlich verformte Formen in einem 3D-Arbeitsbereich, die sich ergaben während der Motorgelenkbetätigung in verschiedenen Betätigungsmodi.

ff

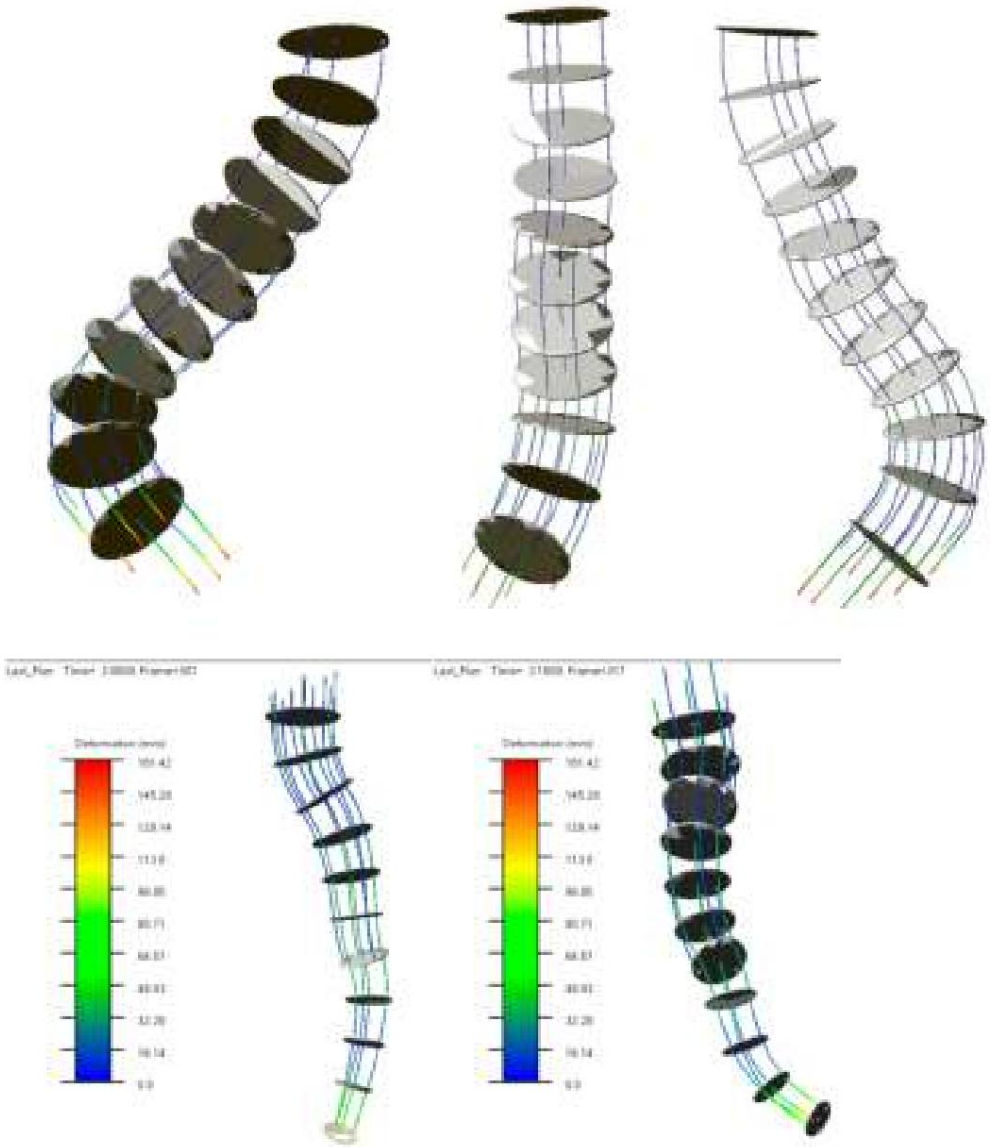


Abbildung 8. Deformierte Formen der flexiblen Einheit für beide analysierten Formen, verarbeitet in der MSC Adams-Umgebung.

Die erhaltenen Ergebnisse werden durch Verschiebungskomponenten der Endscheibe (D11) für das distale Modul Nr. 2 und der Endscheibe (D7) für das mittlere Modul Nr. 1 gemäß Abbildung 2 dargestellt. Einige Knoten, die sich im Massenmittelpunkt der vorgeschlagenen Scheiben befinden, wurden **bei der virtuellen Simulation verformbarer Festkörper zur Messung berücksichtigt .**

Abbildung 9 zeigt die Translationsdeformation des Knotens Nr. 14405 im Schwerpunkt der letzten Scheibe D11 über das distale Modul. Es ist zu erkennen, dass die

Machine Translated by Google

Die maximalen Verschiebungswerte werden in einer transversalen Ebene aufgezeichnet, die durch die x- und y- Achsen des lokalen Referenzsystems definiert ist.ff

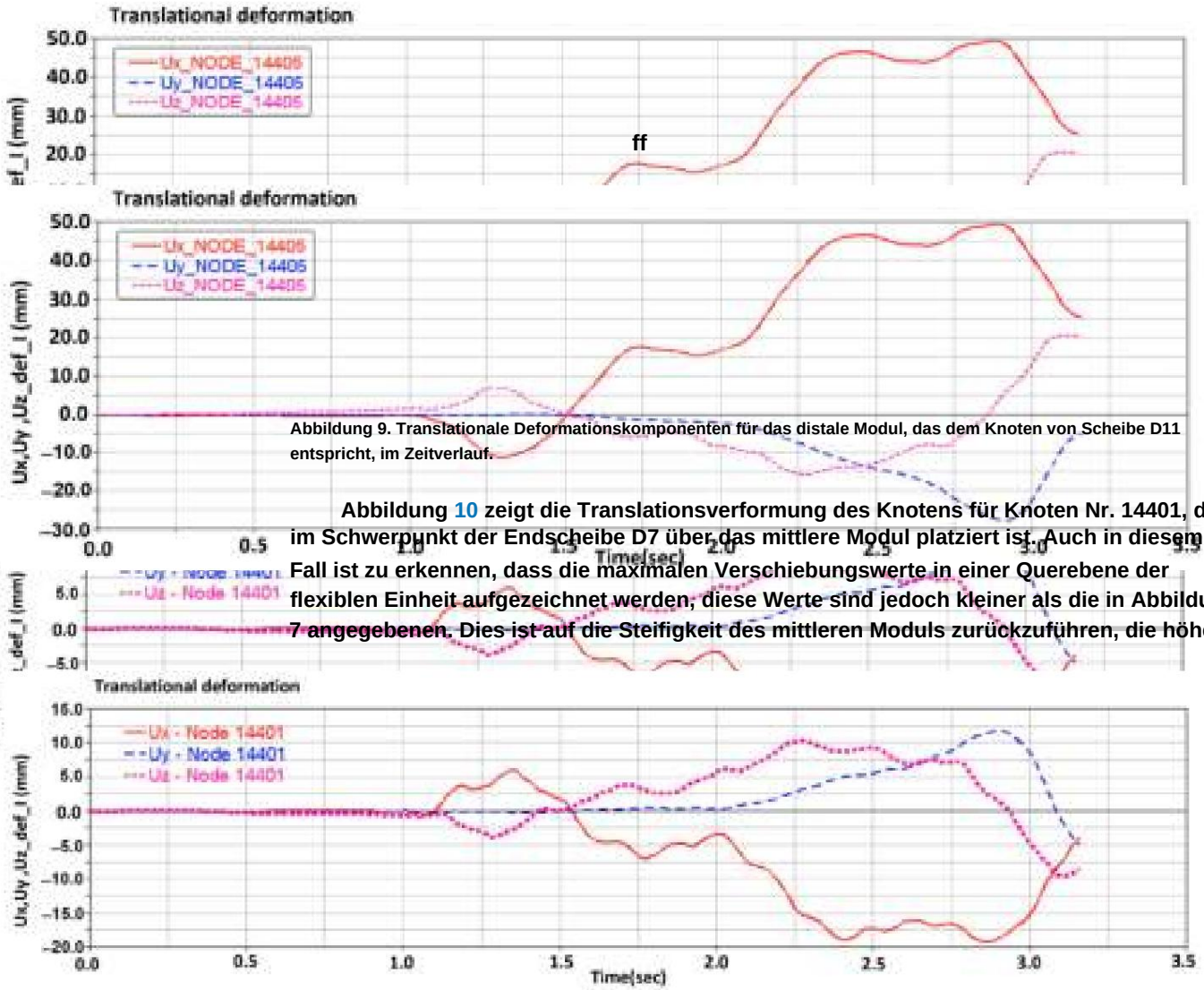


Abbildung 9. Translationale Deformationskomponenten für das distale Modul, das dem Knoten von Scheibe D11 entspricht, im Zeitverlauf.

Abbildung 10 zeigt die Translationsverformung des Knotens für Knoten Nr. 14401, der im Schwerpunkt der Endscheibe D7 über das mittlere Modul platziert ist. Auch in diesem Fall ist zu erkennen, dass die maximalen Verschiebungswerte in einer Querebene der flexiblen Einheit aufgezeichnet werden, diese Werte sind jedoch kleiner als die in Abbildung 7 angegebenen. Dies ist auf die Steifigkeit des mittleren Moduls zurückzuführen, die höher ist als di

Abbildung 10. Translationale Deformationskomponenten für das distale Modul, das dem Knoten von Scheibe D7 entspricht, im Zeitverlauf.

5. Dynamische Modellierung mit ANSYS

tt

In diesem Fall wurde das Robotersystem aus Abbildung 2 betrachtet und dazu eine dynamische Analyse mit dem Paket ANSYS R14.5 [8] durchgeführt. Zunächst wurde das geometrische Modell importiert und im zweiten Schritt wurde es in finite Elemente vernetzt, wie in Abbildung 9 zu sehen ist. Im dritten Schritt wurde der Kontakt zwischen Bandscheiben und Wirbeln definiert und am Ende wurden die Konturbedingungen festgelegt.

Die kinematischen Verbindungen wurden als flexibel betrachtet, und dem Netzwerk der finiten tt Elemente in den Kontaktbereichen, in denen diese gemäß Abbildung 11 in der Größe angepasst wurden, wurde besondere Aufmerksamkeit gewidmet . **Dieser Forschungsrahmen stellt somit als detailliertes Beispiel den Fall der flexiblen Einheit dar, die durch eine zylindrische Form gekennzeichnet ist. Im anderen Fall, d. h. der tronkonischen Form der flexiblen Einheit, wurde ein ähnlicher An**

Machine Translated by Google

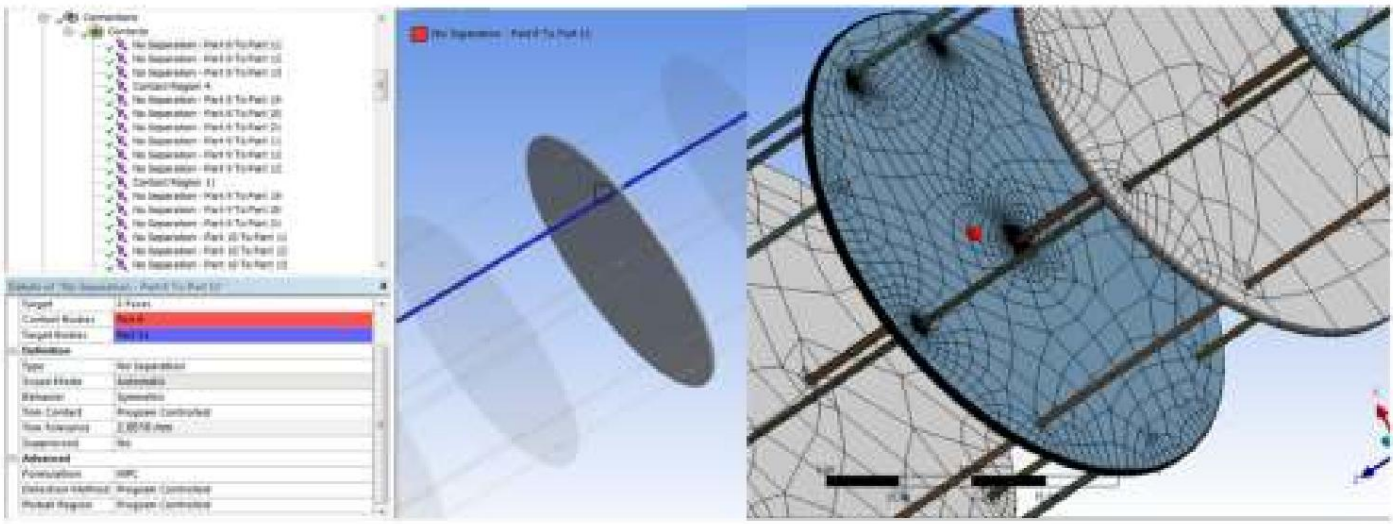


Abbildung 11. Kontaktdefinition zwischen elastischen Wirbeln und flexiblen Einheitsscheiben.

Für den ersten Aufbau der Analyse wurden die Kontaktmodellierung Parameter, der Solver-Typ und die Zeit für die Sequenzeinrichtung der eigentlichen virtuellen Verarbeitung. Daher definieren wir für den Solvertyp und die Zeiteinstellung die folgenden Parameter: Anzahl Anzahl der Schritte: 3; Anfangszeitschritt: 0,1 s; Minimaler Zeitschritt: 0,001; Maximaler Zeitschritt: 0,002; Solvertyp: Direkt; Numerisches Dumping: 0,1. Bei der Kontaktmodellierung gibt es wurden Kontaktparameter für die spezifische Gelenkmodellierung definiert, bzw. die neun Betätigungswirbel und Bandscheiben wie folgt: Kontakttyp: Keine Trennung; Verhalten: Symmetrisch; Formulierung: MPC; Nachweismethode: Nodal-Normal zum Ziel. Der Kontakt zwischen den Scheiben und dem zentralen flexiblen Element wurde wie folgt durchgeführt: Typ: Begrenzt; Verhalten: Symmetrisch; Formulierung: Reine Strafe; Erkennungsmethode: Nodal-Normal zu Ziel. Laut Abbildung 2 war die Scheibe D1 im Raum fixiert.

Im vierten Schritt wurden die Motorparameter definiert, wie man in Abbildung 12.

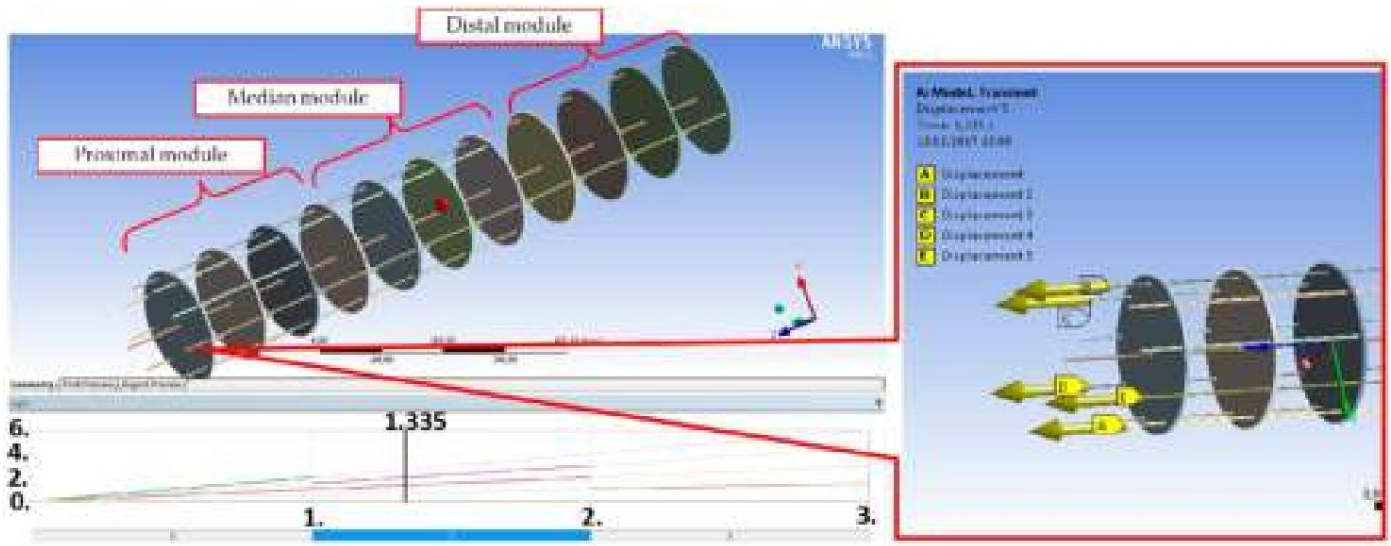


Abbildung 12. Definition der flexiblen Motoreinheitselemente im Fall der zylindrischen Form.

Ein Simulationsaufbau für den Betätigungsmodus während der Zeitsequenz wurde durchgeführt für alle flexiblen Einheitsmodule nach Abbildung 12 mit Eigenbewegungen: Medianmodul, uz1 = t (t ÿ **2); distales (letztes) Modul** uz2 = 2t (t ÿ **1); proximales (Basis-)Modul** uz3 = **0,5t** ÿ ÿ ÿ ÿ ÿ ÿ

Machine Translated by Google

(1 ÿ t ÿ 2); distales (letztes) Modul uz4 **= 1,5t (1 ÿ t ÿ 2); distales (letztes) Modul** uz5 **= 0,5t (2 ÿ t ÿ 3).**

Nach der Verarbeitung aller Eingabedaten wurde der Bewegung der Komponenten des Robotersystems gemäß zwei Referenzsystemen besondere Aufmerksamkeit gewidmet, nämlich einem globalen Koordinatensystem und einem lokalen Koordinatensystem in der Mitte der Basisscheibe. So wurden die Variationsgesetze in der Bewegung der kinematischen Parameter in Abhängigkeit von der Zeit für die gewählten Markierungen ermittelt , nämlich diejenigen, die in den Zentren der Referenzscheiben für proximale, mediale und distale Module platziert sind. Die von diesen Markierungen entwickelte Bewegung wurde nach drei Komponenten des entsprechenden Koordinaten

Die Referenzscheiben sind diejenigen, die direkt von den motorischen Wirbeln angetrieben werden (letzte Scheiben von jedem Modul). So wurden mehrere Ergebnisse erzielt, die in den Diagrammen der Abbildungen 13–15 dargestellt sind. Diese stellen die Verschiebungskomponenten auf den X- und Z- Achsen für den Marker dar, der auf dem lokalen Koordinatensystem platziert ist, das an der letzten Scheibe des proximalen Moduls befestigt ist.

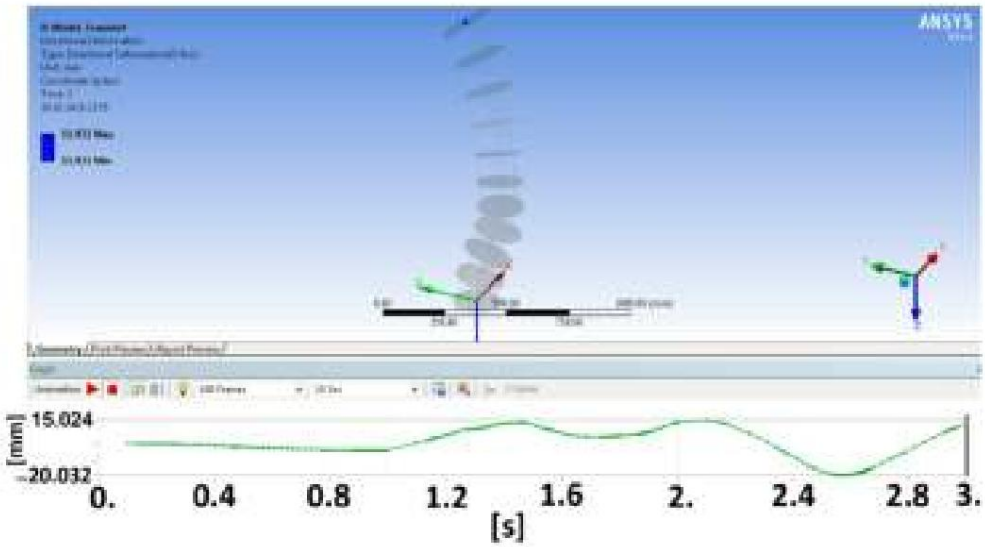


Abbildung 13. Die Variation der Verschiebungskomponente auf der X-Achse für die endgültige Scheibe vom distalen Modul in einem lokalen Koordinatensystem im Verlauf der Zeit.

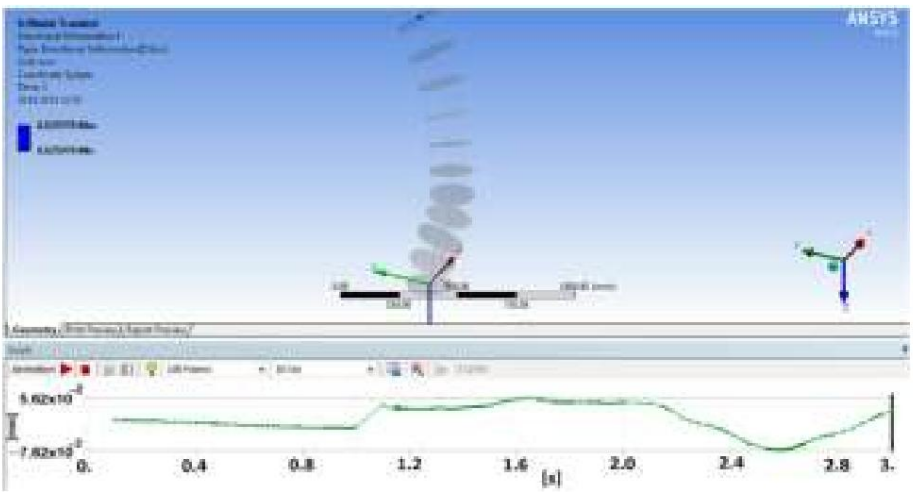


Abbildung 14. Die Variation der Verschiebungskomponente auf der Z-Achse für die endgültige Scheibe vom distalen Modul in einem lokalen Koordinatensystem im Zeitverlauf.

Machine Translated by Google

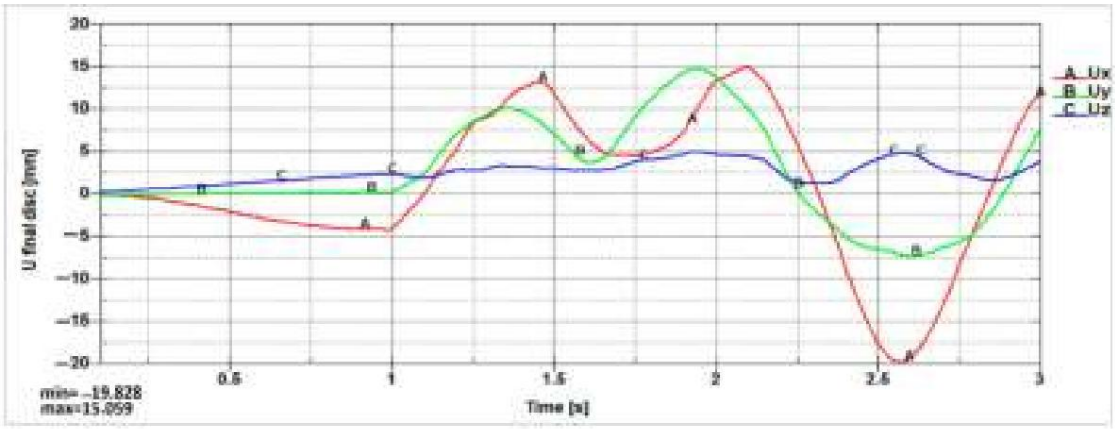


Abbildung 15. Die elastische Verschiebungsvariation des endgültigen Scheibenmarkers vom proximalen Modul im Laufe der Zeit.

Jedes Modul wird nacheinander oder gleichzeitig mit den anderen beiden aktiviert, je nach zur gewünschten Konfiguration des Robotersystems, das im vorgeschlagenen Arbeitsbereich beschrieben ist.

Die Achsen, die die transversale Ebene der analysierten flexiblen Einheit definieren, sind X und Y. Abbildung 13 zeigt also eine verformte Form der analysierten flexiblen Einheit, abhängig von der Zeit, die der X-Achsenkomponente für den Massenmittelpunkt der letzten Scheibe D11 des distalen Moduls entspricht. Diese Variation wurde gemäß einem lokalen Referenzsystem berechnet, das auf der Basisscheibe D7 platziert wurde. Sie wurde aufgezeichnet, bis ein Wert von 15,059 mm erreicht wurde. In ähnlicher Weise berechneten wir die Verschiebung für die Z-Achsenvariation, abhängig von der Zeit für den Massenmittelpunkt der letzten Scheibe D11 des distalen Moduls. Dies ist in Abbildung 14 dargestellt und es wurde ein Maximalwert von 0,056298 mm erreicht.

Abbildung 15 zeigt eine Gesamtverschiebung von einem Mindestwert von ÿ19,828 mm bis zu einem Höchstwert von 15,059 mm. Somit wurde eine Gesamtverschiebungsamplitude von ungefähr 35 mm erreicht.

Abbildung 16 zeigt die verformte Gestalt der flexiblen Einheit und die Verschiebungsvariation auf der Y-Achse.

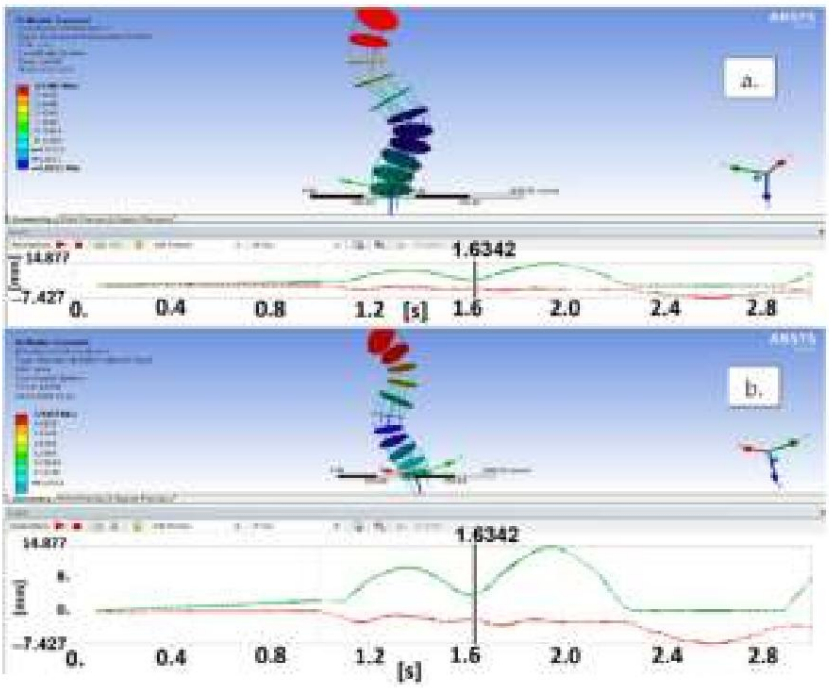


Abbildung 16. Die Variation der deformierten Form der flexiblen Einheit entlang der Y-Achse des lokalen Koordinatensystems im Laufe der Zeit ((a) – isometrische Ansicht; (b) – gedrehte Ansicht in der X-Y-Ebene).

Machine Translated by Google

Basierend auf diesem Ergebnis ist ersichtlich, dass die Querverschiebungen mit der verformten Form der flexiblen Einheit kompatibel sind. Die verformte Form kann auch durch Berücksichtigung der elastischen Wirbel der flexiblen Einheitsstruktur ausgewertet werden, nämlich in Abbildung 17, wo die resultierende Verschiebungsvariation für zwei Wirbel gezeigt wird, nämlich einen motorischen und einen angetriebenen Wirbel.

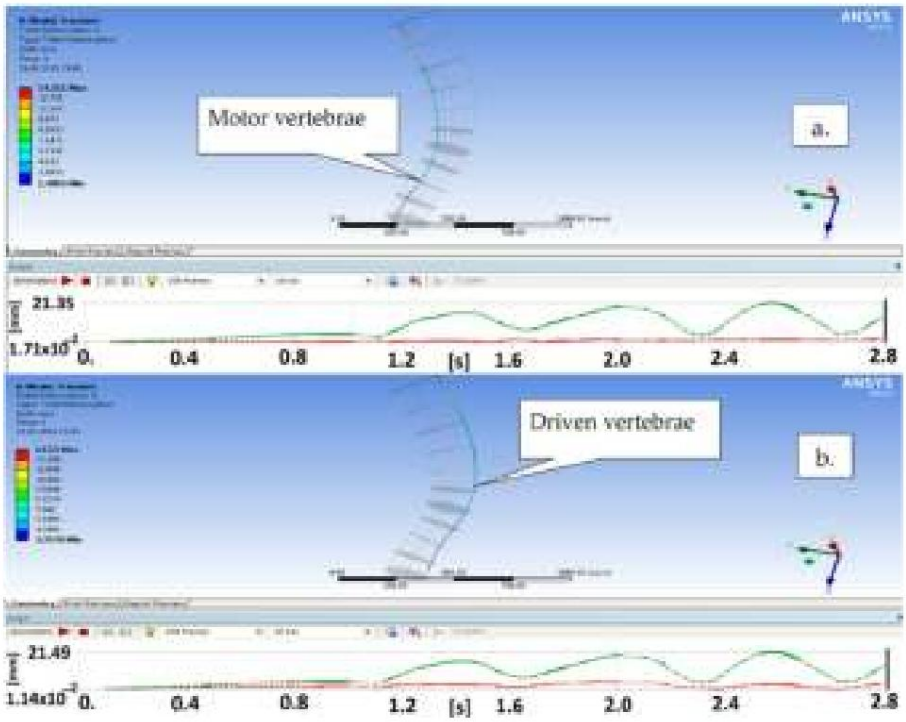


Abbildung 17. Die resultierende Verschiebungsvariation für Wirbel in einem globalen Koordinatensystem im Laufe der Zeit ((a) – motorische Wirbel; (b) – angetriebene Wirbel).

Schließlich wurden in Abbildung 17 die Verschiebungsvariationen für distale Modulwirbel analysiert.

Außerdem wurden die Verformungen, Verschiebungen und Von-Mises-Spannungen für jeden Wirbel in zwei unterschiedlichen Fällen ermittelt: wenn es sich um ein motorisches Element handelte und wenn es sich um ein angetriebenes Element handelte.

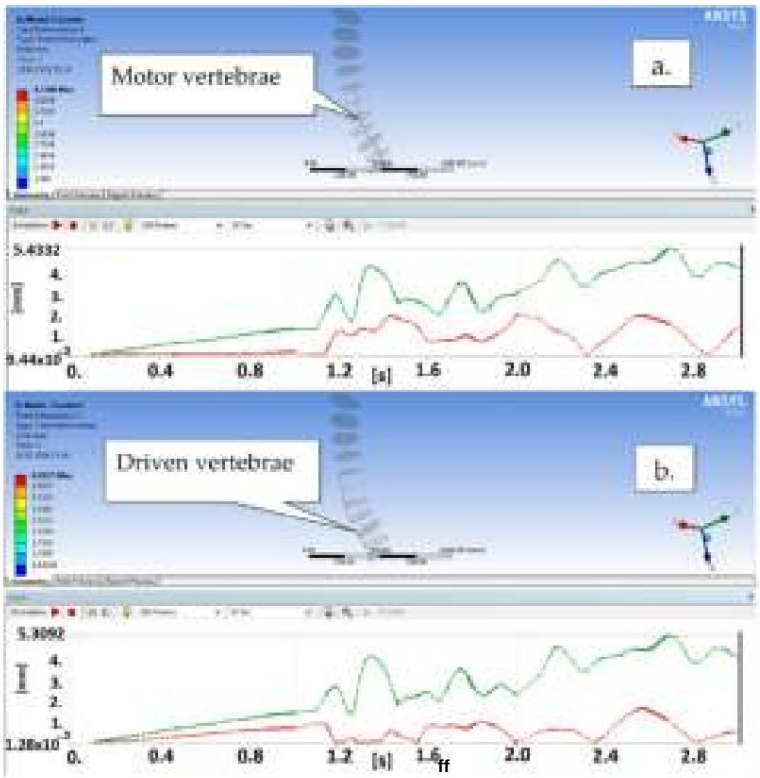
In Abbildung 18 sehen wir die resultierenden Verschiebungen für die Wirbel des Medianmoduls über ein Zeitintervall von 3 s. Nach der numerischen Verarbeitung wurden Werte von 4,3 mm für den motorischen Wirbel und 4,1 mm für den angetriebenen Wirbel erhalten.

Die Schwingungsamplitude korreliert mit der Steifigkeit aller Module der flexiblen Einheit sowie mit der Konfiguration der Betätigungsbefehle.

Basierend auf Abbildung 19 sind **die resultierenden Verschiebungen der Wirbel aus der Betätigung des proximalen Moduls durch maximale Verschiebungskurven gekennzeichnet, die nahezu identisch sind und Werte um 2,288 mm erreichen. Außerdem wurden bei der numerischen Verarbeitung für alle Module unterschiedliche Verschiebungswerte erhalten. Dies liegt an der Steifigkeit, die durch den Übergang vom distalen Modul zum mittleren und dann zum proximalen Modul erhöht wird, das eine höhere Steifigkeit als die beiden anderen aufweist**

Weitere Ergebnisse, wie die resultierenden elastischen Verschiebungen für die gesamte flexible Einheit zu verschiedenen Zeitpunkten, sind in Abbildung 20 aufgeführt. **In Abbildung 20 können wir** also **die verformte Form erkennen, die mit den aufgezeichneten Variationen im Fall der resultierenden elastischen Verschiebungen kompatibel ist. Außerdem hat die gesamte elastische Verformung einen Maximalwert von 21,83 mm und ihre Formvariation ist mit der verformten**

Machine Translated by Google



ff

ff

Abbildung 18. Die resultierende Verschiebungsvariation für die Wirbel des Medianmoduls im globalen Koordinatensystem im Zeitverlauf ((a) – motorische Wirbel; (b) – angetriebene Wirbel). ff

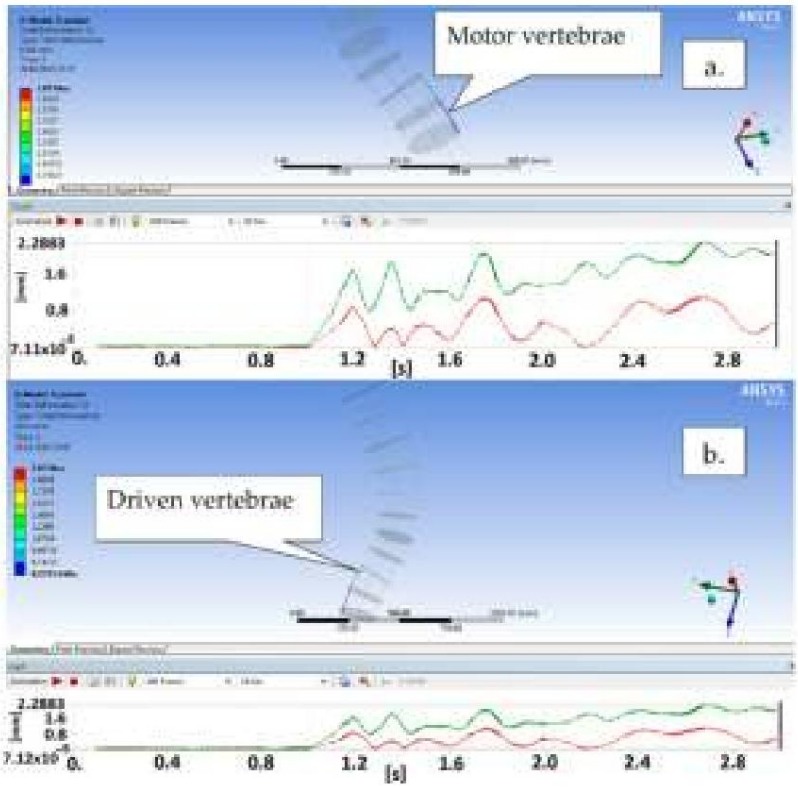


Abbildung 19. Die resultierende Verschiebungsvariation für die Wirbel des proximalen Moduls im globalen Koordinatensystem im Verlauf der Zeit ((a) – motorische Wirbel; (b) – angetriebene Wirbel).

ff

Machine Translated by Google

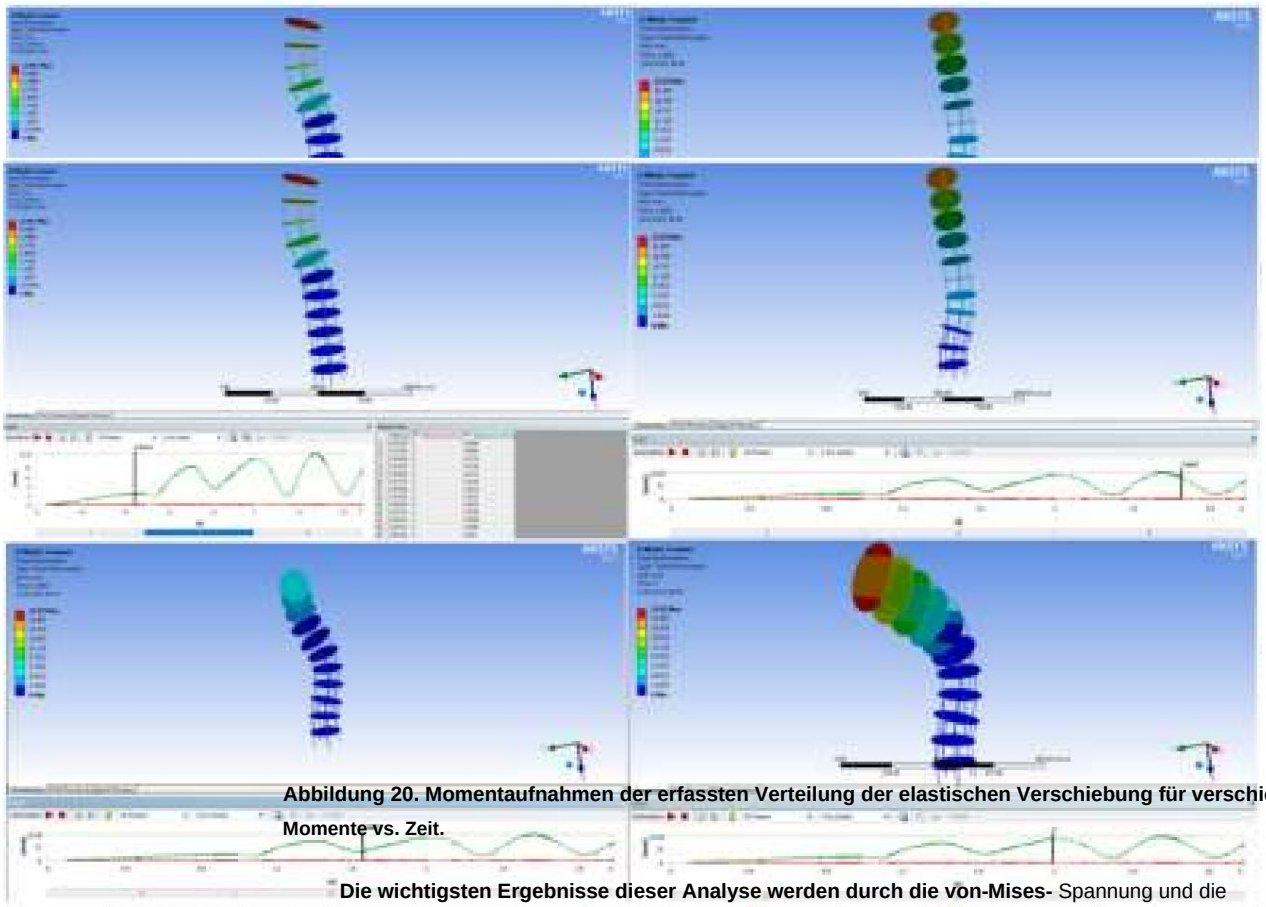


Abbildung 20. Momentaufnahmen der erfassten Verteilung der elastischen Verschiebung für verschiedene zeitliche Momente vs. Zeit.

Die wichtigsten Ergebnisse dieser Analyse werden durch die von-Mises- Spannung und die Verformungen der flexiblen Einheit im Fall der auf **der Endscheibe jedes Moduls zugewiesenen Interessenmarker** dargestellt. Diese sind in den Abbildungen **21–23 dargestellt.**

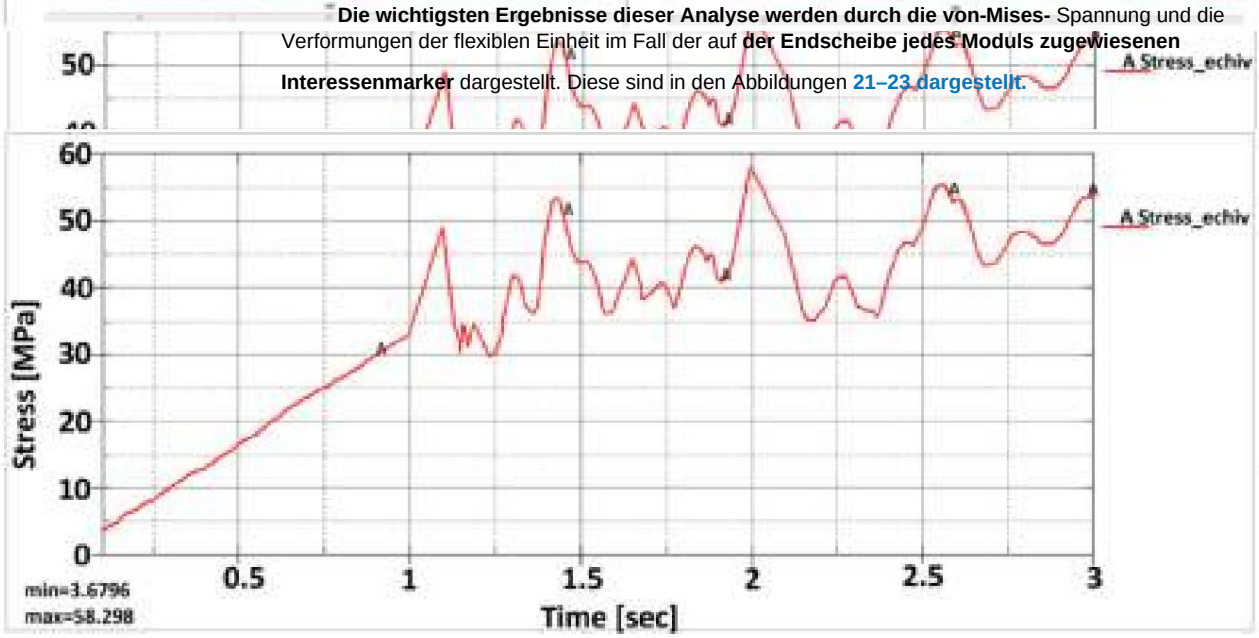


Abbildung 21. Äquivalente Von-Mises-Spannungsverteilung im Zeitverlauf.

Bei den Ergebnissen der von Mises-Spannung betrug der Maximalwert 58,298 MPa, und die Spannungsverteilung wurde auch durch die Betätigungskonfiguration und Steifigkeit für alle Module der flexiblen Einheitsstruktur beeinflusst. Abbildung 22 zeigt daher eine gleichmäßige lineare Entwicklung. Für das erste Schrittintervall gemäß Abbildung 21, in einem Bereich von 32 MPa, wird die äquivalente von Mises-Spannungsentwicklung ein unausgewogenes Verhalten zwischen 32 MPa und 58,298 MPa aufweisen.

Ein weiterer besonderer Aspekt ist, dass die äquivalente von Mises-Spannung bei einem Mindestwert von beginnt

Machine Translated by Google

3,67 MPa. Dieser Wert ergibt sich aus der Anfangssteifigkeit der Gelenkeinheit, auch wenn diese nicht betätigt wird.

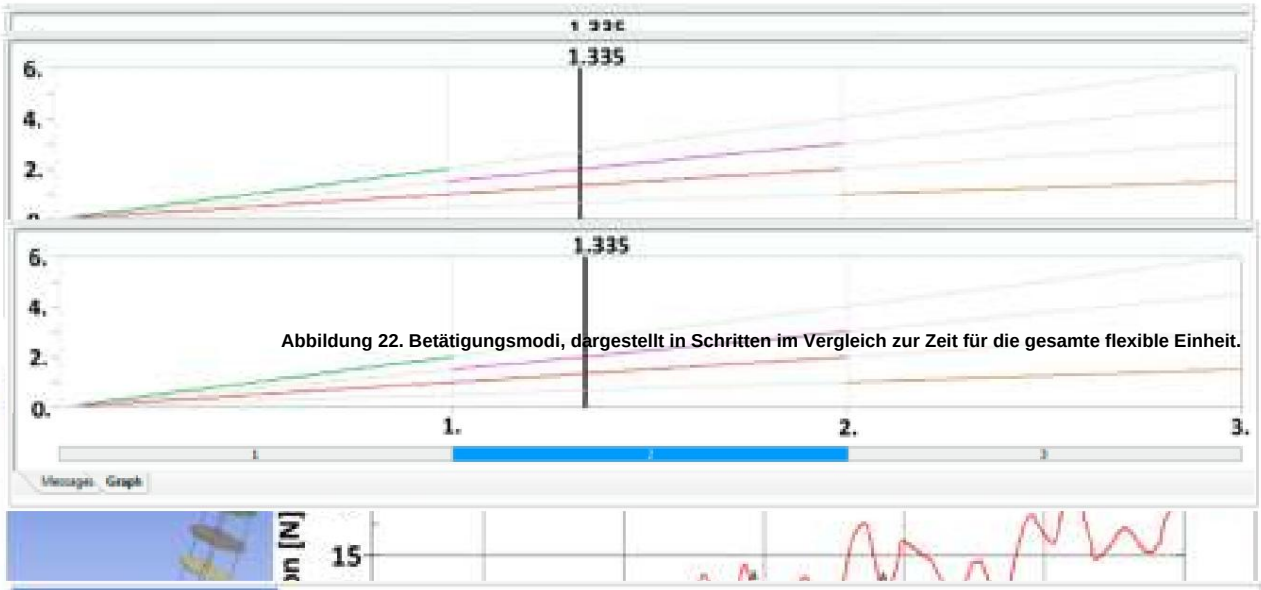


Abbildung 22. Betätigungsmodi, dargestellt in Schritten im Vergleich zur Zeit für die gesamte flexible Einheit.



Abbildung 23. Die Reaktionskraftverteilung für den motorischen Wirbel des distalen Moduls hängt vom Zeitintervall von 2 s (1 bis 3 s) ab.

Weitere Ergebnisse, wie die Reaktionskräfte mehrerer flexibler Einheitskomponenten, werden in den Diagrammen der Abbildungen 24–27 dargestellt. Wenn man diese Ergebnisse im Blick behält, erreicht die Kraft des Antriebswirbels, der für die endgültige Scheibenbetätigung vom distalen Modul, nämlich D11, verwendet wird, im Zeitintervall von 1–3 s einen Wert von 25 N, wie in Abbildung 23 dargestellt.

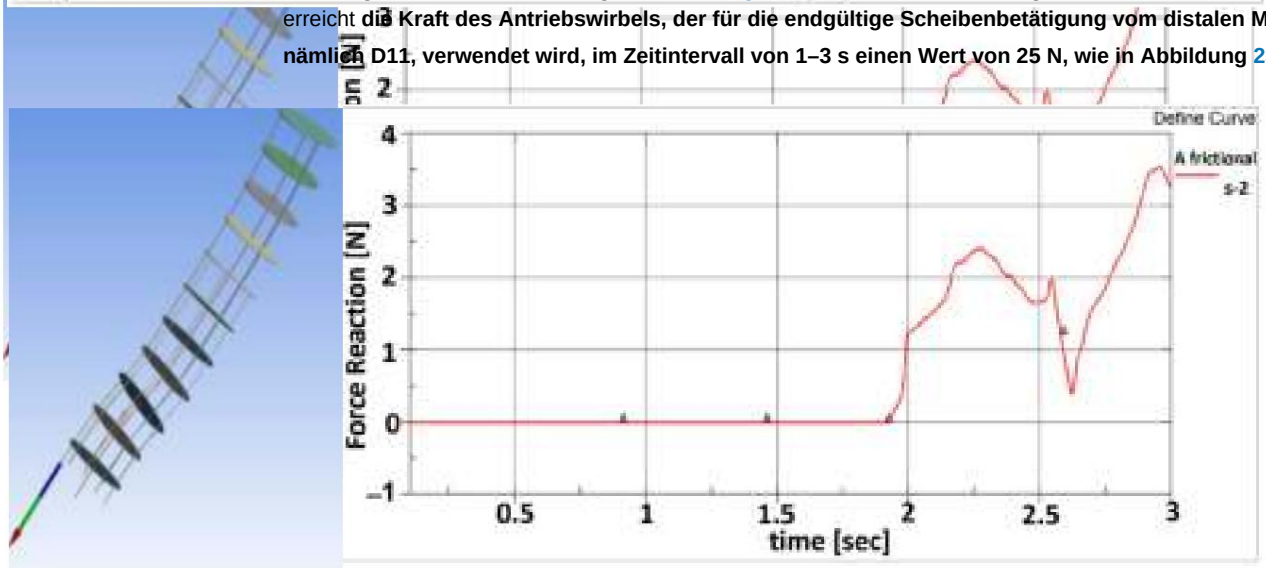


Abbildung 24. Die Reaktionskraftverteilung für einen angetriebenen Wirbel des distalen Moduls hängt vom Zeitintervall von 1 s ab.

Machine Translated by Google

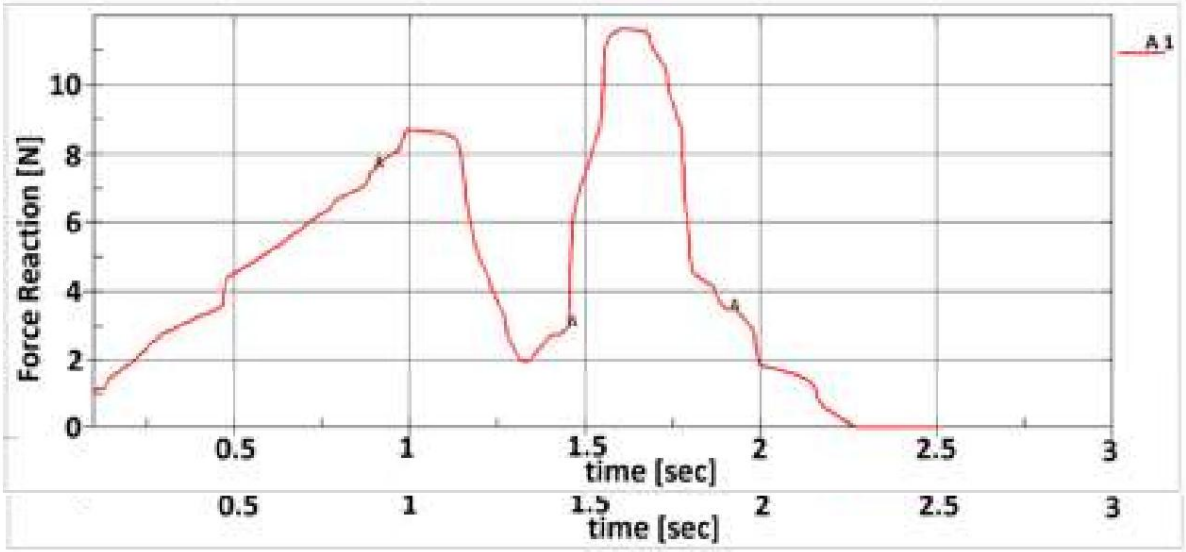


Abbildung 25. Die Reaktionskraftverteilung für den motorischen Wirbel des Medianmoduls hängt vom Zeitintervall von 2 s ab.

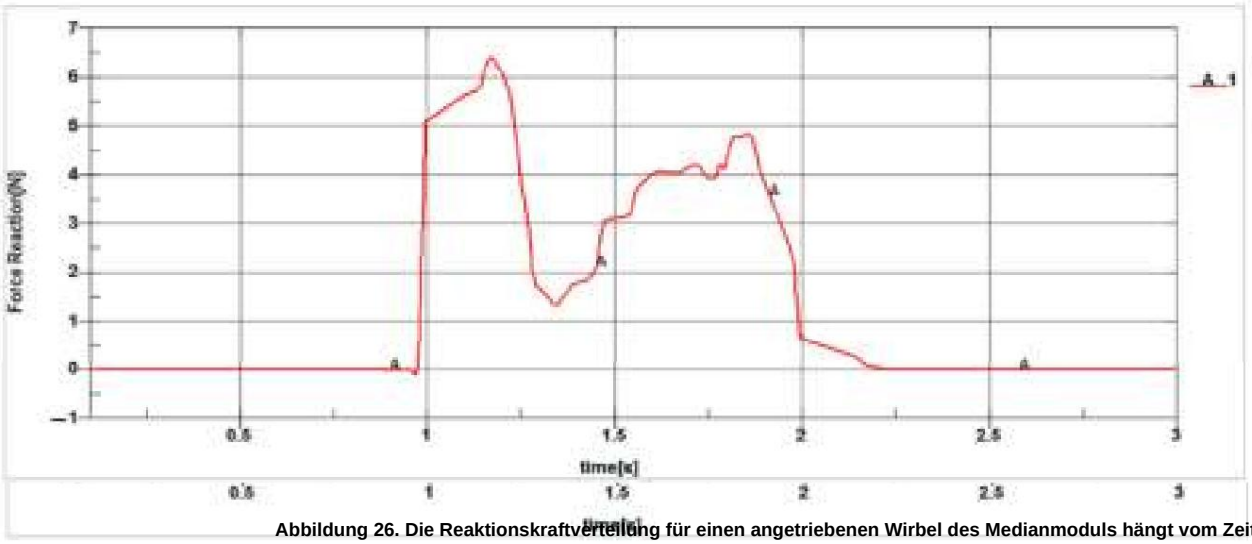


Abbildung 26. Die Reaktionskraftverteilung für einen angetriebenen Wirbel des Medianmoduls hängt vom Zeitintervall von 1 s ab.

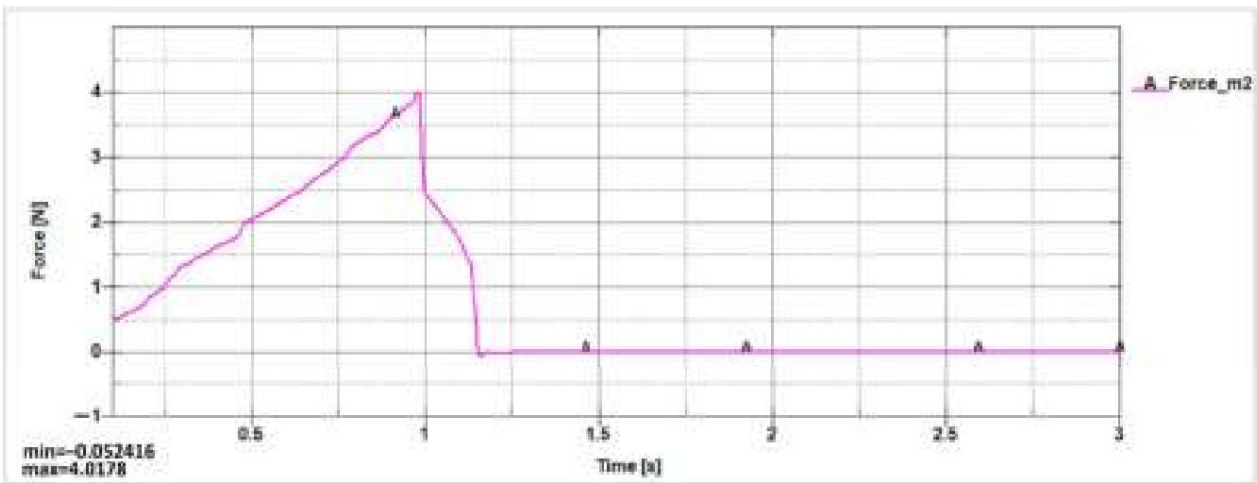


Abbildung 27. Die Reaktionskraftverteilung für einen angetriebenen Wirbel des proximalen Moduls hängt von einem Zeitintervall von 1 s ab.

Machine Translated by Google

In Abbildung 24 weist die erhaltene Reaktionskraft für den angetriebenen Wirbel während der Betätigung des distalen Moduls eine Variation im Bereich von 0 bis 3,5ÿN auf. Dies geschieht in einem Zeitintervall von 2–3ÿSekunden.

Bei der Betätigung des distalen Moduls weist die Antriebswirbel-Betätigungskraft einen nahezu linearen zeitlichen Verlauf auf, wie aus Abbildung **25 hervorgeht. Dieser wird in einem Zeitraum von 0 bis 2 s erzeugt und erreicht einen Maximalwert von 11,8 N.**

Die Reaktionskraft des medianen Modulwirbels wurde während der Zeitraum von 1 bis 2 s und erreichte Werte im Bereich von 0 bis 6,5 N, gemäß Abbildung 26.

Abbildung 27 zeigt eine Reaktionskraft im ersten Zeitintervall von 0 bis 2 s. Diese erreicht am Ende der Betätigungsperiode einen Maximalwert von 4 N. Auch diese hat einen gleichmäßigen linearen Verlauf und beginnt bei 0,5 N, wenn die gesamte polyartikulierte Einheit betätigt wird.

Die Verteilung der Kontaktparameterergebnisse wurde für eine Zwischenscheibe und die zentralen Wirbel analysiert. Die erhaltenen Ergebnisse wurden durch Reibungsspannung, Penetrationsfaktor und Kontaktdruck für ein Zeitintervall von 3 s dargestellt. Diese Ergebnisse sind in den Abbildungen 28–30 dargestellt.

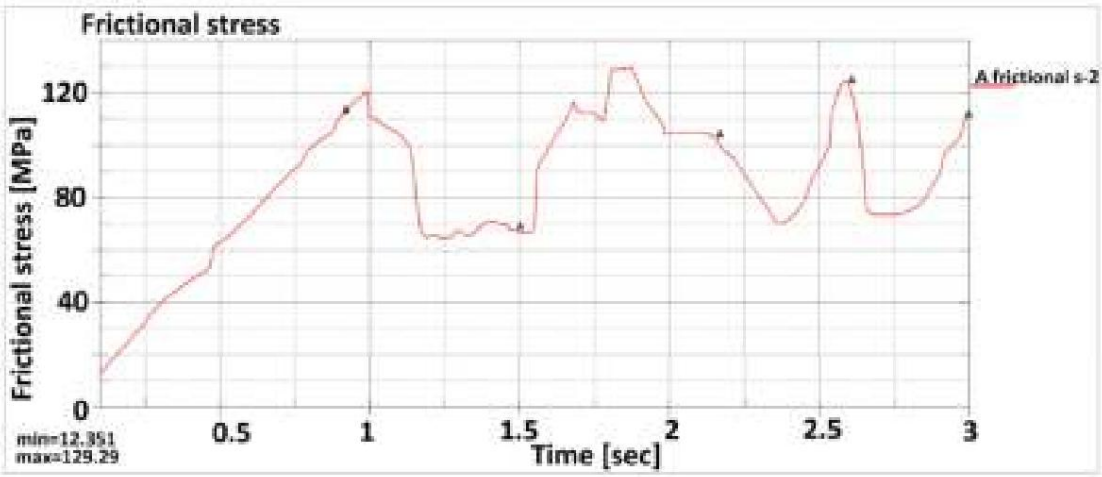


Abbildung 28. Die Reibungsspannungsverteilung hängt von der Zeit ab.

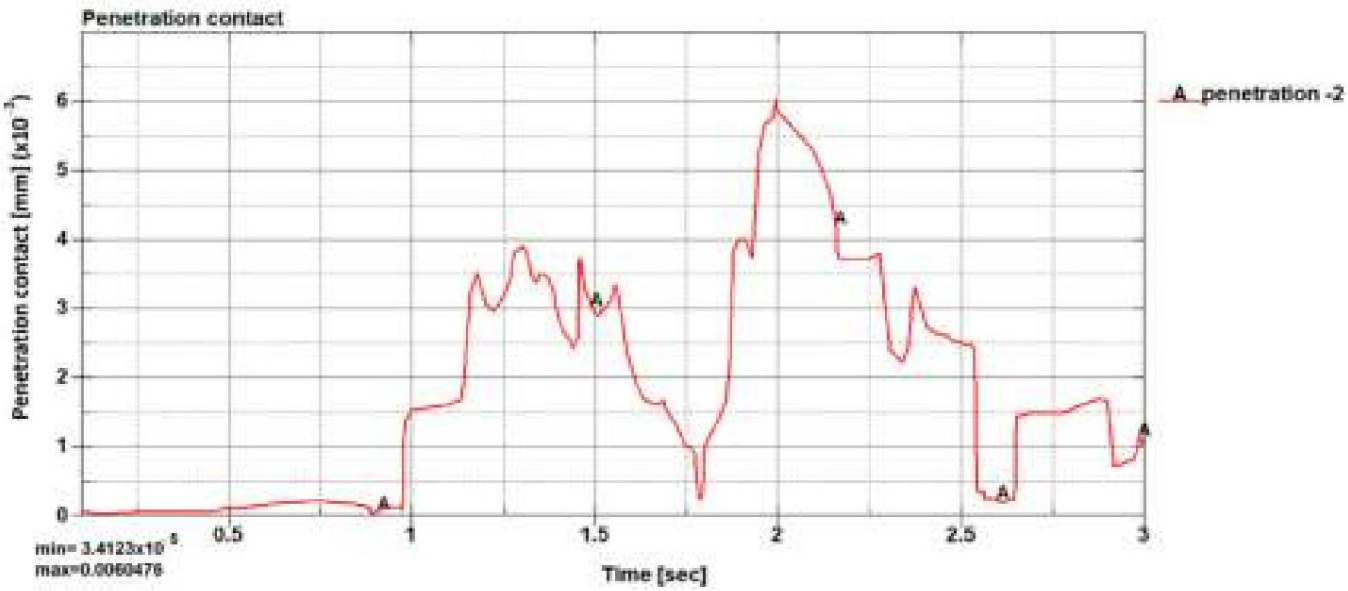


Abbildung 29. Die Penetrationskontaktvariation für die mechanische Systemkontaktdefinition im Zeitverlauf.

Machine Translated by Google



(A) **(B)**

Abbildung 30. Der Prototyp des vielgelenkigen Robotersystems ist mit den beiden flexiblen Einheitsformen ausgestattet: (a) zylindrische Form und (b) tronkonische Form.

Abbildung 29 zeigt, dass der Penetrationsfaktor zwischen Kontaktflächen und Zielflächen sehr klein ist und vernachlässigt werden kann. Laut Abbildung 29 erreicht dieser einen Maximalwert von 0,0060476 mm. Während der Betätigung erreicht die Reibungsspannung einen Wert von fast 130 MPa und weist aufgrund der Reibung zwischen Elementen und des geraden Kontakts ein unausgeglichenes Verhalten auf, wie in Abbildung 28 zu sehen ist . **Während der Simulationen ist eine symmetrische Druckverteilung erkennbar, wenn ein Modul betätigt und ein anderes freigegeben wird. Die** Schwingungen, die während der virtuellen Simulationen auftreten und auf den Variationskurven **in den Abbildungen 25–29 erkennbar sind , werden hauptsächlich durch die Kontaktdefinitionsparameter Einrichtung, Kontakttyp, Integrationsschritt und -methode verursacht, korreliert mit dem Zeitintervall zur Überwachung der Systembewegung.**

6. Prototyp des vielgelenkigen Robotersystems

Der experimentelle Prototyp wurde gemäß den Designparametern des virtuellen 3D-Modells erstellt, aber auch durch die Ergebnisse der virtuellen Simulation v
Dieses hat zwei Haupteinheiten, nämlich eine für die Betätigung des Robotersystems und die andere, die durch die flexible Einheit dargestellt wird. Die Translationsbewegung wurde umgewandelt und von den Rotationsmotoren über neun mechanische Mutter-Schrauben-Getriebe von der flexiblen Einheit auf das betreffende Modul übertragen. Die Betätigungseinheit hat auch mechanische Vorrichtungen, die zur axialen Verschiebungskompensation verwendet werden. Die entworfenen Prototypen für beide Formen der flexiblen Einheit, d. h. die zylindrische und die tronkonische, sind in Abbildung 30 dargestellt. **Die beiden Lösungen gemeinsame Betätigungseinheit** ist in de



Abbildung 31. Die polyartikulierte Roboter-Betätigungseinheit.

Machine Translated by Google



Abbildung 32. Führungssysteme für mechanische Mutter-Schrauben-Getriebe.

7. Experimentelle Bewegungsanalyse

Beide Prototypen wurden durch mehrere Tests unter dynamischen Bedingungen experimentell evaluiert . Der Zweck dieser Analyse besteht darin, den experimentellen Prototyp zu validieren und auch die Befehls- und Kontrollprotokolle zu analysieren. Um die vorgeschlagenen Ziele zu erreichen, wurde die Videobewegungsausrüstung CONTEMPLAS verwendet [27]. Das Prinzip dieser Analyse ist in Abbildung 33 dargestellt . Somit werden die experimentellen Testergebnisse des evaluierten Robotersystems für eine Lösung präsentiert, nämlich die mit einer tronkonischen Form.

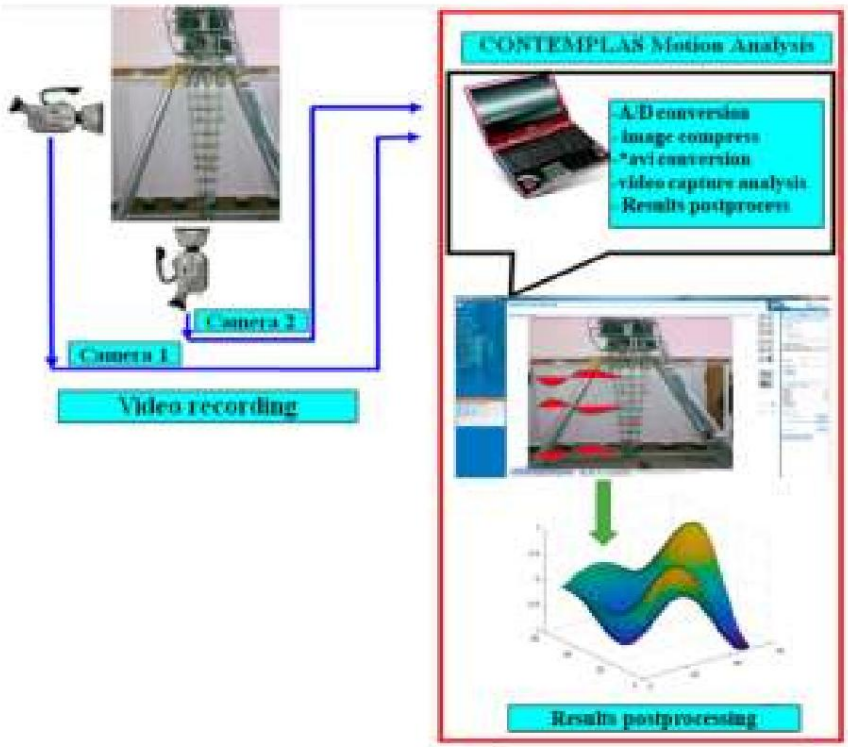


Abbildung 33. CONTEMPLAS-Arbeitsablauf zur Bewegungsanalyse.

Dieses Gerät verfügt über zwei Kameras, die Videosequenzen mit bis zu 350 Bildern/Sekunde aufzeichnen können. Die Videoaufzeichnung erfolgte unter Beibehaltung der gleichen Bedingungen wie bei der virtuellen Simulation , nämlich Perioden- und Arbeitsbetätigungsmodi für alle Module. Der erste Schritt der vorgeschlagenen experimentellen Analyse bestand darin, einen Aufbau für die Ausrüstung und auch für das polyartikulierte Robotersystem durchzuführen, um seinen Arbeitsbereich zu bewerten. Dies ist i Die Videokameras wurden in einem Winkel von 90 Grad zueinander und in einem Abstand von 2,5 m zum analysierten Prototyp platziert, wie in Abbildung 34 zu sehen ist.

Machine Translated by Google

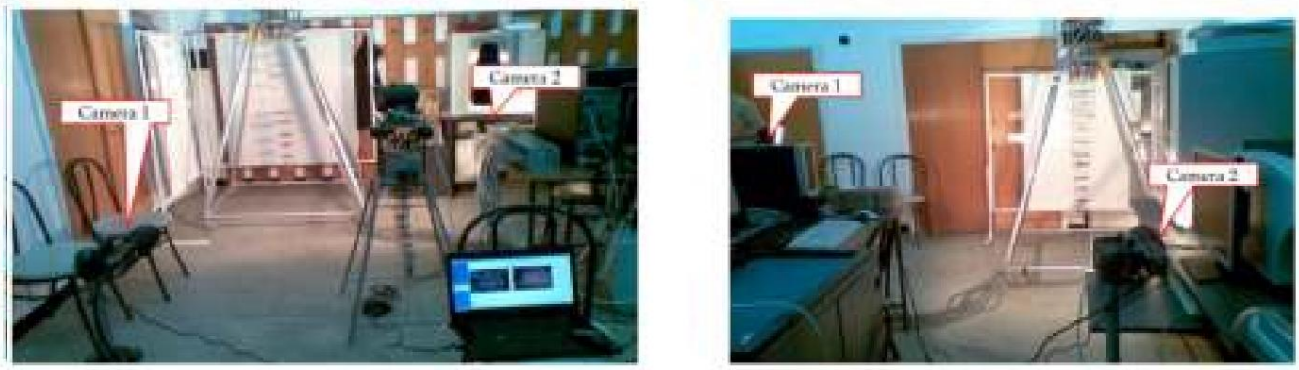


Abbildung 34. Experimenteller Analyseaufbau für das analysierte Robotersystem.

Zur **Bewertung des Arbeitsbereichs, der durch die entwickelten experimentellen Trajektorien charakterisiert wurde, wurden zwölf Reflexmarker an dem polyartikulierten Robotersystem Die Gerätehardware und die Templo Plus V2010-Software können die Markierungsposition in jeder Sequenz der aufgezeichneten Videosequenz identifizieren. In diesem Fall bestand die Aufgabe für die analysierten Markierungen, die an den zentralen Wirbeln angebracht waren, in Flugbahnvariationen, gemä** In Abbildung **36 sind einige Schnappschüsse während der Flugbahnauswertung zu sehen .**



Abbildung 35. Markierungsbefestigung am polyartikulierten Robotersystem.

Unter Berücksichtigung der erhaltenen experimentellen Analysetests wurde eine vergleichende Studie auf Grundlage der durch virtuelle Simulationen und der Ergebnisse aus experimentellen Tests erzielten Ergebnisse durchgeführt. Diese Analyse wurde mit der Software LS-Dyna R7.1 durchgeführt, um die Genauigkeit der ausgeführten Bewegung festzustellen. Somit werden die wichtigsten Ergebnisse durch die Gesamtverformung des gesamten polyartikulierten Robotersystems dargestellt. Diese vergleichende Studie konzentriert sich auf die Überwachung der zentralen Markierungsposition auf der Endscheibe des distalen Moduls. Diese Ergebnisse sind in den Abbildungen 37–39 dargestellt, wo das Verhalten der Verformungskomponenten den Nachweis der Validierung des Prototyps des polyartikulierten Robotersy

Machine Translated by Google



Abbildung 36. Einige Schnappschüsse während der experimentellen Tests zur Flugbahnbewertung.

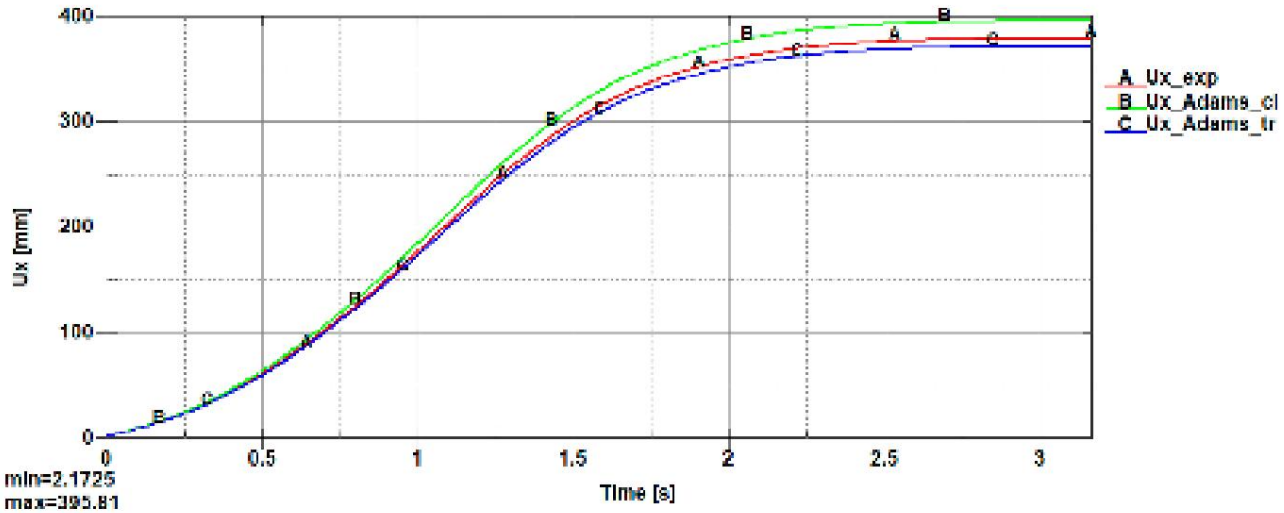


Abbildung 37. Gesamtverschiebung auf der X-Achse des polyartikulierten Robotersystems im Zeitverlauf: A – Experimentelles tronkonisches Modell; B – Virtuelles Adams-Modell mit einer zylindrischen flexiblen Einheit; C – Virtuelles Adams-Modell mit einer tronkonischen Form der flexiblen Einheit.

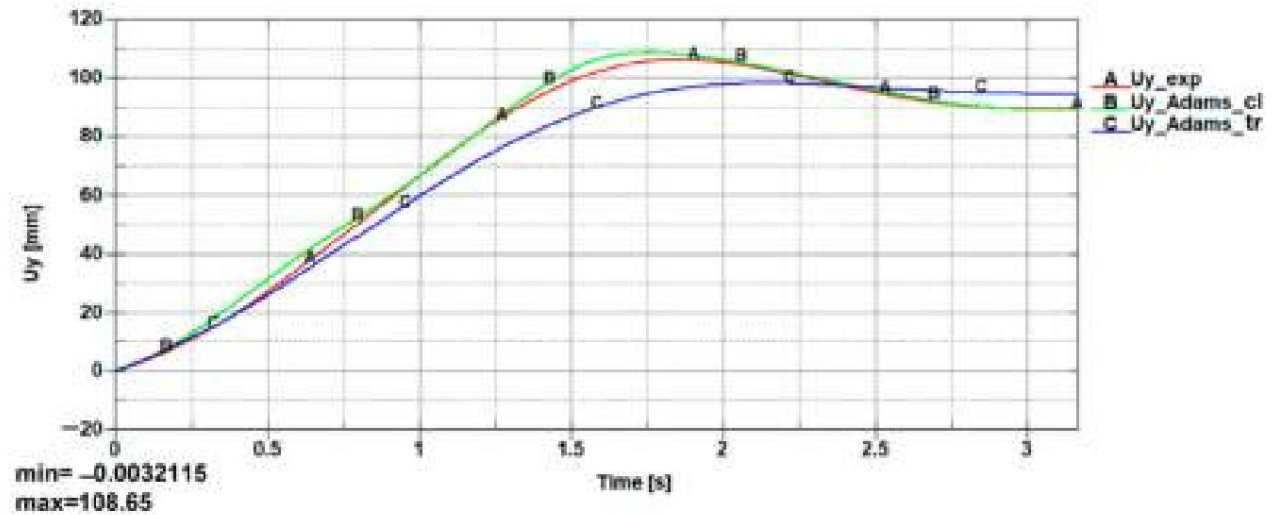


Abbildung 38. Gesamtverschiebung auf der Y-Achse des polyartikulierten Robotersystems im Zeitverlauf: A – Experimentelles tronkonisches Modell; B – Virtuelles Adams-Modell mit einer zylindrischen flexiblen Einheit; C – Virtuelles Adams-Modell mit einer tronkonischen Form der flexiblen Einheit.

Machine Translated by Google

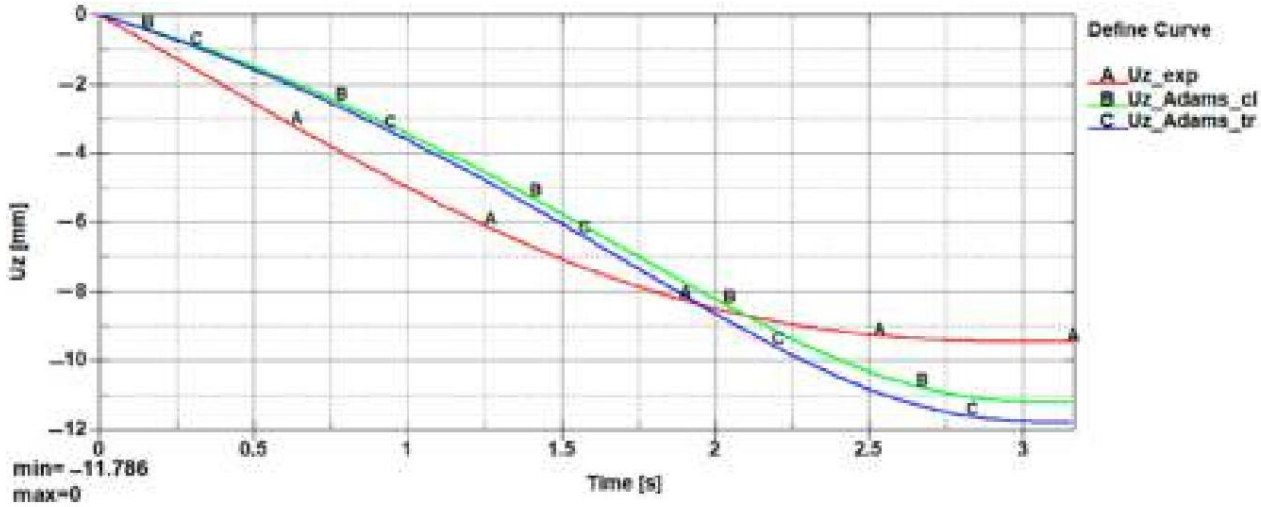


Abbildung 39. Gesamtverschiebung auf der Z-Achse des polyartikulierten Robotersystems im Zeitverlauf: A – Experimentelles tronkonisches Modell; B – Virtuelles Adams-Modell mit einer zylindrischen flexiblen Einheit; C – Virtuelles Adams-Modell mit einer tronkonischen Form der flexiblen Einheit.

Abbildung 37 zeigt ein Diagramm der Gesamtverschiebung in X-Richtung für den erhaltenen Prototyp bzw. virtuelle Simulationen, die mit der MSC Adams-Software durchgeführt wurden. Daraus lässt sich erkennen, dass alle Modelle die gleiche Flugbahn aufweisen, die von 0 bis zu einem Maximalwert von 398,22 mm reicht, der für das virtuelle Modell des polyartikulierten Roboters mit einer zylindrischen Form der flexiblen Einheit erreicht wurde. Im Fall des experimentellen Prototyps erreicht dieser einen Wert von 382,31 mm und liegt viel näher am dritten bzw. demjenigen, der durch eine flexible Einheit mit einer tronkonischen Form gekennzeichnet ist. Der dritte erreicht einen Wert von 380,77 mm. Die Genauigkeit liegt also bei etwa 4,18

Durch Betrachtung des in Abbildung 38 dargestellten Diagramms **kann festgestellt werden, dass alle Pfade der analysierten Modelle bei der Gesamtverschiebung auf der Y-Achse eine entsprechende Flugbahn aufweisen und ein Maximalwert von 109,63ÿmm aufgezeichnet wurde, der dem virtuellen Modell des Polygelenkroboters entspricht, der durch eine flexible Einheit mit zylindrischer Form gekennzeichnet ist. Beim im Rahmen der experimentellen Tests analysierten Prototypen betrug der maximal aufgezeichnete Wert 106,32 mm. Im dritten Fall, nämlich beim virtuellen Modell, das durch die tronkonische Form gekennzeichnet ist, erreichte dieser einen Maximalwert von 99,64 mm. In diesem Fall wurde eine Genauigkeit von 6,064 % festgestellt.**

Eine ähnliche vergleichende Analyse wurde im Fall der Gesamtverschiebung auf der Z-Achse durchgeführt, wie im Diagramm in Abbildung 39 dargestellt. **In diesem Fall haben alle Pfade entsprechende Trajektorien, aber für die analysierten Modelle wurden unterschiedliche Werte aufgezeichnet. Beim Betrachten des mit MSC Adams simulierten virtuellen Modells mit mehreren Gelenken und einer tronkonischen Form der flexiblen Einheit kann ein Mindestwert von –11,774 mm beobachtet werden, aber für die experimentelle Analyse des Prototyps des Roboters mit mehreren Gelenken wurde ein Mindestwert von –9,678 mm aufgezeichnet. Im letzteren Fall, nämlich beim virtuellen Modell des Robotersystems mit einer zylindrischen Form der flexiblen Einheit, wurde ein Mindestwert von –11,33 Millimetern aufgezeichnet, was einer Genauigkeit von 8,783 % e**

8. Schlussfolgerungen

Im Rahmen dieser Forschung wurde ein Prototyp eines polyartikulierten Robotersystems validiert. Dieser Roboter kann in mehreren grundlegenden Bereichen wie der Automobilindustrie, der Medizin, der militärischen Verteidigung und sogar der Architektur eingesetzt werden. Das virtuelle Prototyping des Robotersystems wurde mit MSC Adams entwickelt. Es wurde eine Schnittstelle zum Importieren des vorgeschlagenen CAD- Modells definiert, wobei alle Mechanismuskomponenten als Unterbaugruppen betrachtet wurden und auch die auferlegten Konturbedingungen berücksichtigt wurden. Ein gleichwertiges kinematisches Modell des vorgeschlagenen mechanischen Systems wurde erstellt, indem die kinematischen Gelenke und einige lokale **Referenzsysteme in den Massenzentren der flexiblen Einheitsverbindungen bzw. in den Gel**

Machine Translated by Google

Zentren. Die Motorgelenke wurden gemäß den Bewegungsgesetzen definiert, die für alle Aktuatoren in einem Zeitintervall von 3 s festgelegt wurden. Es wurde ein Verfahren zur Umwandlung der Festkörper in verformbare Körper ermittelt, indem sie in tetraedrische finite Elemente eingearbeitet wurden. Dabei wurden der Verbindungstyp zwischen den Elementen und die Definition des Knotenaufbaus im Master- und Slave-Modus berücksichtigt.

Es wurde eine elastische dynamische Analyse durchgeführt, die aus zwei Phasen besteht: einer Modalanalyse zur Ermittlung der Eigenfrequenzen und Eigenformen der flexiblen kinematischen Elemente und einer dynamischen Analyse der flexiblen Einheit auf Grundlage der Craig-Bampton- Methode, um die zeitliche Variation der kinematischen Parameter zu ermitteln.

Der Validierungskern des Prototyps konzentriert sich auf die Bewegung der zentralen Wirbel als starrer Körper, aber auch als verformbarer Körper. Die Bewegungsanalyse wurde an bestimmten Knoten/ Markierungen durchgeführt, abhängig vom globalen Referenzsystem und anderen lokalen Referenzsystemen.

Die Bewegung starrer Körper wird durch einen verallgemeinerten Koordinatensystemsatz definiert, der die Identifikation des Ursprungs des beweglichen Referenzsystems gemäß dem globalen Referenzsystem und seine Ausrichtung durch Euler-Winkel darstellt. Die Bewegung verformbarer Körper wurde durch einen modalen Koordinatensatz basierend auf der Craig-Bampton-Methode definiert.

Die Variationen der elastischen Verformung wurden in Abhängigkeit von der Zeit für Winkel- und Linearverschiebungen des in den zentralen Wirbeln platzierten Endknotens bestimmt. Es ist wichtig anzumerken, dass die durch numerische Werte und Kurvenverläufe aus virtuellen Simulationen dargestellten Diagrammergebnisse denen ähneln, die bei der experimentellen Analyse für den entworfenen Robotersystemprototyp erzielt wurden.

Das mit Ansys erstellte virtuelle Prototyping ist komplexer Natur und nutzt die dynamische Charakterisierung der zwischen verformbaren Elementen und Scheiben erstellten Kontaktmodelle. Die durchgeführte dynamische Analyse weist ein nichtlineares Verhalten auf.

Bei der Kontaktdefinition wurden folgende Bedingungen berücksichtigt: die Translationsbewegung zwischen Betätigungswirbeln und -scheiben, das Finite-Elemente-Netzwerk auf der Ebene der Kontaktflächen, Penetrationsphänomene zwischen Kontakt- und Zielflächen und Differentialgleichungen zwischen Kontaktart und Integrationsmethode.
Das mit der Ansys-Software ausgewertete verarbeitete Modell unterscheidet sich völlig von dem mit MSC Adams analysierten Modell, da alle Elemente in Kontakt stehen und als verformbar gelten.

Durch diese Analyse wurden Variationsgesetze der kinematischen Parameter ermittelt, abhängig von Zeit und Belastung, Verformungen, Beanspruchung und den daraus resultierenden Betätigungskräften der Antriebselemente. Die verformten Formen der flexiblen Einheit wurden durch numerische Simulationen ermittelt. Diese Formen definieren den Arbeitsbereich des Robotersystems und werden durch die Zeiteinstellungen für das Befehls- und Steuerungsverfahren beeinflusst. Das Verformungsverhalten der zentralen Wirbel wurde durch Zeitvariationsdiagramme im Blick behalten.

Der Hauptbeitrag dieser Forschung besteht in der Entwicklung eines Kontaktmodells mit Möglichkeiten zur Dumping-Kontrolle, der Eindringtiefe zwischen verschiedenen Oberflächentypen wie Kontakt und Ziel, dem normalen Steifigkeitsfaktor für Tests und der Auswahl geeigneter Faktoren aus ANSYS-zulässigen Formulierungen (Pure Penalty, MPC, Augmented Lagrange und Normal Lagrange). Das erhaltene flexible geometrische Einheitsmodell wurde mithilfe des DesignModeller-Moduls der ANSYS R14.5- Software analysiert und parametrisiert, um zukünftige Forschungen wie Optimierungsprozesse der Komponenten in einem dynamischen Modus ins Auge zu fassen.

Die mit der Software MSC Adams 2012 und ANSYS R14.5 erstellten virtuellen Modelle der flexiblen Einheit sind parametrisiert und bieten Optimierungsmöglichkeiten unter kinematischen und dynamischen Bedingungen.

Die Robotersystemarchitektur, die das Antriebssystem, d. h. die Befehls- und Steuereinheit, umfasst, stellt die grundlegende Basis eines Robotersystemkonzeptentwurfs für ein zukünftiges miniaturisiertes Robotersystem dar, das speziell für minimalinvasive chirurgische Eingriffe wie [17] entwickelt wurde.

Machine Translated by Google

Beiträge der Autoren: Konzeptualisierung, ND und SD; Methodik, SD und ND; Software, IG; Validierung, CC, SD und ND; formale Analyse, IG; Untersuchung, CC; Ressourcen, SD; Datenkuratierung , SD und IG; Schreiben – Vorbereitung des Originalentwurfs, CC; Schreiben – Überprüfung und Bearbeitung, CC und ND; Visualisierung, ND; Überwachung, CC und ND; Projektverwaltung, ND; Mittelbeschaffung , ND. Alle Autoren haben die veröffentlichte Version des Manuskripts gelesen und stimmen ihr zu.

Finanzierung: Diese Forschung erhielt keine externe Finanzierung.

Erklärung zur Datenverfügbarkeit: Alle in der aktuellen Forschung generierten Daten sind im Manuskript aufgeführt.

Interessenkonflikte: Die Autoren erklären, dass keine Interessenkonflikte bestehen.

Verweise

1. **Bajo, A.; Simaan, N. Hybride Bewegungs-/Kraftsteuerung von Multibackbone-Robotern.** Int. J. Robot. Res. **2015,** 35, **1–13.** [CrossRef]
2. **Hannan, M.; Walker, I. Der „Elefantenrüssel“-Manipulator, Design und Implementierung. In Proceedings der IEEE/ASME International Conference on Advanced Intelligent Mechatronics (AIM), Como, Italien, 8.–12. Juli 2001; Seiten 14–19.**
3. **Hirose, S.** Biologisch inspirierte Roboter: Schlangenartige Fortbewegungsmaschinen und Manipulatoren; **Applied Mechanics Reviews; Oxford University Press: Oxford, Großbritannien, 1995; Band 48, S. 27.**
4. **Kim, Y.; Cheng, S.; Kim, S.; Iagnemma, K. Entwurf eines röhrenförmigen, schlangenartigen Manipulators mit Versteifungsfähigkeit durch Schichtverklemmung . In Proceedings der 2012 IEEE/RSJ International Conference on Intelligent Robots and Systems, Vilamoura, Portugal, 7.–12. Oktober 2012.**
5. **Roppenecker, DB; Schuster, L.; Coy, JA; Traeger, MF; Entsfellner, K.; Lueth, TC Modularer Körper des mehrarmigen schlangenartigen Roboters. In Proceedings der International Conference on Robotics and Biomimetics, Bali, Indonesien, 5.–10. Dezember 2014.**
6. **Gu, X.; Ren, H. Eine Untersuchung transoraler Robotermechanismen: Distale Geschicklichkeit, variable Steifheit und Triangulation.** Cyborg Bionic Syst. **2023, 4, 0007.** [CrossRef] [PubMed]
7. **Shi, L.; Ma, Z.; Yan, S.; Zhou, Y. Cucker-Smale-Flocking-Verhalten für Multiagenten-Netzwerke mit Coopetition-Interaktionen und Kommunikationsverzögerungen.** IEEE Trans. Syst. Man Cybern. Syst. **2024, 1–10.** [CrossRef]
8. **Shi, L.; Ma, Z.; Yan, S.; Ao, T. Flocking Dynamics für Kooperations-Antagonismus-Multi-Agenten-Netzwerke mit begrenzten Kommunikationsressourcen.** IEEE Trans. Circuits Syst. I Regul. Pap. **2024,** 71, **1396–1405.** [CrossRef]
9. **Kim, S.-H.; Choi, H.-S.; Keum, B.; Chun, H.-J. Robotik in der gastrointestinalen Endoskopie.** Appl. Sci. **2021,** 11, **11351.** [CrossRef]
10. **Clark, AB; Mathivannan, V.; Rojas, N. Ein Kontinuum-Manipulator für Open-Source-Forschung in der chirurgischen Robotik und gemeinsame Entwicklung.** IEEE Trans. Med. Robot. Bionics **2021, 3, 277–280.** [CrossRef]
11. **Ivanescu, M.; Cojocaru, D.; Bizdoaca, N.; Florescu, M.; Popescu, N.; Popescu, D.; Dumitru, S. Grenzkontrolle durch Grenze Beobachter für hyperredundante Roboter.** Int. J. Comput. Commun. Control **2010, 5, 755–767.** [CrossRef]
12. **Xu, S.; He, B.; Zhou, Y.; Wang, Z.; Zhang, C. Eine hybride Positions-/Kraftkontrollmethode für einen Kontinuumsroboter mit Roboter- und Umweltverträglichkeit.** IEEE Access **2019, 7, 100467–100479.** [CrossRef]
13. **Wooten, MB; Walker, ID Umweltinteraktion mit Kontinuumsrobotern unter Ausnutzung von Auswirkungen.** IEEE Robot. Autom. Lett. **2022, 7, 10136–10143.** [CrossRef]
14. **Chen, Y.; Wang, L.; Galloway, K.; Godage, I.; Simaan, N.; Barth, E. Modalbasierte Kinematik und Kontakterkennung von Softrobotern.** Weicher Roboter. **2020, 8, 298–309.** [CrossRef]
15. **Liu, H.; Farvardin, A.; Pedram, SA; Iordachita, I.; Taylor, RH; Armand, M. Große Ablenkungsformerkennung eines Kontinuumsmanipulators für minimalinvasive Chirurgie. In Proceedings der IEEE International Conference on Robotics and Automation ICRA, Seattle, WA, USA, 26.–30. Mai 2015; Seiten 201–206.**
16. **Desai, JP; Sheng, J.; Cheng, SS; Wang, X.; Deaton, NJ; Rahman, N. Auf dem Weg zu patientenspezifischen 3D-gedruckten Robotersystemen für Chirurgische Eingriffe.** IEEE Trans. Med. Robot. Bionics **2019, 1, 77–87.** [CrossRef] [PubMed]
17. **Dumitru, N.; Ciurezu-Gherghe, L.; Copilusi, C.; Geonea, I.; Dumitru, S. Theoretische und experimentelle Untersuchungsmethoden für ein Robotersystem mit verformbaren Elementen für die minimalinvasive Chirurgie.** Mech. Mach. Theory **2022,** 167, **104459.** [CrossRef]
18. **Zhang, Z.; Dequidt, J.; Back, J.; Liu, H.; Duriez, C. Bewegungssteuerung eines kabelbetriebenen Kontinuumkatheterroboters durch Kontakte.** IEEE Robot. Autom. Lett. **2019 , 4, 1852–1859.**
19. **Oliver-Butler, K.; Till, J.; Rucker, DC Kontinuierliche Robotersteifigkeit unter externen Lasten und vorgeschriebenen Sehnenverschiebungen.** IEEE Trans. Robot. **2019,** 35, **403–419.** [CrossRef]
20. **Goldman, RE; Bajo, A.; Simaan, N. Nachgiebige Bewegungssteuerung für Multisegment-Kontinuumsroboter mit Antriebskraftsensor .** IEEE Trans. Robot. **2014,** 30, **890–902.** [CrossRef]
21. **Dumitru, S.; Cojocaru, D.; Marghitu, D. Computergestützter Entwurf eines hyperredundanten Manipulators.** Adv. Elektr. Berechnen. Ing. **2013,** 13, **51–56.** [CrossRef]
22. **Grazioso, S.; Di Gironimo, G.; Siciliano, B. Ein geometrisch exaktes Modell für weiche Kontinuumsroboter: Die Formulierung des Finite-Elemente-Deformationsraums.** Soft Robot. **2019, 6, 790–811.** [CrossRef]
23. **Craig, RR; Bampton, CC Kopplung von Substrukturen für dynamische Analysen.** AIAA J. **1998, 6, 1313–1319.** [CrossRef]
24. **Duan, J.; Zhang, K.; Qian, K.; Hao, J.; Zhang, Z.; Shi, C. Ein Betriebssteifigkeitsregler für den medizinischen Kontinuumsroboter Basierend auf Impedanzkontrolle.** Cyborg Bionic Syst. **2024, 8, 0110.** [CrossRef] [PubMed] [PubMed Zentral]

Machine Translated by Google

25. Zhang, S.; Li, F.; Fu, R.; Li, H.; Zou, S.; Ma, N.; Qu, S.; Li, J. Ein vielseitiger Kontinuum-Greifroboter mit verdeckbarem Greifer. Cyborg Bionic Syst. **2023, 4, 0003. [CrossRef]**

26. Chirikjian, GS; Burdick, JW Ein modaler Ansatz zur hyperredundanten Manipulatorkinematik. IEEE Trans. Robot. Autom. **1994,** 10, **343–353 .**

27. CONTEMPLAS-Benutzerhandbuch. Online verfügbar: www.contemplas.com (abgerufen am 23. Juli 2018).

Haftungsausschluss/Anmerkung des Herausgebers: Die in allen Veröffentlichungen enthaltenen Aussagen, Meinungen und Daten sind ausschließlich die der einzelnen Autoren und Mitwirkenden und nicht die von MDPI und/oder den Herausgebern. MDPI und/oder die Herausgeber lehnen jegliche Verantwortung für Personen- oder Sachschäden ab, die aus den im Inhalt erwähnten Ideen, Methoden, Anweisungen oder Produkten resultiere

Machine Translated by Google

Berechnung

MDPI

Artikel

Ein neuartiger gemischter endlich-/unendlichdimensionaler Port-Hamiltonoperator Modell eines mechanischen Beatmungsgeräts

Milka Cl Madahana 1,*, John ED Ekoru [2] und Otis TC Nyandoro [2]

[1] School of Mining Engineering, University of the Witwatersrand, 2. Stock, ARM-Gebäude, 1 Jan Smuts Avenue, Braamfontein, Johannesburg 2017,
[2] Südafrika; School of Electrical and Information Engineering, University of the Witwatersrand, 2. Stock, ARM-Gebäude, 1 Jan Smuts Avenue, Braamfontein, Johannesburg 2017, Südafrika; john.ekoru@wits.ac.za (JEDE); otis.nyandoro@wits.ac.za (OTCN)
* Korrespondenz: milka.madahana@wits.ac.za

Zusammenfassung: Die künstliche Beatmung ist eine lebensrettende Behandlung für schwerkranke Patienten, die aufgrund einer Verletzung oder Krankheit Schwierigkeiten haben, selbstständig zu atmen. Weltweit gab es jedes Jahr eine große Zahl von Personen, die eine künstliche Beatmung benötigten. Die COVID-19-Pandemie hat die Bedeutung der künstlichen Beatmung ans Licht gebracht, die eine wichtige Rolle bei der Versorgung von COVID-19-infizierten schwerkranken Patienten spielte, die nicht selbstständig atmen konnten. Die Pandemie lenkte die Aufmerksamkeit der Welt auf den weltweiten Mangel an Beatmungsgeräten. Zu den Herausforderungen bei der Bereitstellung einer ausreichenden Anzahl von Beatmungsgeräten gehören: erhöhte Nachfrage nach Beatmungsgeräten, Unterbrechungen der Lieferkette, Fertigungsbeschränkungen, Verteilungsungleichheiten, finanzielle Beschränkungen, Wartungs- und Logistikschwierigkeiten , Schulungs- und Fachkräftemangel sowie das Fehlen von Design und Entwicklung erschwinglicher mechanischer Beatmungsgeräte, die die festgelegten Anforderungen erfüllen. Diese Forschungsarbeit präsentiert die Formulierung eines detaillierten Port-Hamilton-Modells eines in das menschliche Atmungssystem integrierten mechanischen Beatmungsgeräts. Die Verbindungs- und Kopplungsbedingungen für die verschiedenen Subsysteme innerhalb des mechanischen Beatmungsgeräts und die Kopplung zwischen dem mechanischen Beatmungsgerät und dem menschlichen Atmungssystem werden ebenfalls vorgestellt. Neben numerischen Simulationen und Ergebnissen wird eine strukturerhaltende Diskreti

Schlüsselwörter: mechanisches Beatmungsgerät; Port-Hamilton-Funktion; menschliches Atmungssystem; Dirac-Struktur

check for updates

Zitat: Madahana, MCI; Ekoru, JED; Nyandoro, OTC Ein Roman Gemischt endlich/unendlich dimensional Port–Hamilton-Modell eines Mechanisches Beatmungsgerät. Computation 2024, 12, 155. https://doi.org/ 10.3390/computation12080155

Wissenschaftliche Redaktion: Simone Brogi

Empfangen: 3. Mai 2024
Überarbeitet: 23. Juli 2024
Akzeptiert: 25. Juli 2024
Veröffentlicht: 31. Juli 2024

Copyright: © 2024 bei den Autoren. Lizenznehmer MDPI, Basel, Schweiz.
Dieser Artikel ist ein Open Access-Artikel vertrieben unter den Bedingungen und Bedingungen der Creative Commons Namensnennungslizenz (CC BY) (https:// creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

1. Einleitung

Die Weltgesundheitsorganisation (WHO) führt „Zugang zu Sauerstoff“ auf ihrer Modellliste als eines der Grundbedürfnisse eines Menschen, insbesondere wenn er sich in einem kritischen Gesundheitszustand befindet und nicht in der Lage ist, selbstständig zu atmen. Sauerstoff ist das einzige aufgeführte Medikament, für das es keinen Ersatz gibt. Auch nach der weltweiten Pandemie ist der Zugang zu Sauerstoff in Ländern mit mittlerem und niedrigem Einkommen immer noch ein großes Dilemma [1]. Ein Beatmungsgerät ist ein medizinisches Gerät, das eingesetzt wird, um Patienten zu helfen, wenn ihr Atmungssystem nicht richtig funktioniert und der Patient daher Atemprobleme oder Kurzatmigkeit hat . Ein Beatmungsgerät kann auch in Fällen eingesetzt werden, in denen ein Patient sediert wurde und sich einer Operation unterzieht.

Die grundlegende Funktionsweise eines Beatmungsgeräts besteht darin, während der Inspirationsphase einen Hochdruckbereich zu regeln . In der Inspirationsphase wird das Beatmungsgerät a Beim Ausatmen strömt Luft aufgrund des natürlichen Rückstoßes der Lunge aus, wodurch in den Alveolen ein höherer Druck entsteht. Aufgrund der hohen Nachfrage nach mechanischen Beatmungsgeräten sowohl in der Vergangenheit als auch heute ist es zwingend erforderlich, effiziente und erschwingliche mechanische Beatmungsgeräte zu erforschen, zu modellieren, zu entwickeln und zu implementieren. Um sicherzustellen, dass robuste mechanische Beatmungsgeräte entwickelt werden, ist es wichtig, neue Modelle zu entwickeln, die in den **Forschungs- und Testphasen mechanischer Beatmungsgeräte verwendet werden können .**

Machine Translated by Google

1.1. Mathematische Modelle des Atmungssystems

Fundierte mathematische Formulierungen der zugrunde liegenden Physik des Atmungssystems sind für das Verständnis der Anatomie und Physiologie der Organe sehr wichtig. Klassische Modellierungsmethoden, die eine physiologische oder klinische Perspektive verwenden, wurden bisher hauptsächlich zur Datenanpassung für Einzelkompartiment-Modellparameter verwendet: z. B. [2]. Die menschliche Lunge wird mathematisch üblicherweise als ein komplexes, verzweigtes Netzwerk nachgiebiger Röhren betracht Bei der Strömung kann es sich um eine stark pulsierende Strömung oder einen nahezu laminaren, von Diffusion dominierten Prozess handeln. Der Luftstrom gelangt von den Endästen der Atemwege in eine schwammartige Mikrostruktur des Lungengewebes . Das Verhalten des Lungengewebematerials ist sehr nichtlinear und für einen effizienten Gasaustausch ist die Topologie mit kleinen eingebetteten Blutgefäßen optimiert. Aktuelle Forschungsentwicklungen in der mechanischen und mathematischen Modellierung der Lunge konzentrieren sich hauptsächlich auf die Untersuchung isolierter Effekte, die in vivo schwer zu verst Diese Studien zielen darauf ab, die medizinische Bildgebung und Funktionsdiagnostik zu verbessern und bei der patientenspezifischen Behandlungsplanung und -optimierung zu helfen. Bates [3] verwendete einen Systemidentifikationsansatz, um eine mathematische Beschreibung der Lungenmechanik zu liefern, wobei die mathematischen Formulierungen immer komplexer wurden. Dies reichte von einzelnen linearen Kompartimenten bis hin zu verallgemeinerten Modellen mit mehreren Kompartimenten. Maury [4] entwickelte das von Bates [3] vorgeschlagene Konzept weiter und beschrieb die Lunge als einen Widerstandsbaum. Es wurden verschiedene Beschreibungsebenen vorgeschlagen, darunter konzentrierte Modelle mit einer kleinen Anzahl von Parametern , die durch gewöhnliche Differentialgleichungen (ODEs) beschrieben werden, bis hin zu unendlich dimensionalen Modellen, die auf partiellen Differentialgleichungen (PDEs) basieren. Es wurden auch Widerstandsnetzwerke und ihre Verwendung zur Untersuchung der Abhängigkeit des Lungenwiderstands von geometrischen Eigenschaften vorgestellt. Es wurden Analysen der verschiedenen Modelle aus theoretischer Sicht bereitgestellt. Die bereitgestellten Näherungslösungstechniken zeigten eine gute Korrelation mit experimentellen Messungen. Andere Forscher, die ähnliche Arbeiten vorgeschlagen haben, sind Burrowes et al. [5], Tawhai et al. [6] und Berger et al. [7]. Roth et al. [8] haben außerdem Forschungen durchgeführt, bei denen Navier-Stokes-Gleichungen für den Flüssigkeitsfluss aus einer sehr mathematischen Perspektive verwendet wurden. Diese Forschungsarbeit liefert auch umfassende und rechnerisch vollständig aufgelöste Flüssigkeitsdarstellungen menschlicher Atmungsmodelle oder von Teilen davon. Lösungen der dreidimensionalen Navier-Stokes-Gleichungen für starre Geometrien wurden ebenfalls formuliert. Informationen aus der medizinischen Bildgebung neben dem Flüssigkeitsbereich wurden verwendet, um reale Wechselwirkungseffekte zwischen Flüssigkeit und Struktur zu formulieren [8]. Als Ansatz zur Nachbildung realer Flüssigkeits-Struktur-Effekte wurden Techniken entwickelt und veröffentlicht, die dieses Konzept im Flüssigkeitsbereich durch die Anwendung von Daten aus medizinischen Bildgebungsinformationen demonstrieren. Zur Quantifizierung der Partikelablagerung oder Arzneimittelabgabe in den unteren und oberen Atemwegen und zur Untersuchung von Mustern in der Lunge wie Strahlen oder Wirbeln kann ein vollständig aufgelöstes Flüssigkeitsmodell verwendet werden. Solche Modelle sind sehr komplex und in den meisten Fällen werden nur Teile des menschlichen Atmungssystems untersucht, wodurch der wichtige Einfluss des gesamten Organs eliminiert wird. Ein ganzheitliches Modell des menschlichen Atmungssystems erfordert neben den rein mechanischen oder strukturellen Aspekten eine konsistente, physiologisch realistische Darstellung der Atemmechanik, da die grundlegende Physik der Atemmechanik durch die Wechselwirkung der Flüssigkeit mit der Anatomie besti

1.2. Verwandte Werke

Tran et al. [9] führten Forschungsarbeiten mit dem Hauptziel durch, ein mechanisches Beatmungsgerät zu entwerfen, zu steuern, zu modellieren und zu simulieren, das leicht, tragbar und für den Einsatz zu Hause geeignet ist. Tran et al. [9] modellierten ein mechanisches Beatmungsgerät als Spannungsquelle. El-Hadj et al. [10] verwendeten die Fluid-Struktur-Interaktion (FSI), um die für den Fluidfluss verwendete numerische Strömungsmechanik mit der Finite-Elemente-Analyse für den Festkörperbereich zu koppeln. Dies erleichterte die Untersuchung des Fluidverhaltens, des Strukturverhaltens und der Wechselwirkungen. Zwei

Machine Translated by Google

Es wurden Entwürfe für das mechanische Beatmungsgerät vorgeschlagen. Der erste Entwurf war Berichten zufolge unkontrollierbar, und der zweite Entwurf berücksichtigt die numerische Strömungsmechanik (CDF) mit einer beweglichen Begrenzung, die auf ein Beatmungsgerät auf Kolben-Zylinder-Basis angewendet wird. Tharton et al. [11] entwarfen und entwickelten einen Beatmungsprototyp, der von Fachkräften in medizinischen Notfällen und in jedem anderen Kontext verwendet werden soll, in dem das normale Beatmungsgerät nicht verfügbar ist. Ein mechanisches Beatmungsgerät wurde mithilfe eines Kurbelkippmechanismus modelliert, um die spezifischen Anforderungen an das Design mechanischer Beatmungsgeräte zu erfüllen. Pivk et al. [12] entwickelten ein empirisches Modell für ein kostengünstiges mechanisches Beatmungsgerät, indem sie die Reaktion jedes der Beatmungssubsysteme beobachteten. Die aktuellen Fortschritte, die weltweit bei der Entwicklung erschwinglicher und effektiver Designs erzielt wurden, sind wichtig. Der Forschung zur Entwicklung mechanischer Beatmungsgeräte mangelt es jedoch an Modellentwicklung. Der in dieser Forschungsarbeit angewandte Port-Hamilton-Ansatz dient als Modellierungsvorlage für die zukünftige energiebasierte Modellierung und Konstruktion mechanischer Beatmungsgeräte. Die Lagrange-Modellierung und der Ansatz von Kane betonen nicht die Energieführung im System durch eine Dirac-Struktur. Kanes Methode ist auch hinsichtlich der Modellierung der Fluidinteraktion zwischen mechanischem Beatmungsgerät und menschlichem Atmungssystem begrenzt.
Es ist wichtig, Designs zu entwickeln, die auf einem soliden Verständnis eines wesentlichen Aspekts des Designs beruhen. Naggar [13] entwickelte ein stückweises Modell eines mechanischen Beatmungsgeräts, das das k

Ein druckgesteuertes Beatmungsgerät wurde erstellt und simuliert. Das mechanische Beatmungsgerät wurde mithilfe einer periodischen Funktion mit Ungleichungen modelliert, um den Beginn der Ein- und Ausatemphasen zu steuern. Shi et al. [14] entwickelten ein mathematisches Modell der volumengesteuerten mechanischen Beatmung. Das Modell wird als pneumatisches System betrachtet, wobei das Beatmungsgerät als Luftkompressor betrachtet wird. Das Ausatemventil wird als Drossel betrachtet. Der Kompressor und der Behälter stellen das Beatmungsgerät dar. Naggar et al. [15] schlugen ein integriertes mathematisches Modell des mechanischen Beatmungsgeräts und der Lunge vor.
Zur Modellierung des Systems wurden lineare quadratische und exponentielle Gleichungen verwendet. Das integrierte Modell wurde zur Simulation der volumengesteuerten künstlichen Beatmung verwendet. Giri et al. [16] schlugen ein vereinfachtes Design eines mechanischen Beatmungsgeräts vor, um die Kosten zu senken und den mechanischen Beatmungsprozess zu automatisieren. Das vorgeschlagene Design wurde auf der MATLAB-Plattform simuliert. Hannon et al. [17] überprüften den Fortschritt bei der mathematischen Modellierung und Simulation der menschlichen Anatomie, Physiologie und Pathophysiologie mithilfe von Computern im Zusammenhang mit der mechanischen Beatmung. Diese Studie betonte die klinischen Anwendungen von Computersimulationen bei verschiedenen Krankheitszuständen. Die Forschungsarbeit diskutierte außerdem die gegenwärtigen Einschränkungen und die M
von mechanischen Beatmungsgeräten.

1.3. Anwendungen integrierter mechanischer Beatmungsmodelle für das menschliche Lungensystem

Mit integrierten Modellen des mechanischen Beatmungs- und Lungensystems kann das Verhalten des Atmungssystems simuliert und die Auswirkungen der mechanischen Beatmung auf die Lungenfunktion untersucht werden. Diese Modelle finden in Forschung, Ausbildung und klinischer Praxis vielfältige Anwendung. Insgesamt sind integrierte Modelle des mechanischen Beatmungs- und Lungensystems ein wertvolles Instrument zum Verständnis des Verhaltens des Atmungssystems unter mechanischer Beatmung und zur Entwicklung verbesserter Strategien zur Diagnose und Behandlung von Atemwegserkrankungen. Die folgenden Unterabschnitte bieten Anwendungsbeispiele für integrierte Modelle des mechanischen Beatmungs- und Lungensystems. In Mehedi et al. [18] wurde das Atmungssystem als Kombination aus Gebläse-Schlauch-Patientensystem mit nichtlinearer Lungen-Compliance modelliert. Derzeit gibt es nur sehr wenige Studien, in denen Simulationen während der Ausatmung durchgeführt wurden, da während der Ausatmung die Verfügbarkeit von Speichermöglichkeiten für das inhalierte Volumen erforderlich ist.

1.4. Motivation des Port-Hamilton-Ansatzes

Sowohl das mechanische Beatmungsgerät als auch das menschliche Atmungssystem sind multiphysikalischer Natur (sie enthalten Komponenten aus verschiedenen Bereichen der Physik). Daher ist ein geeigneterer Ansatz zum Verständnis der Funktionsweise dieser Systeme, d

Machine Translated by Google

usw. und darüber hinaus die Effizienz der mechanischen Beatmung zu verbessern, besteht in der Verwendung von Modellen, die diese Systeme besser darstellen. Ein repräsentativerer Modellierungsansatz wäre daher, die multiphysikalische Natur dieser Systeme zu berücksichtigen Der Port-Hamilton-Ansatz zur Modellierung integrierter Systeme bietet mehrere Vorteile, darunter [19,20]: 1. Der Port-Hamilton-

Ansatz ist modular und basiert auf der Topologie des mechanischen Beatmungsgeräts und des menschlichen Atmungssystems. Daher können verschiedene Arten mechanischer Beatmungsgeräte und menschlicher Atmungssysteme mit unterschiedlicher Struktur/Topologie unter verschiedenen Betriebsbedingungen numerisch simuliert/getestet werden, um die Leistung usw. zu analysieren [19,20].

2. Der modulare Charakter der Port-Hamilton-Methode und ihre Grundlage in der Graphentheorie ermöglichen die Entwicklung von Software zur automatischen Modellierung unterschiedlicher Topologien mechanischer Beatmungsgeräte bzw. menschlicher Atmungssysteme [19,20].
3. Eigenschaften wie die Passivität des integrierten mechanischen Beatmungsgeräts – menschliche Atmung Das ratory-System kann gezeigt und untersucht werden [19,20].

Derzeit gibt es keine energiebasierten Modelle von MV-Patientensystemen, die in Systemen verwendet werden können, bei denen Energie aus den Ports abgeführt wird. Komplexe dynamische Systeme können im Port-Hamilton-Framework modelliert und gesteuert werden, da das Framework ein leistungsstarkes Tool für die Analyse, Modellierung und Steuerung solcher Systeme bietet. Die wichtigsten Merkmale des Port-Hamilton-Frameworks (pH) sind: Erstens basiert es auf der Multi-Domain-Bond-Graph-Modellierungsmethode, die verschiedene physikalische Elemente über Ports verbindet. Die Verbindung in der Port-Hamilton-Methode ist so, dass Energie gespart wird. Zweitens wird den Energievariablen sowie der gesamten gespeicherten Energie eine Bedeutung zugewiesen, die auch als Hamilton-Operator bezeichnet wird und die Grundlage für die Modellierung multiphysikalischer Systeme bildet. Der Port-Hamilton-Ansatz bietet die Grundlage für das Verständnis der Energieübertragung in den verschiedenen physikalischen Domänen, die das Atmungssystem steuern. Stichprobendaten können erhalten werden, wenn die Port-Hamilton- Struktur ausgenutzt und bei der Diskretisierung beibehalten wird. Diese Forschungsarbeit wendet den Port- Hamilton-Systemansatz an, um das MV-menschliche Atmungssystem zu modellieren. Das resultierende Modell zeigt explizit die Energiespeicherung, Energieableitung und die dem System zugrunde liegenden Zusammenhänge. Das erhaltene Port-Hamilton-Modell hat zahlreiche Anwendungen: Es kann beispielsweise beim Entwurf verschiedener medizinischer Geräte und zur Diagnose von Atemwegserkrankungen eingesetzt werden.

Der Hauptbeitrag dieser Forschungsarbeit ist die Entwicklung einer integrierten Port-Hamilton-Modelldarstellung eines mechanischen Beatmungsgeräts und eines menschlichen Atmungssystems . Das Modell besteht aus elektromechanischen und elektromagnetischen Komponenten, die in einer endlichdimensionalen Darstellung modelliert und mit Fluidkomponenten in einer unendlichdimensionalen Darstellung verbunden sind. Infolgedessen ist dieses Port-Hamilton-Modell gemischt endlich-/unendlichdimensionaler Natur. Der Rest dieses Dokuments ist wie folgt strukturiert: Die Materialien und Methoden werden in Abschnitt 2 umrissen, die Abschnitte 3 und 4 präsentieren das detaillierte Port-Hamilton-Modell eines mechanischen Beatmungsgeräts und des Magnetventil- Subsystems. Die Abschnitte 5 und 6 geben die Modellnetzwerktopologie und die Modellverbindung mit Kopplungsbedingungen an. Die Abschnitte 7 und 8 zeigen die strukturerhaltende Diskretisierung, Ergebnisse und Diskussion. Abschließend werden die Schlussfolgerungen und Empfehlungen in Abschnitt 9 präsentiert.

2. Materialien und Methode

In diesem Abschnitt werden die mathematischen Grundlagen des Port-Hamilton-Ansatzes vorgestellt, denen in späteren Abschnitten gefolgt wird. Diese Definitionen sind Standarddefinitionen aus der Literatur und stammen größtenteils aus den folgenden Referenzen: [21–23].

Machine Translated by Google

Definition 1. (Dirac-Struktur):
Eine Dirac-Struktur (DS) ist ein Elementpaar f ÿ R^N **und e** ÿ R^N**, das die Menge erfüllt:**

$$D \ddot{y} \ddot{y} \{(f, e) \ddot{y} D, (f, \hat{e}) \ddot{y} D \ddot{y} e^T \hat{f} \ddot{y} \ddot{y} \hat{e}^T F\}.$$

Der DS ist eine Teilmenge D ÿ F × **E, wobei** F **und** E **die Flüsse bzw. Anstrengungen darstellen.**

Der DS in Stromkreisen kann wie folgt dargestellt werden:

Satz 1. Der Unterraum

$$D \ddot{y} R^N \times R^N,$$

heißt DS genau dann, wenn es A, B ÿ R gibt $^{n\times n}$ **so dass**

$$AB^T + AB \ddot{y} 0 \text{ und } Rang(\ddot{y}AB\ddot{y}) \ddot{y} n,$$

die Bedingung erfüllen

$$D \ddot{y} \{(f, e) \ddot{y} R^N \times R^N \ddot{y} A f \ddot{y} \ddot{y} Be\}.$$

Definition 2. (Widerstandsbeziehung).
Jede Relation R ÿ $R^N \times R^N$ **heißt resistiv, wenn ÿ(fR,eR)** ÿ **R,**

$$e_R^T f_R \ddot{y} 0,$$

ist zufrieden.

Definition 3. (Port-Hamilton-System (pH-System):
Die Menge (D, **L, R) definiert ein pH-System,**

wobei: • D ÿ (FL × **FR** × **FP)** × (EL × **ER** × **EP) ein DS ist;**
• L ÿ **FL** × **EL ein LS ist;** • R ÿ
FR × **ER eine resistive Relation ist.**

Die Elemente der Mengen:

• **FL** ÿ R **nL und EL** ÿ R **nL werden als Flüsse und Anstrengungen bezeichnet;** • **FR** ÿ R **nR und ER** ÿ R **nR werden als resistive Flüsse und Anstrengungen bezeichnet;** • **FP** ÿ R **nP und EP** ÿ R **nP werden als externe Flüsse und Anstrengungen bezeichnet, wobei nL, nR und nP** ÿ **N0.**

Die Dynamik des pH-Systems wird durch die differentielle Inklusion gegeben:

$$\left(-\frac{D}{dt} x(t), f_R(t), f_P(t), e_L(t), e_R(t), e_P(t)\right) \ddot{y} D,$$

wobei (x(t),eL(t)) ÿ **L, (fR(t),eR(t))** ÿ **R und (fP(t),eP(t))** ÿ **P.**

Definition 4. (Verbindung von n pH-Systemen): Es sei
(Di , **Li , Ri) der Raum des i-ten pH-Systems in einer Menge von n pH-Systemen, die miteinander verbunden werden sollen. Der Raum der Ströme wird in einen externen Teil und einen zu verbindenden Teil aufgeteilt und ist gegeben durch**

Fi ÿ **FLi** × **FRi** × **FPi** × **FPlink.**

Analog dazu wird der Raum der Anstrengungen in einen externen und einen zu verknüpfenden Teil gegliedert und wie folgt ausgedrückt:

Ei ÿ **FLi** × **ERi** × **EPi** × **EPlink.**

Machine Translated by Google

Die Verbindung zweier pH-Systeme (D1, L1, R1) und (D2, L2, R2) über die Verbindung (FPlink, EPlink) ergibt ein neues pH-Verbundsystem: (D, **L, R). Dieses Verbundsystem ergibt sich aus dem Ausdruck:**

(D1, L1, R1) • (D2, L2, R2) ÿÿ (D, **L, R).**

Definition 5. (Gerichteter Graph): Ein gerichteter Graph ist ein Quadrupel G ÿÿ **(V, E, I, r), wobei 1. V eine Menge von Knoten ist; 2. E eine Menge von Kanten ist; 3. I** ÿ **E** ÿ **V jede Kante e einem Anfangsknoten zuordnet; 4. r** ÿ **E** ÿ **V jede Kante e einem Endknoten zuordnet.**

Definition 6. (Schleifenfreier gerichteter Graph): Wenn G ein gerichteter Graph ist, dann heißt G schleifenfrei, wenn für alle e ÿ **E gilt:**

e) ÿ **r(e).**

Definition 7. (Teilgraphen). Gegeben seien die Graphen G ÿÿ **(V, E, I, r) und** ÿ ÿÿ **(V** ÿ**, E** ÿ**, I, r), dann** Ǵ **heißt ein Teilgraph von** G ÿ Wenn ÿ G ÿ **E und** Vÿ ÿ **V. Weiterhin gilt E 1. Ein Teilgraph heißt induzierter Teilgraph auf** Vÿ , **falls** Eÿ ÿ **Eÿ 2. Ein Teilgraph** ÿ **V ; heißt aufspannend, falls** Vÿ ÿ **V; 3. Ein Teilgraph heißt echter Teilgraph, falls** Eÿ ÿ **E; Wenn sowohl V als auch E endlich 4. sind, dann** heißt G **endlich.**

Definition 8. (Pfade, Konnektivität und Zyklen): Sei G ÿ **(V, E, I,r) ein gerichteter endlicher Graph.**

1. Ein n-Tupel e ÿ **(e1, . . . ,en)** ÿ **(E** ÿ **ÿE) n heißt Pfad von** *ÿ* **nach** *ÿ* , **falls I(e1), . . . , I(en)**

- **(a) verschieden sind; r(ei)** ÿ **I(ei+1)**
- **(b) für alle i** ÿ **{1, . . . , n** ÿ **1}; I(e1)** ÿ *ÿ* ÿ **r(en)** ÿ **ÿ.**
- **(c)**

2. Ein Pfad von *ÿ* **nach** *ÿ* **wird als Zyklus bezeichnet.**

3. Zwei Eckpunkte, *ÿ* **und** *ÿ,* **heißen verbunden, wenn ein Pfad von** *ÿ* **nach ÿ existiert.**

4. Die Existenz von Pfaden von Knoten aus ergibt eine Äquivalenzrelation auf der Menge der Knoten.

5. Ein Teilgraph ist eine Komponente des Graphen.

6. Ein Graph mit nur einer Komponente heißt verbunden.

Definition 9. (Inzidenzmatrix): Sei G ÿ **(V, E, I,r) ein gerichteter Graph, der endlich und schleifenfrei ist, so dass E** ÿ **e1, . . . ,em und V** ÿ **ÿ1, . . . , ÿn. Dann ist** die **j-te Zeile und k-te Spalte der Inzidenzmatrix A0** ÿ R n×m **von** G **gegeben durch**

$$\ddot{y}\ a_{jk} \ddot{y} \begin{cases} 1 & I(e_k) \ddot{y} \ddot{y}_j, \\ \ddot{y}1 & r(e_k) \ddot{y} \ddot{y}_j, \\ 0 & \text{Andernfalls.} \end{cases}$$

Wenn Rang(A0) ÿ **n** ÿ **k, dann hat** der Graph G **k** ÿ N **Komponenten, so dass k** Zeilen aus **A0 entfernt werden können , was zu einer Matrix mit demselben Rang führt.**

Machine Translated by Google

Definition 10. (Kirchhoff-Dirac-Struktur, Kirchhoff-Lagrange-Untermannigfaltigkeit):
Die Kirchhoff-Dirac-Struktur von G **kann also definiert werden durch die Menge**

$$D_K^S(G) = \{(j, i, \dot{y}, u) \in R^M \times R^n \times S \mid \begin{bmatrix} -A_0 & 0 \\ 0 & A_0^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j \\ \dot{y} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & A_0 \\ -A_0^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} i \\ u \end{bmatrix} = 0\} \quad (1)$$

wobei i und u die Ströme bzw. Spannungen an den Rändern des Graphen sind, während q und $\dot{y}$ **die Ladungen bzw. Potenziale an den Eckpunkten des Graphen sind.**

Unter der Annahme, dass S $\subseteq$ **{v1, . . . ,** v_S**},** ist **die Kirchhoff-Lagrange-Untermannigfaltigkeit von** G **bezüglich S definiert als**

$$M_K^S(G) = \{0\} \times R^n \times S \times R^n \times S \quad , \quad (2)$$

wobei G $=$ **(V, E, I, r) ein gerichteter Graph ist, der endlich**

ist; 1. 2.

Ist

schleifenfrei; 3. Hat eine Inzidenzmatrix A0 $\in$ R **n×m.**

Wenn G1, ... , Gk **die Komponenten von** G **mit den entsprechenden Eckpunkten V1, ... , Vk** $\subseteq$ **V** sind , **so dass** eine Teilmenge S $\subseteq$ **V existiert , in der** S **höchstens einen Eckpunkt von jeder** die den V_i **, enthält, dann** kann **A** $\in$ R $^{(n-k)\times m}$ **S, I** $\in$ **k** $\subseteq$ **v, v** durch Löschen, d.h. **ys,s ,** der Zeilen, Eckpunkten S **aus A0** $\in$ R n×m **entsprechen, konstruiert werden .** **Komponente**

Bemerkung 1. Nach Satz 1 **zeigen die Gleichungen (1) und (2) ,** dass **DS** $_K$(G) **ist ein DS und** M_K^S(G) **ein LS im Raum** R $^n \times R^n \times S \times R^n \times S$ ist.

Definition 10 befasst sich mit der Einführung eines pH-Systems $(DS(G), L_K^S(G), \{0\})$ mit (DS- **Dynamik:**

$$\dot{q}(t), i(t), \dot{y}(t), u(t)) \in D_K^S(G), \quad (3)$$

wobei $(q(t), \dot{y}(t)) \in L_K^S(G)$.

Unter Verwendung der Äquivalenz von $(q(t), \dot{y}(t)) \in L_K^S(G)$ **zu q(t)** $= 0$ **und** $\dot{y}(t) \in R^n \times S$ **, wir sehen das Gleichung (3) gilt genau dann, wenn diese Bedingung erfüllt ist:**

$$q(t) = 0 = Ai(t) = 0 = A^T \dot{y}2(t) = \dot{y}u(t).$$

$$\dot{y}_{ajl} = \begin{cases} 1 & \text{el} \in Cj \text{ mit übereinstimmenden Orientierungen,} \\ -1 & \text{el} \in Cj \text{ mit nicht übereinstimmenden Orientierungen,} \\ 0 & \text{Andernfalls 0.} \end{cases}$$

Auf dieser Grundlage kann man einen DS definieren

$$D_K^{\dot{y}}(G) = \{(j, i, \dot{y}, u) \in R^M \times R^n \times S \mid \begin{bmatrix} -A_0 & 0 \\ 0 & A_0^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} j \\ \dot{y} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & A_0 \\ -A_0^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} i \\ u \end{bmatrix} = 0\}$$

mit Dynamik

$$\frac{D}{dt}\dot{y}(t), i(t), \dot{y}(t), u(t)) \in D_K^{\dot{y}}(G),$$

und ein LS

$$M_K^{\dot{y}}(G) = \{0\} \times R^{n-m+k} \quad ,$$

Machine Translated by Google

mit Dynamik

$$(\dot{y}(t), \ddot{y}(t)) \in \mathcal{L}_K^{\gamma}(G).$$

Zusammen bilden sie ein pH-System, das durch den Satz $(\mathcal{L}_K^{\gamma}(G), \mathcal{L}_K^{\gamma}(G), \{0\})$.

Dirac-Struktur

Ein wesentliches Merkmal einer Dirac-Struktur ist die Tatsache, dass die Standardzusammensetzung zweier Dirac-Strukturen wiederum eine Dirac-Struktur ist. Die Implikation dieser Aussage ist, dass jede energiesparende Verbindung eines Port-Hamilton-Systems auch selbst ein Port-Hamilton-System ist. Dies stellt das grundlegende Merkmal des Port-Hamilton-Ansatzes zur Modellierung, Simulation und Steuerung komplexer physikalischer Systeme dar. Die komplizierte Dirac- Struktur ist der Leitfaden für die algebraischen Beschränkungen des verbundenen Systems sowie seiner Casimir-Funktionen [23]. Die Casimir-Funktionen sind für die Sollwertregelung von Port-Hamilton-Systemen von Bedeutung. Der Rahmen des Port-Hamilton-Ansatzes ermöglicht eine portbasierte Modellierung. Portbasierte Modellierung bedeutet, dass wir viele verschiedene Elemente über Ports miteinander verbinden. Dirac-Strukturen sind die Werkzeuge, die zum Verbinden mehrerer Elemente verwendet werden. Diese verschiedenen Elemente sind energiespeichernde Elemente, energieableitende Elemente und externe Elemente, die Energie liefern können. Ein Diagramm zur Veran

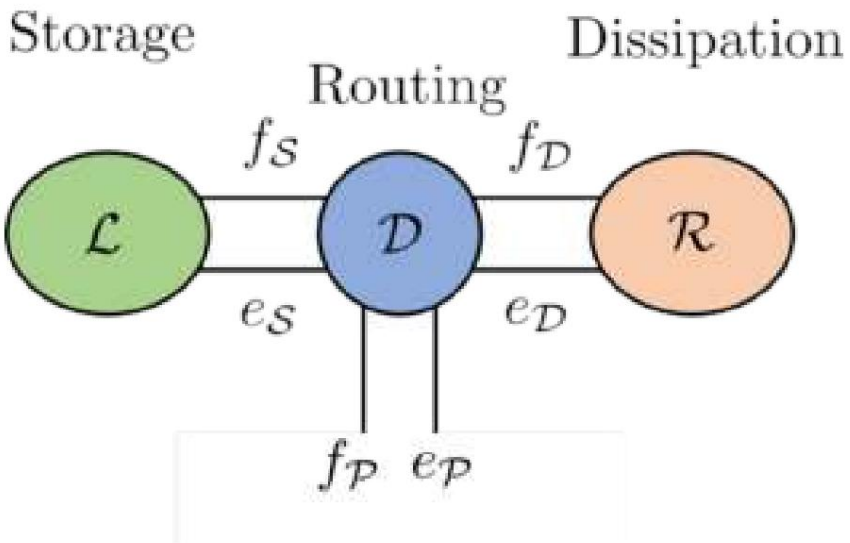


Abbildung 1. Energiespeicherung, -leitung und -ableitung.

3. Detailliertes Port-Hamilton-Modell eines mechanischen Beatmungsgeräts

3.1. Beschreibung des Systems

Das Gesamtdiagramm des mechanischen Beatmungssystems ist in Abbildung 2 dargestellt. Das gesamte System besteht aus verschiedenen Subsystemen. In dieser Forschungsarbeit wird das Hauptsubsystem erörtert, das zum Luftstrom und damit zum Luftdruck beiträgt. Daher werden die folgenden Hauptsubsysteme erörtert: das Gleichstrommotorsubsystem, das Turbinenpumpen-/Gebläsesubsystem, das Pumpenwellen-/Laufradsubsystem und das Magnetventilsubsystem .

Machine Translated by Google

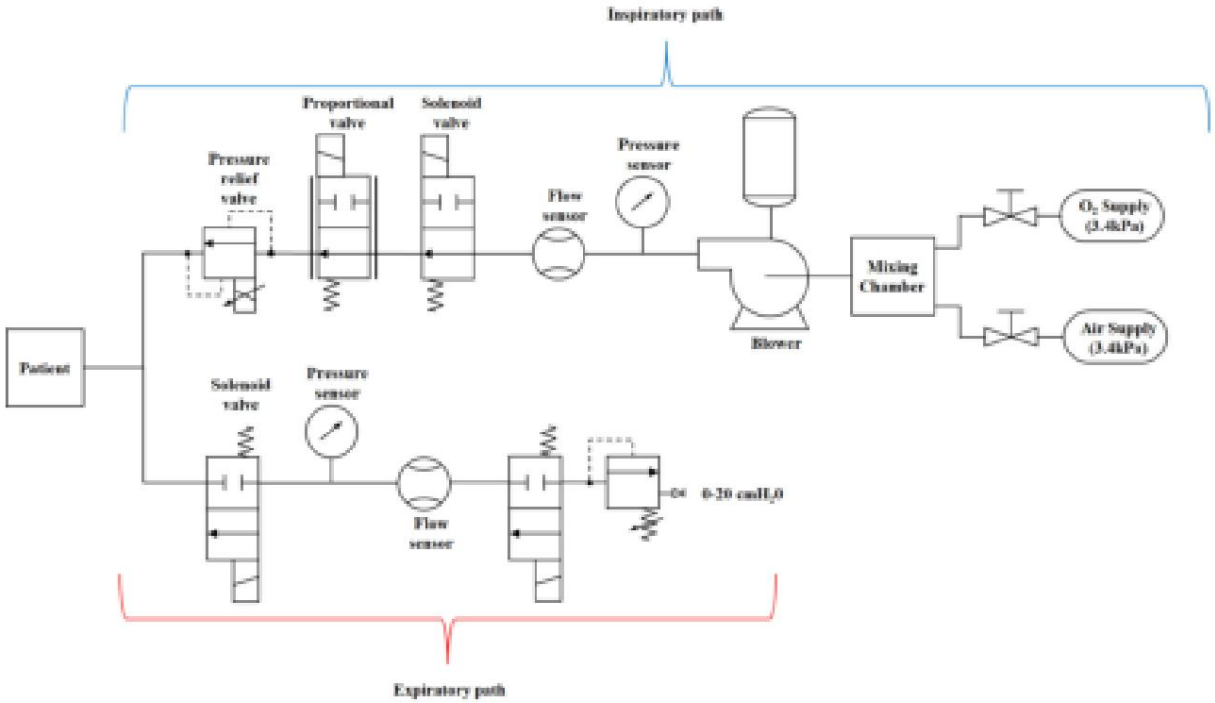


Abbildung 2. Schematische Darstellung eines mechanischen Beatmungsgeräts

3.2. Gebläsemodell

In diesem Abschnitt werden die dynamischen Systemmodellgleichungen für das Gebläsemodell im Port-Hamilton-Rahmen vorgestellt. Das Gebläsemodell besteht aus drei Teilsystemen: einem Gleichstrommotor, der die Gebläsewelle/das Laufrad antreibt, einer Gebläsewelle/einem Laufrad, das den Gleichstrommotor mit der Flüssigkeit verbindet, indem es die Drehbewegung des Motors nutzt, um die Flüssigkeit zu beschleunigen, und schließlich der Flüssigkeit, die angetrieben wird.

Aus der Port-Hamilton-Perspektive ist der Zustandsvektor Xb ÿ R ^{4} ist gegeben durch:

$$Xb \ddot{y}\ddot{y} [pm, \ddot{y}m, Pb , Qb]^{\ddot{y}}, \quad (4)$$

wobei pm ÿ R ^{1} und ÿm ÿ R ^{1} sind der Drehimpuls und der magnetische Fluss des Motor und Pb ÿ R Gebläse ist. ^{1} Gleichstroms ^{1} und Qb ÿ R sind der Druck und die Durchflussra

Die Gesamtenergie des Gebläses ergibt sich aus dem Hamiltonoperator:

$$Hb \ddot{y}Xb \ddot{y} \ddot{y} \quad \frac{1}{2}\left(\frac{\frac{2}{M}}{S_{h\,bin}} + \frac{\ddot{y}\frac{2}{M}}{Lm} + CbP_B^2 + IbQ_B^2\right), \quad (5)$$

wobei Im ÿ R $^{1}_{+}$ ist die Trägheit und Lm ÿ R $^{1}_{+}$ ist die Induktivität des Gleichstrommotors, während Cb ÿ R ^{1} und Ib ÿ R $^{1}_{+}$ sind die hydraulische Kapazität bzw. die Trägheit der Luft im Gebläse.

Somit ist das Port-Hamilton-Modell eines Gebläses gegeben durch

$$\dot{x}_b \ddot{y}_b \quad \ddot{y} (Jb \ddot{y} Rb)\ddot{y}Hb \ddot{y}Xb \ddot{y} + Gbub , b \quad (6)$$

$$Yb \ddot{y} G^{\ddot{y}} \ddot{y}Hb \ddot{y}Xb \ddot{y}, \quad (7)$$

Machine Translated by Google

Wo

$$\mathbf{Jb} \ddot{y}\ddot{y} \begin{matrix} \ddot{y}\ddot{y} & \mathbf{0} & \mathbf{Km} & \mathbf{0} \\ & \ddot{y}\mathbf{Km} & & \mathbf{0} \\ & \mathbf{0} & \mathbf{0\ 0} & \mathbf{0} \end{matrix} \begin{matrix} \ddot{y}(\mathbf{Ko\ pm})/\mathbf{Im} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{1/(Cb\ lb)\ 0} \end{matrix} \begin{matrix} \ddot{y} \\ \ddot{y}\ddot{y}\ddot{y}^{4\times4}\ddot{y}\,R\,\ddot{y}\ddot{y} \\ \ddot{y}\ddot{y}\ddot{y} \end{matrix},$$

$$\ddot{y}\ddot{y}\ddot{y}\ddot{y}\ddot{y}\ddot{y}\mathbf{(Ko\ pm)/Im\ 0\ \ddot{y}1/(Cb\ lb)}$$

$$\mathbf{Rb} \ddot{y}\ddot{y} \mathbf{diag([bm\ Rm\ 0\ (Rb\ pm)/(lb\ lm)])} \ddot{y}\ R^{4\times4},$$

$$\ddot{y}\mathbf{Hb}\ \ddot{y}\mathbf{Xb}\ \ddot{y}\ \ddot{y}\ddot{y}\ \mathbf{[pm/Im\ \ddot{y}m/Lm\ CbPb\ lbQb\ ]}\ \ddot{y}\ R^{4\times1},$$

$$\mathbf{Gb} \ddot{y}\ddot{y} \begin{matrix} \ddot{y}_{1\ddot{y}} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \ddot{y}_{0\ddot{y}} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ & \mathbf{0\ \ddot{y}(1/Cb)\ 0} & \mathbf{0} \end{matrix} \begin{matrix} \ddot{y} \\ \ddot{y}\ddot{y}\ddot{y}^{4\times3}\ddot{y}\,R\,\ddot{y}\ddot{y} \\ \ddot{y}\ddot{y}\ddot{y} \end{matrix},$$

$$\mathbf{ub} \ddot{y}\ddot{y} \begin{matrix} \ddot{y}\ddot{y}\ddot{y} \\ \mathbf{[\ Vm\ Qin\ Pin\ ]}\ \ddot{y}\ R^{3\times1}, \end{matrix} \begin{matrix} \\ \mathbf{(1/Pfund)} \end{matrix}$$

wobei Km ÿ R $^{1}_{+}$ **ist die Motordrehmomentkonstante, bm** ÿ R $^{1}_{+}$ **ist die viskose Dämpfung, Rm** ÿ R $^{1}_{+}$ **Ist der Ankerwiderstand und Ko** ÿ R $^{1}_{+}$ **ist die Drehimpuls/Druck-Kopplungskonstante des Motors . Die Eingangsgrößen des Systems sind die Gleichstrommotorspannung, der Eingangsvolumenstrom und der Druck, die durch V** ÿ R **und Pin** ÿ R gegeben sind . **Man kann leicht zeigen, dass Jm** ÿ **ÿJ** ÿ **0.** $^{1}_{\ddot{y}}$**Qin** ÿ R, $^{1}_{\ddot{y}}$**, bzw. Ein** $^{\ddot{y}}_{M}$ **und Rm** ÿ R$^{1}_{\ddot{y}}$ $_{M}$

Die zeitliche Ableitung des Hamiltonoperators ergibt

$$\mathbf{H\ddot{y}\ b}\ \ddot{y}\ddot{y}b\ \mathbf{\ddot{y}}\ \ddot{y}\ \mathbf{ub}\ \ddot{y}\ \mathbf{Yb}\ \ddot{y}\ \mathbf{\ddot{y}Hb\ \ddot{y}Xb}\ \ddot{y}\ddot{y}\ (\mathrm{Rb}\ddot{y}\mathrm{Hb}\ \mathbf{\ddot{y}Xb\ \ddot{y}).} \quad \mathbf{(8)}$$

Dieses System verfügt über Strom- und Widerstandsanschlüsse.

4. Magnetventil-Subsystem

Abbildung 3 zeigt ein Magnetventil in der offenen und geschlossenen Stellung. Es wird angenommen, dass die Luftspalte ausreichend klein sind, sodass der Effekt der Streuung des magnetischen Flusses vernachlässigbar ist. Betrachten Sie einen Magneten, bei dem die Permeabilität des Kerns und die Länge des Teils des Magnetkreises innerhalb des Kerns mit µc ÿ R **+ bez** $^{1}_{+}$ **und** $^{1}_{+}$ R

Die äquivalente Länge des Magnetkreises der Spule leqÿÿÿ ÿ R **ÿ** R **ist abhängig von der Verschiebung der Spule qs** ÿ R **und kann wie folgt geschrieben werden:**

$$\mathbf{\mu c\ leq\ddot{y}qs\ddot{y}} \ddot{y}\ \mathbf{lc} + \mathbf{(qstot} \ddot{y}\ \mathbf{qs),\ \mu0} \quad \mathbf{(9)}$$

wobei µ0 ÿ R **die** $^{1}_{+}$ **Luftdurchlässigkeit und qstot** ÿ R **der gesamte** $^{1}_{+}$ **Luftspalt ist. Das Koordinatensystem der Spule ist in Abbildung 4 dargestellt. Die Induktivität der Spule variiert also mit der Verschiebung der Spule und kann daher durch die Funktion Lsÿÿÿ** ÿ R **ÿ** R ausgedrückt werden , **die gegeben ist durch:**

$$\mathbf{Ls\ddot{y}qs\ddot{y}} \frac{\mathbf{N2Ae\mu c}}{\ddot{y}\ \mathbf{leq\ddot{y}qs\ddot{y}}}, \quad \mathbf{(10)}$$

1 wobei N ÿ R $_{+}$ **ist die Anzahl der Windungen in der Spule der Spule und Ae** ÿ R $^{1}_{+}$ **ist das effektiver Querschnitt des Pfades des magnetischen Flusses. Die magnetischen und mechanischen Teilsysteme im Magnetventil sind daher aufgrund der Abhängigkeit der Induktivität von der Verschiebung der Spule magnetisch gekoppelt.**

Machine Translated by Google

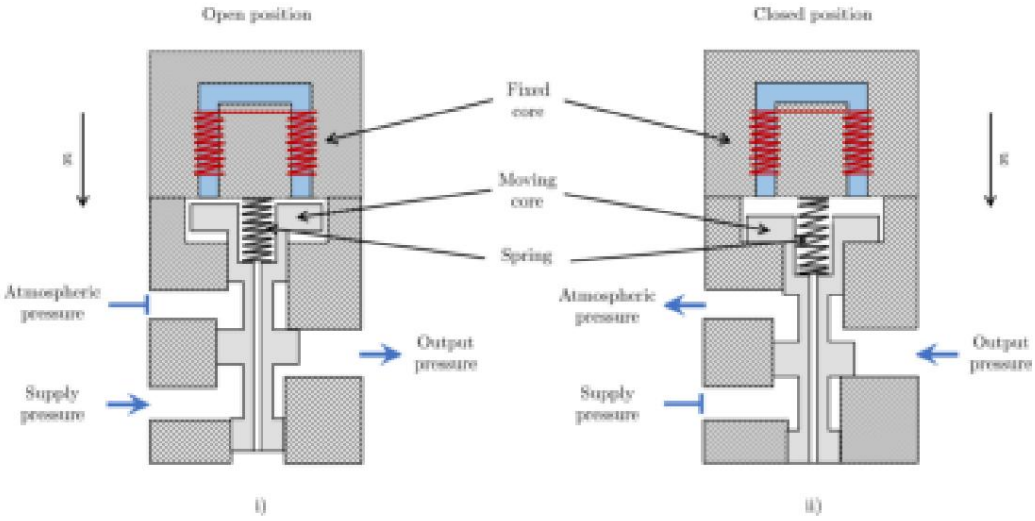


Abbildung 3. Diagramm eines Magnetventils in (i) der offenen Position, die den Flüssigkeitsfluss zulässt, und (ii) der geschlossenen Position, die den Flüssigkeitsfluss stoppt.

Die Gesamtenergie der Spule ist gegeben durch den Hamiltonoperator Hsÿÿÿ ÿ R3ÿ R, das ist eine Funktion des Zustandsvektors Xs ÿ *[ÿs* , ps , qs] ÿ 3 ÿ R und ausgedrückt wird als die Summe der magnetische, kinetische und potentielle Energien, die durch Hmagneticÿÿs , qsÿ ÿ R 2 ÿ R, Hkineticÿpsÿ ÿ R ÿ R bzw. Hpotentialÿqsÿ ÿ R ÿ R bezeichnet werden. Somit gilt

$$\text{HsÿXsÿ ÿ Hmagneticÿÿs , qsÿ + Hkineticÿpsÿ + Hpotentialÿqsÿ,} \quad (11)$$

gegeben ist ein magnetischer Fluss ÿs ÿ R.

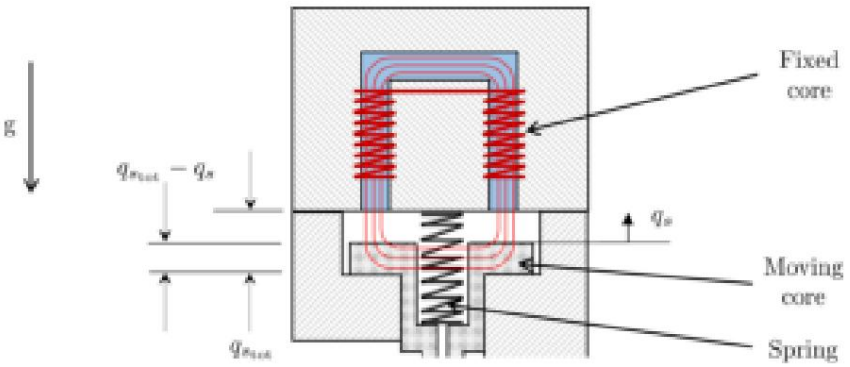


Abbildung 4. Solenoid-Koordinatensystem.

Unter der Annahme, dass die Vorspannung der Feder auf q0 ÿ R eingestellt ist, lautet der Hamiltonoperator

$$\text{HsÿXsÿ ÿ } \frac{1}{2\,(\text{ÿ}} \frac{\text{ÿ}^{2}_{s}}{\text{ÿqsÿ}} + \frac{P_s^2}{MS} + \text{ks(qs + qs0)}^{2}\text{) + msqsg,} \quad (12)$$

wobei ps ÿ R der Impuls der Spule, ms ÿ R die 1 + ist die Masse der Spule, ks ÿ R ist 1 + ist das Federsteifigkeit und g ÿ R ist 1 + die Erdbeschleunigung.

Daher werden der Zustand und die Ausgangsdynamik der Spule in Port-Hamilton-Funktionen ausgedrückt. Form in den Gleichungen (13) bzw. (14) :

$$\text{Xs ÿ (Js ÿ Rs)ÿHsÿXsÿ + Gsus ,} \quad (13)$$

$$\text{Ys ÿ G}^{\text{ÿ}}_{\text{s}}\text{ uns ,} \quad (14)$$

Machine Translated by Google

Wo

$$J_s = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad R_s = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & b_s \end{bmatrix}, \quad G_s = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & (A_{s1} + A_{s2}) & (A_{s3} + A_{s4}) \end{bmatrix},$$

$$G_s^* = G_s^T \left[\frac{1}{V_{ps}} \right] \text{ und } H_{sX_s} = \frac{A_{eN}^2 \mu_c (q_{stot} - q_s)}{2 A_{eN}^2 \mu_c \mu_0 l_c (q_{stot} - q_s) + \mu_0 (k_s (q_s + q_{s0})^2 + m_s g)},$$

wobei $R_s = R_{Spule} + R_1$ ist der Widerstand der Spule, $b_s = R_{Rv} + R_2$ ist die viskose Dämpfung, die auf die A_{s1}, $A_{s2} \in \mathbb{R}^1_+$ verschiedenen Querschnittsflächen wirkt und ∇ der Gradientenoperator ist. A_{s1}, $A_{s2} \in \mathbb{R}^1_+$ der Oberflächen der Spule und der $V_s \in \mathbb{R}^2$ besteht aus der Eingangsspannung Eingangsvektor $u_s \in \mathbb{R}^1$ und dem Versorgungsdruck $p_s \in \mathbb{R}^1$. Man sieht, dass $J_s = -J_s^T \in \mathbb{R}^{3\times3}$ besitzt Skew Symmetrie, während $R_s = R_s^T \in \mathbb{R}^{3\times3}$ semidefinit ist.

Die zeitliche Ableitung des Hamiltonoperators ergibt:

$$\dot{H} = \dot{x}^T \nabla_x H_s(x) + u_s^T \dot{Y}_s = \nabla_x H_s(x)^T (J_s - R_s) \nabla_x H_s(x). \quad (15)$$

Dieses System verfügt über Strom- und Widerstandsanschlüsse.

4.1. Rohrmodell

In diesem Abschnitt wird ein Port-Hamilton-Modell eines einzelnen Rohrsegments entwickelt. Grundlage dieser Entwicklungen sind die Navier-Stokes-Gleichungen für eindimensionale instationäre Gasströmungen in Rohrleitungen. Zur Vereinfachung des Modells werden folgende Annahmen getroffen [24,25]:

1. Die Rohrleitung wird als starr betrachtet (der Querschnitt dehnt sich infolge der Strömung nicht aus).
2. Reibungs- und Gravitationseffekte werden vernachlässigt (dies wird in zukünftigen Arbeiten in diesem Forschungsbereich gelockert).
3. Die Modellparameter des Gases bleiben entlang des Rohrquerschnitts konstant, verändern sich aber mit der Zeit entlang der Rohrlänge. Sie können also über den Querschnitt gemittelt werden, und der Gasstrom ist somit eindimensional.
4. Es wird angenommen, dass die Temperatur der Rohrwände konstant und gleich der Umgebungstemperatur ist. Daher werden Temperatureffekte ignoriert.

Unter Berücksichtigung dieser Annahmen ist das Koordinatensystem, das einem Rohrsegment zugeordnet ist, in Abbildung 5 dargestellt. Für ein gegebenes Zeitintervall $t_s \in t < t_f$ mit Startzeit t_s und Endzeit t_f gelten also die längennormalisierten eindimensionalen Euler-Gleichungen für Gas mit einer Dichte $\rho(t, z) \in (t_s, t_f \times (0, \rho) \in \mathbb{R}^1$ fließt mit einer Geschwindigkeit $v(t, z) \in (t_s, t_f \times (0, \rho) \in \mathbb{R}^1$ durch ein Rohr der Länge $\rho \in \mathbb{R}^1_+$ und Querschnittsfläche $A_p \in \mathbb{R}^1_+$ sind gegeben durch:

$$\partial_t(\rho A_p) + \partial_z(\rho A_p v) = 0, \quad (16)$$

$$\partial_t(\rho A_p v) + \partial_z(\rho A_p v^2 + p A_p) = 0, \quad (17)$$

wobei $p(t, z) \in (t_s, t_f \times (0, \rho) \in \mathbb{R}^1$ der Druck ist und $\partial_i \in \partial_t, \partial_z$ die partielle Ableitung nach den zeitlichen und räumlichen Variablen ist, die durch die Indizes $i \in \{t, z\}$ gegeben sind.

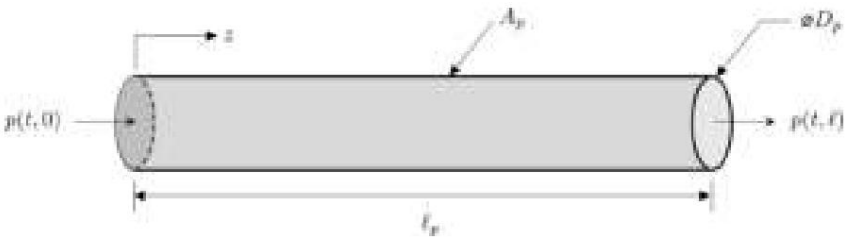


Abbildung 5. Koordinatensystem des Rohrsegments.

Machine Translated by Google

Port-Hamilton-Formulierung des Rohrströmungsmodells

Die Fluiddynamik kann als Masse pro Längeneinheit ausgedrückt werden, d. h. *ÿ* **ÿÿ ÿAp, als sowie der Fluidimpuls, m** ÿÿ *ÿÿ.* **Somit können** die Gleichungen **(16) und (17)** wie folgt ausgedrückt werden:

$$\text{ÿtÿ ÿ ÿÿzm, m2} \tag{18}$$

$$\text{ÿtm ÿ ÿÿz(} \quad \frac{\overline{\quad}}{ÿ} + \text{pAp)}, \tag{19}$$

Definieren wir den Zustandsvektor des Gasstroms durch ein Rohrsegment als ÿp ÿÿ[ÿ ÿ, die Energie von Das Gas kann in Form eines Hamiltonoperators *Hp[ÿp]* ÿ R ausgedrückt werden **gegeben durch**

$$Hp[ÿp] \text{ ÿ } \int_{0}^{ÿ} Hp[ÿp]\,dx \text{ ÿ } \int_{0}^{ÿ} \left(\frac{m2}{2ÿ} + ÿU[ÿ/Ap] \right) dx, \tag{20}$$

wobei Hpÿÿÿ ÿ R die Hamiltondichte ist und Uÿÿÿ ÿ R die innere Energie des Gases ist, die im Fall einer isentropischen Flüssigkeit als Funktion der Dichte ausgedrückt werden kann.

Die Port-Hamilton-Dynamik nimmt die folgende Form an:

$$ÿtÿp \text{ ÿ } J\,[ÿp]ÿÿpHp[ÿp], \tag{21}$$

wobei J [ÿp], der formal schiefsymmetrische Operator, und ÿÿpH[ÿp], die Variationsableitung der Hamilton-Dichte, wie folgt ausgedrückt werden:

$$J\,[ÿp] \text{ ÿ } ÿ[\,0\ ÿ2ÿ\ ÿ\ ÿ2ÿ\ 0\,]ÿ \text{ und } ÿÿpHp[ÿp] \text{ ÿ } \begin{bmatrix} ÿ \\ h\,ÿ\,ÿ \\ ÿ\,2ÿ\,ÿ\,ÿ\,ÿ \\ \overline{ÿ} \end{bmatrix}, \tag{22}$$

wobei h die Enthalpie ist und J [ÿp] ein formal schiefsymmetrischer Operator ist.

Die Änderungsrate des Hamiltonoperators ergibt sich als

$$H_{\text{oben}}^{\text{ÿ nach}} \text{pyp}, \tag{23}$$

Wo

$$\text{nach oben ÿ WBRext[ÿÿpHpÿÿ] und yp ÿ WCRext[} \begin{matrix} ÿÿpHpÿ0 \\ ÿÿpHpÿÿ \end{matrix} \text{]}, \tag{24}$$

mit Komponenten gegeben durch

$$\text{WB ÿ } \frac{1}{\overline{\overline{ÿ\ 2\ [\ 1\ 0\ 0\ ÿ1\ 0\ 1\ 0\ ÿ1\ 0\ 1\ 0\ ÿ1\ 0\ 1

Machine Translated by Google

Erweitern nach oben und yp gibt

$$\text{nach oben}\ \dot{y}\begin{bmatrix} \dot{y} \\ (\overline{M}\dot{y})\dot{y}\dot{y} \\ (h\dot{y}\ \frac{M^2}{2\dot{y}^2})\dot{y}_0\dot{y} \end{bmatrix} \quad \text{und yp}\ \dot{y}\begin{bmatrix} \dot{y} \\ (h\dot{y}\ \frac{M^2}{2\dot{y}^2})\dot{y}\dot{y} \\ \dot{y}(m\overline{\dot{y}})\dot{y}_0 \end{bmatrix}. \tag{25}$$

Somit ist die Änderungsrate des Hamiltonoperators

$$H_P\ \dot{y}(h\dot{y}\ \frac{m2}{2\dot{y}^2})\dot{y}\ \dot{y}(M\dot{y})\dot{y}\ \dot{y}\dot{y}(m\dot{y})\dot{y}_0(h\dot{y}\ \frac{m2}{2\dot{y}^2})\dot{y}_0. \tag{26}$$

4.2. Elektrisches Schaltkreismodell der Lunge

Die Port-Hamilton-Formulierung für nichtlineare elektrische Schaltkreise wird in diesem Abschnitt. Da der Schwerpunkt dieses Artikels auf einem mechanischen Beatmungsmodell liegt, ist das Lungenmodell wird vereinfacht, indem man eine Analogie zu einem elektrischen Schaltkreis betrachtet. Das betrachtete Modell ist das eines vollständig sedierten Patienten, der zum Atmen vollständig auf das Beatmungsgerät angewiesen ist. Das Schaltungsmodell ist in Abbildung 6 dargestellt. Die Schaltung kann in Form eines Netzwerkgraph mit Hilfe der Graphentheorie. Der Graph der Schaltung in Abbildung 6 ist in

Abbildung 7. Das Modell hat n ÿ ÿVÿ ÿ 7 Eckpunkte.

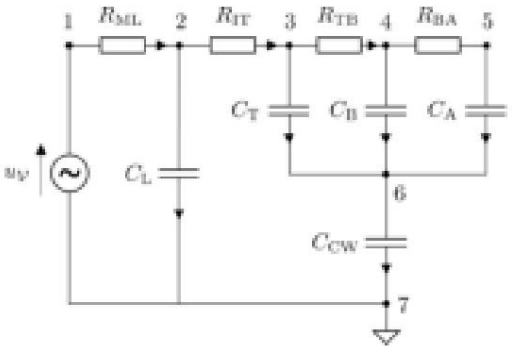


Abbildung 6. Schaltplan eines elektrischen Modells der Lunge eines vollständig sedierten Patienten [26].

Der vollständige Graph des Schaltkreises A0 lautet

$$A0\ \dot{y}\ \begin{array}{c} \\ \dot{y} \\ \\ \\ \\ \\ \\ \dot{y} \end{array}\begin{array}{c} \text{RML RIT RTB RBA CT CB CA CL CCW uV} \\ \left[\begin{array}{ccccc|c|c|c} 1 & 0 & 0\ \dot{y}1\ 1 & 0 & & 0\,0\,0\,0\,0\,0\,0\,1 & 0 & \dot{y} \\ \dot{y}1 & 1 & {}_{0\,\dot{y}} & 0 & & & 0 & 0\ \ 2 \\ 0 & \dot{y}1 & 1 & 0 & & 1\,0\,0\,0\,0\,1\,0\,0 & 0 & 0\,3 \\ 0 & 0 & \dot{y}1 & 1 & & & 0 & 0\,4 \\ 0 & 0 & 0 & \dot{y}1\,0\,0\,1\,0\,\dot{y}1\,\dot{y}1\,\dot{y}1\,0 & & & 0 & 0\ \ 5 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & & & 1 & 0\ \ 6 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & & 0\,0\,0\,\dot{y}1\,\dot{y}1 & & 1\ \dot{y}\ 7 \end{array}\right] \end{array} \cdot \tag{27}$$

Die Eingangsspannung des Beatmungsgeräts wird als Quelle S ÿ (DS,LS, RS) dargestellt.
Quellen ist S ÿ {v7}, und die Dimension der Quelle ist ÿSÿ ÿ 1. Der Schaltkreis besteht außerdem aus
mC ÿ 5 Kondensatoren (Speicherelemente), die als Ci ÿ (DCi ,LCi , RCi) dargestellt werden, wobei die
Der i-te Index zur Unterscheidung zwischen den Komponenten ist i ÿ {CL, CT, CB, CA, CCW}.
Weiterhin gibt es mR ÿ 4 Widerstände (dissipative Elemente), die dargestellt werden als
Ri ÿ (DRi , LRi , RRi), wobei der i-te Index durch i ÿ {RML, RIT, RTB, RBA} gegeben ist.

Machine Translated by Google

Wenn wir Knoten 7 als Boden auswählen, ist die reduzierte Inzidenzmatrix A gegeben durch

$$A = [A_R \; A_C \; A_S] = \left[\begin{array}{ccccccccc|c|c} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & & \\ -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ & & & & & & & & & & & & & & & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & -1 & 1 & 0 & 1 & 0 & & & & & & & & \end{array}\right] \quad (28)$$

A_R (Klimaanlage) A_S

wobei die Dimensionen der Komponenten von A dim (AR) = (n = #Sy) × mR = 6 × 4, dim(AC) = (n = #Sy) × mC = 6 × 5 und dim(AS) = (n = #Sy) × mS = 6 × 1 sind.

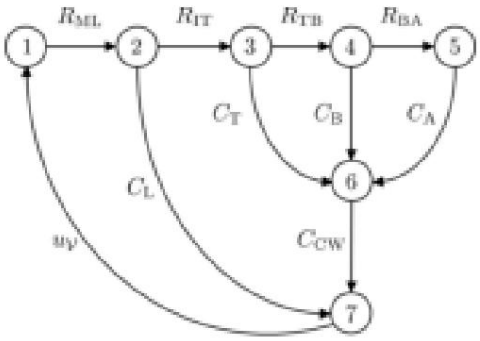


Abbildung 7. Der zum Schaltplan in Abbildung 6 gehörende Graph.

Die Gesamtenergie des Kreises ergibt sich aus dem Hamiltonoperator

$$H_C = H_{Ci}(q_{Ci}) = \frac{1}{2} \sum_{i} \frac{q_{Ci}^2}{C_i}, \quad (29)$$

wobei $q_{Ci} = 1$ ist die Ladung des i-ten Kondensators für i = {CL, CT, CB, CA, CCW}. Somit gilt

$$\begin{bmatrix} I_{AC} & A_R & A_S \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & -A_R^T & 0 \\ 0 & -A_C^T & -A_S^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{d}{dt} q_C \\ i_R \\ i_S \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ I_{AC}^T & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v \\ u_C \\ u_R \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (30)$$

wobei I und O Identitäts- bzw. Nullmatrizen geeigneter Größe sind, q = 0 und $\dot{v}$ das Knotenpotential ist. Die Erweiterung von Gleichung (30) ergibt

$$\frac{d}{dt} q_C + A_R(A_R^T v) + A_S i_S = 0, \quad (31)$$

$$-A_C^T v + u_C = 0, \quad (32)$$

$$-A_S^T v + u_S = 0. \quad (33)$$

Die Dirac-Struktur wird durch die Menge mit den folgenden Attributen für (D, L, R) gegeben:

$$(-\frac{d}{dt} q, \frac{d}{dt} q_C, i_R, i_S, v, u_C, u_R, u_S) = D, (q, q_C, v, u_C) = L, (i_R, \quad (34)$$

$$e_R) = R. \quad (35)$$

$$(36)$$

Machine Translated by Google

5. Modell Netzwerktopologie

Definition 11. (Gerichteter Graph) [27]: Ein gerichteter Graph G bezeichnet das Paar (V,A), wobei V(D) und A(D) jeweils die Menge der Knoten und Bögen bezeichnen. Ein Bogen ist ein eindeutig geordnetes Paar vo

Der gerichtete Graph eines Beatmungsmodells besteht aus der disjunkten Vereinigung der mit dem Patienten sowie den Einatem- und Ausatemschenkeln des Beatmungsgeräts verbundenen Knoten, die durch vO, VI bzw. VE gegeben sind . **In ähnlicher Weise sind die Patienten-, Einatem- und Ausatembögen durch aO, AI bzw. AE** gegeben . **Jeder Bogen und Knoten kann weiter in diejenigen unterteilt werden, die mit den im Beatmungsgerät vorhandenen Gebläsen, Ventilen, Rohren und Stromkreisen verbunden sind. Somit ist die Gesamtheit der Knoten und Bögen gegeben durch**

V(D) ÿ {vO} ÿ VI ÿ VE ÿ {vO} ÿ (VIb ÿ VIv ÿ VIp ÿ VIe) ÿ (VEb ÿ VEv ÿ VEp ÿ VEe)

Und

A(D) ÿ {aO} ÿ AI ÿ AE ÿ {aO} ÿ (AIb ÿ AIv ÿ AIp ÿ AIe) ÿ (AEb ÿ AEv ÿ AEp ÿ AEe),

wobei die Indizes i ÿ {O, p, b, v, p, e} verwendet werden, um jeweils den Patienten, Gebläse, Ventile, Rohre und elektrische Schaltungskomponenten anzuzeigen.

Abbildung 8 **zeigt** ein vereinfachtes Diagramm des in Abbildung 2 **dargestellten mechanischen Beatmungsgeräts . Dieses vereinfachte Diagramm zeigt die zum Patienten gehörenden Elemente sowie die zum mechanischen Beatmungsgerät gehörenden Inspirationsbögen und -scheitelpunkte. Die zum Patienten gehörenden Bögen** werden mit **AO21 ÿ AO bezeichnet , während die Scheitelpunkte mit {VO1 ,VO2 } ÿ VO bezeichnet werden. Die Elemente der Inspirations- und Exspirationsbögen und -scheitelpunkte werden durch VI ,VE bzw. AIO,AOE** angegeben . **Eine detailliertere Darstellung des Diagramms des mechanischen Beatmungsgeräts in Abbildung 8 finden Sie in Abbildung 9.**

Abbildung 9 zeigt eine detaillierte Grafik des in Abbildung 2 dargestellten mechanischen Beatmungsgeräts , **die den Patientenscheitelpunkt VO und die Bögen und Scheitelpunkte entlang des Inspirationspfads angibt, gegeben dur**

KI ÿÿ {AIV12 ,AIV23 ,AIV3B ,AIV23 ,AIBV4 ,AIV4S1 ,AIBV5 ,AIV5S2 }

Und

VI ÿÿ {VIV1 , VIV2 , VIV3 , VIB , VIV4 , VIS1 , VIV5 , VIS2 },

sowie die Bögen und Scheitelpunkte entlang des Exspirationspfades, gegeben durch

AE ÿÿ {AOEV1 ,AEV12 ,AEV23} und VE ÿÿ {VEV1 ,VEV2 ,VEV3 },

jeweils.

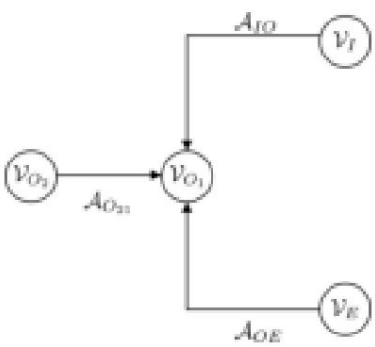


Abbildung 8. Vereinfachte Grafik des in Abbildung 2 **dargestellten Beatmungsgeräts,** die die **zum Patienten gehörenden Elemente zeigt ,** die durch die Bögen **AO21 ÿ AO und die Eckpunkte {VO1 , VO2 } ÿ VO gegeben sind, sowie die Elemente der inspiratorischen und exspiratorischen Bögen und Eckpunkte, die durch VI , VE bzw. AIO, AOE** gege

Machine Translated by Google

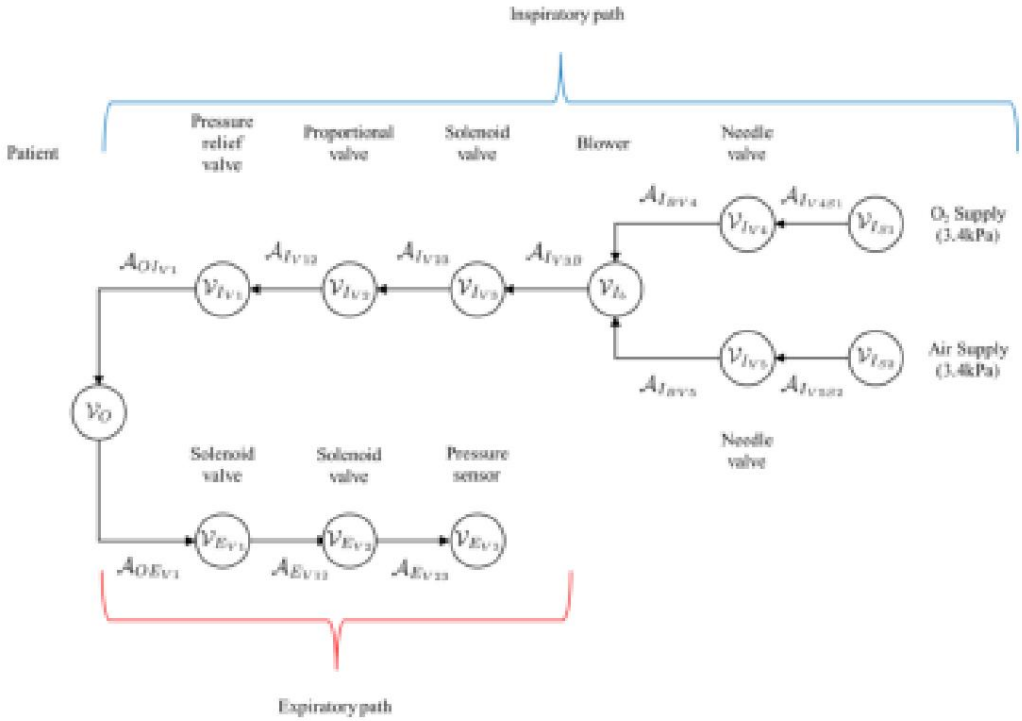


Abbildung 9. Detaillierte Grafik des mechanischen Beatmungsgeräts aus Abbildung 8 , die den Patientenscheitelpunkt VO sowie die Bögen und Scheitelpunkte entlang der Inspirations- und Exspirationspfade anzeigt.

6. Modellverbindung/Kopplungsbedingungen In

diesem Abschnitt werden die Kopplungsbedingungen des Port-Hamilton-Netzwerkmodells des mechanischen Beatmungsgeräts angegeben. Die in diesem Modell vorkommenden

Verbindungsarten sind unten aufgeführt: 1. Verbindung zwischen Pumpe und Rohr: Der Druck und die Durchflussrate der Flüssigkeit, die die Pumpe verlässt, Pb bzw. Qb , sind gleich dem Druck und der Durchflussrate am Einlass des Rohrs, gegeben durch p(0) bzw.

Pb ÿ **p0 und Qb** ÿ **m(0).**

2. Verbindung zwischen Rohr und Ventil: Der Druck und die Durchflussrate der Flüssigkeit, die in ein Ventil eintritt bzw. aus diesem austritt, Pv bzw. Qv , sind gleich dem Druck und der Durchflussrate am Einlass bzw. Auslass des Rohrs, gegeben durch p(0) und m(0) für den Einlass und p(ÿ) und m(ÿ) für den Auslass. Somit gilt:

Pv ÿ **p(0) und Qv** ÿ **m(0)** **am Einlass,**

Und

Pv ÿ p(ÿ) **und Qv** ÿ m(ÿ) **an der Steckdose.**

3. Verbindung von Rohr zu Kreislauf: Der Druck und die Durchflussrate am Auslass eines Rohrs können als Eingangswerte für ein Kreislaufmodell dienen.

p(ÿ) ÿ **vcin** **und** m(ÿ) ÿ **icin .**

Andererseits können die Ausgangsspannung und der Ausgangsstrom eines Schaltkreises mit einer Flüssigkeitsleitung am Einlass der Leitung verbunden werden. In diesem Fall können die Ausgangsspannung und/oder de

Machine Translated by Google

des Kreislaufs sollte dem Eingangsdruck bzw. der Eingangsdurchflussrate entsprechen.
Diese Beziehung kann mathematisch wie folgt ausgedrückt werden:

vcout ÿ **p(0) und icout** ÿ **m(0)** **am Einlass.**

Der Hamiltonoperator des Gesamtsystems ergibt sich aus der Summe der Hamiltonoperatoren der Einzelsysteme:

$$H \ddot{y} Hb + Hs + Hp + HC. \quad (37)$$

Die Änderungsrate der Energie des Gesamtsystems ist

$$\begin{aligned} H\ddot{y} \ddot{y} P\ddot{y}\, b(\ddot{y}z\ p(0) + Fp) + Q\ddot{y}\ b(\ddot{y}zm(0) + Mp)\ (\ddot{y}z \\ + P\ddot{y}_{Wein}\ p(0) + Fvin\ ) + Q\ddot{y}_{Wein}\ (\ddot{y}zm(0) + Mvin\ ) \\ + P\ddot{y}vout\ (\ddot{y}z\ p(\ddot{y}) + Fvout) + Q\ddot{y}vout\ (\ddot{y}zm(\ddot{y}) + Mvout) \\ + P\ddot{y}vout\ (\ddot{y}z\ p(\ddot{y}) + Fvout) + Q\ddot{y}vout\ (\ddot{y}zm(\ddot{y}) + Mvout) \\ + H\ddot{y}_b + H\ddot{y}_s + H\ddot{y}_c. \end{aligned} \quad (38)$$

Die Terme Fp, Mp, Fvin , Mvin , Fvout und Mvout sind die externen Drücke und Durchflussraten, die auf das System einwirken. Sie sollten Null ergeben, um die Verbindung he

7. Strukturerhaltende Diskretisierung

Das Port-Hamilton-Modell des Rohrs ist eine partielle Differentialgleichung, die im Raum kontinuierlich ist. Daher ist es schwierig, die Dynamik eines Rohrabschnitts zu simulieren. Dazu ist es notwendig, das Modell mit einem diskreten Modell anzunähern: in diesem Fall mit einem Finite-Differenzen-Modell, das eine Annäherung an das ursprüngliche System darstellt. Im Kontext von Port-Hamilton-Systemen besteht eine zusätzliche Anforderung darin, sicherzustellen, dass die diskrete Annäherung die strukturellen Eigenschaften des ursprünglichen Systems beibehält: z. B. Schiefsymmetrie usw.

Jeder Systemzustand kann durch eine diskrete Näherung ersetzt werden, die aus einer Gesamtheit besteht auf n Elementen, wie in Abbildung 10 zu sehen ist . **Somit gilt** *ÿ* ÿ **ÿd** ÿ **[ÿ1, ÿ2, ÿ, ÿn]** ÿ R **und m** ÿ **md** ÿ **[m1,** $^{n\times 1}$ **, m2, ÿ, mn]** ÿ R. **Eine diskrete Näherung ÿd** ÿ **[ÿ1,** $^{n\times 1}$. Der Zustandsvektor **ÿp kann also** ersetzt werden durch **ÿ, ÿn, m1, ÿ, mn]** ÿ R **ÿi , mi** ÿ R **befindet sich bei z** ÿ **{ÿ(i** ÿ 1),ÿ(i ÿ **1/2)}, wobei** ÿ **die** $^{2n\times 1}$. **Das i-te Element von feste diskrete** $^{1\times 1}$ **Schrittweite zwischen den Punkten ist und i** ÿ **1,** 2,ÿ, **n. Darüber hinaus sind die Kräfte an den Rändern durch ÿÿ0H0 und ÿÿnHn gegeben. Somit kann der Hamiltonoperator in Gleichung (20)** durch **eine diskrete Näherung angenähert werden,** so dass *Hpÿÿpÿ* ÿ **ÿHd** *ÿÿd* **ÿ, so dass die diskrete Systemkraft nun** *ÿÿd* **(Hd) ist. Eine finite Differenzennäherung der räumlichen Ableitungen am i-ten Punkt ist**

$$\frac{\ddot{y}}{\ddot{y}z}\ \ddot{y}(t, z)\ddot{y}_{\ddot{y}} \approx \frac{1}{\ddot{y}}(\ddot{y}(t, zi+0,5) \ddot{y} \ddot{y}(t, zi\ddot{y}0,5)) \text{ und } \ddot{y} \quad \frac{\ddot{y}}{\ddot{y}z}\ m(t, z)\ddot{y}_{\ddot{y}} \approx \frac{1}{\ddot{y}}(m(t, zi+1) \ddot{y} m(t, zi)). \quad (39) \ddot{y}$$

Die Zentraldifferenzapproximation am i-ten Punkt lautet

$$\ddot{y}t[\ \ddot{y}ni\ ] \ddot{y} \ddot{y} \frac{1}{\ddot{y}}([\ \ddot{y}m\ddot{y}\ddot{y}\ddot{y}\ddot{y}i+1\ \ddot{y}\ ] \ddot{y} [\ \ddot{y}m\ddot{y}\ddot{y}\ddot{y}\ddot{y}

Machine Translated by Google

Und

$$\dot{y}_{tmd}\,\dot{y}\,\dot{y}\,\dot{y

Machine Translated by Google

Tabelle 2. Parameterwerte des Solenoidmodells [28].

Parameter	Beschreibung	Wert	Einheiten
AE	Effektiver Querschnitt	8 × 10ÿ5 m	2
As1	Spulenoberfläche	2,657 × 10ÿ3 m	2
As2	Spulenoberfläche	3,525 × 10ÿ3 m	2
As3	Spulenoberfläche	5,586 × 10ÿ3 m	2
As4	Spulenoberfläche	5,586 × 10ÿ3 m	2
bs	Viskoser Dämpfungsfaktor	2 × 10ÿ1 Nsÿm	ÿ1
g	Erdbeschleunigung	9,81	mÿs ÿ2
ks	Federsteifigkeit	1 × 10ÿ4 Nÿm	ÿ1
lc	Länge des Teils des Magnetkreises innerhalb des Kerns	1,15 × 10ÿ2 m	
MS	Masse der Spule	2,7 × 10ÿ1	kg
N	Anzahl der Windungen in der Spule	1250	dreht sich
qstot	Gesamtluftspalt	3,3 × 10ÿ4 m	
qs0	Vorspannung in der Feder	1,1 × 10ÿ3 m	
RS	Widerstand der Spule	13	ÿ
µ0	Luftdurchlässigkeit	4ÿ × 10ÿ7 NÿA	ÿ2
µc	Permeabilität des Magnetkerns	4,8ÿ × 10ÿ5 NÿA	ÿ2

Tabelle 3. Parameterwerte des Lungenkreislaufmodells [26].

Parameter	Beschreibung	Wert	Einheiten
RML	Widerstand vom Mund bis zum Kehlkopf	1.021	cmH2OÿsÿL ÿ1
RLT	Widerstand vom Kehlkopf zur Luftröhre	3,369 × 10ÿ1	cmH2OÿsÿL ÿ1
RTB	Widerstand von der Luftröhre bis zu den Bronchien	3,063 × 10ÿ1	cmH2OÿsÿL ÿ1
RBA	Widerstand von den Bronchien bis zu den Alveolen	8,17 × 10ÿ2	cmH2OÿsÿL ÿ1
CL	Compliance des Kehlkopfes	1,27 × 10ÿ3	l/cmH2O
CT	Compliance der Trachea	2,38 × 10ÿ3	l/cmH2O
CB	Compliance der Bronchien	1,31 × 10ÿ2	l/cmH2O
CA	Compliance der Alveolen	2 × 10ÿ1	L/cmH2O
CCW	Compliance der Brustwand	2,445 × 10ÿ1	l/cmH2O

8.1. Modellvalidierung

Das Modell wurde mit Parametern aus der Literatur validiert. Die im Abschnitt „Ergebnisse und Diskussion“ angegebenen Simulationsergebnisse erwiesen sich als vergleic denen in der vorhandenen Literatur.

8.2. Simulationsumgebung

Die Simulationen wurden mit MATLAB Version: 9.13.0.2193358 (R2022b) Update durchgeführt 5 auf einer Intel Core i5 CPU mit vier Kernen und 8 GB RAM. Die Abbildungen 11 und 12 zeigen Ventilationskurven für eine Lunge unter zwei Bedingungen: eine teilweise geschädigte Lunge mit einer Compliance und Resistance von 20 mL/cmH2O bzw. 20 cmH2O-s/L und eine Lungen mit vollständiger Schädigung, die durch eine Lungencompliance und einen Lungenwiderstand von 10 mL/cmH2O bzw. 50 cmH2O-s/L. Die Beatmungskurven bleiben gleich sinusförmiges Verhalten. Für die Fallstudie der geschädigten Lunge wurden minimale Ventilationswerte von Durchfluss über die Zeit und das Luftvolumen erreicht werden. In der geschädigten Lunge sind die Compliance und Der Widerstand der Lunge erhöht den Druck.

Machine Translated by Google

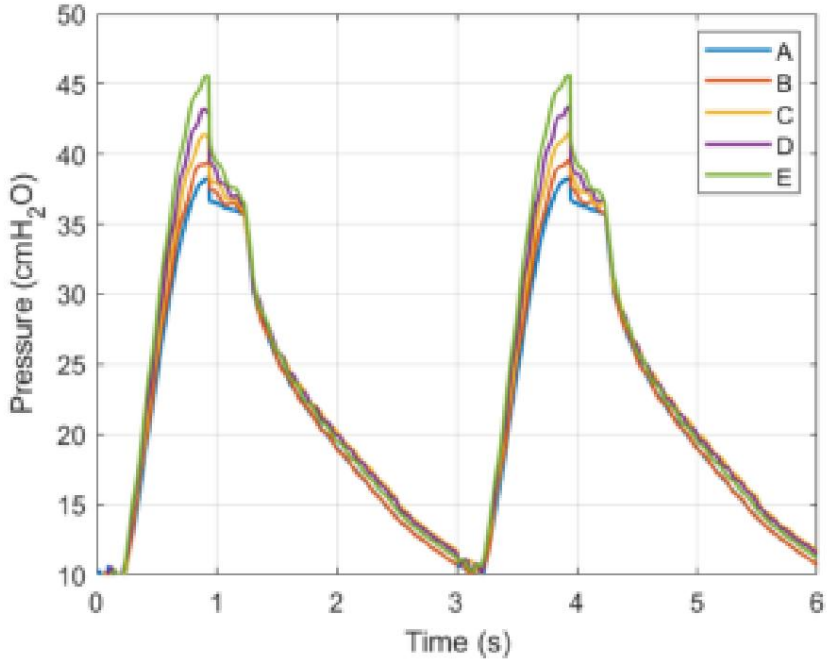


Abbildung 11. Diagramm des Luftdrucks im Zeitverlauf.

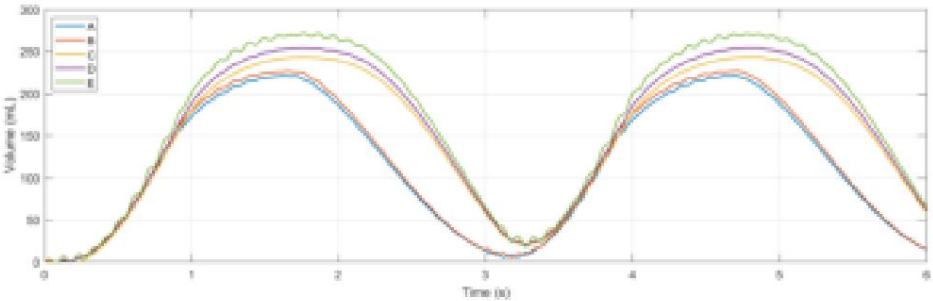


Abbildung 12. Diagramm des Volumenstroms im Vergleich zur Zeit.

9. Schlussfolgerungen und Empfehlungen

In dieser Forschungsarbeit formulieren wir ein detailliertes mechanisches Beatmungsgerät im Port–Hamiltonscher Rahmen. Darauf folgt ein Port-Hamiltonsches Modell der Atemwege System, und danach werden diese beiden Systeme integriert. Die durchgeführte Arbeit zeigt dass der Port-Hamilton-Ansatz eine valide Methode zur Modellierung eines integrierten mechanisches Beatmungsgerät–menschliches Atmungssystem. Das Port-Hamilton-Modell ist modularer Natur. Darüber hinaus basiert die gesamte Modellstruktur auf dem zugrunde liegenden Diagramm des mechanischen Beatmungsgeräts und des menschlichen Atmungssystems. Zukünftige Forsc Anweisungen umfassen:

- Entwicklung eines Software-Frameworks zur automatischen Generierung des Port-Hamilton-Operators Dynamik für verschiedene Konfigurationen mechanischer Beatmungsgeräte und menschlicher Atmungssysteme sowie die zugehörigen integrierten Modelle [19];
- Entwicklung verschiedener Modelle reduzierter Ordnung;
- Entwicklung eines integrierten Rahmens für die Modellierung mechanischer Beatmungsgeräte / menschlicher Atmungssysteme, um eine Steuerung und Systemoptimierung zu ermöglichen [19,20]
- Ausnutzung der modularen und graphentheoretischen Natur des Port-Hamilton-Operators Ansatz zur Einbeziehung von maschinellem Lernen und künstlicher Intelligenz [19];
- Untersuchung der am besten geeigneten strukturerhaltenden Diskretisierungen und Modellordnungsreduktionen für verschiedene datengesteuerte Anwendungen und Steuerungssyste

Machine Translated by Google

Beiträge der Autoren: Konzeptualisierung, MCIM; Methodik, MCIM; Software, MCIM; Validierung , MCIM und JEDE; formale Analyse, MCIM; Untersuchung, MCIM; Ressourcen, MCIM; Datenkuratierung, MCIM; Schreiben – Vorbereitung des Originalentwurfs, MCIM; Schreiben – Überprüfung und Bearbeitung, MCIM; Visualisierung, MCIM; Überwachung, OTCN; Projektverwaltung, MCIM; Mittelbeschaffung , MCIM. Alle Autoren haben die veröffentlichte Version des Manuskripts gelesen und stimmen ihr zu.

Finanzierung: Ich möchte der School of Mining, Faculty of Engineering, und der Built Environment , University of the Witwatersrand für die finanzielle Unterstützung zur Veröffentlichung dieser Arbeit danken.

Erklärung des Ethikausschusses: Auf eine ethische Überprüfung und Genehmigung dieser Studie wurde verzichtet, da an der Studie weder Menschen noch Tiere beteiligt waren.

Datenverfügbarkeitserklärung: Die in der Studie vorgestellten Originalbeiträge sind im Artikel enthalten, weitere Anfragen können an den entsprechenden Autor gerichtet werden.

Interessenkonflikte: Die Autoren erklären, dass keine Interessenkonflikte bestehen.

Verweise

1. Rubio, J.; Rojas, C.; Sanchez, M.; Gómez-Alzate, D.; Córdova, M.; Montoya, V.; Castaneda, B.; Chang, J.; Pérez-Buitrago, S. COVOX: Sauerstoffversorgung während des COVID-19-Gesundheitsnotstands. HardwareX 2023, 13, e00383. [CrossRef]
2. Hickling, KG Die Druck-Volumen-Kurve wird durch Rekrutierung stark verändert. Am. J. Respir. Crit. Care Med. 1998, 158, 194–202. [Querverweis]
3. Bates, JHT Lungenmechanik: Ein inverser Modellierungsansatz; Cambridge University Press: Cambridge, Großbritannien, 2009.
4. Maury, B. Das Atmungssystem in Gleichungen, 1. Auflage; MS&A – Modellierung, Simulation und Anwendungen; Springer: Mailand, Italien, 2013. [Querverweis]
5. Burrowes, KS; Hunter, PJ; Tawhai, MH Anatomisch basierte Finite-Element-Modelle der menschlichen Lungenarterien- und Venenbäume einschließlich überzähliger Gefäße. J. Appl. Physiol. 2005, 99, 731–738. [CrossRef]
6. Tawhai, MH; Bates, JHT Multi-scale lung modeling. J. Appl. Physiol. 2011, 110, 1466–1472. [CrossRef] 7. Berger, L.; Bordas, R.; Burrowes, K.; Brightling, C.; Hartley, R.; Kay, D. Die Wechselwirkung zwischen Lungenparenchymdeformation und Ventilation bei obstruktiver Lungenerkrankung verstehen. In B30. Dynamik der Atemwegsverengung bei Asthma: Immer noch missversta American Thoracic Society: New York, NY, USA, 2014; Band 189, S. A2677.
8. Roth, CJ; Yoshihara, L.; Ismail, M.; Wall, WA Computergestützte Modellierung des Atmungssystems: Diskussion gekoppelter Modellierungsansätze und zweier neuer Erweiterungen. Comput. Methods Appl. Mech. Eng. 2017, 314, 473–493. [CrossRef]
9. Tran, AS; Thinh Ngo, HQ; Dong, VK; Vo, AH Design, Steuerung, Modellierung und Simulation eines mechanischen Beatmungsgeräts für Unterstützung der Atmung. Math. Probl. Eng. 2021, 2021, 2499804. [CrossRef]
10. El-Hadj, A.; Kezrane, M.; Ahmad, H.; Ameur, H.; Bin Abd Rahim, SZ; Younsi, A.; Abu-Zinadah, H. Design und Simulation von mechanische Beatmungsgeräte. Chaos Solitons Fractals 2021, 150, 111169. [CrossRef]
11. Tharion, J.; Kapil, S.; Muthu, N.; Tharion, J.; Subramani, K. Schnell herstellbares Beatmungsgerät für Atemnotfälle von COVID-19-Krankheit. Trans. Indian Natl. Acad. Eng. 2020, 5, 373–378. [CrossRef]
12. Pivik, WJ; Clayton, GM; Jones, GF; Nataraj, C. Dynamische Modellierung eines kostengünstigen mechanischen Beatmungsgeräts. IFAC-PapersOnLine 2022, 55, 81–85. [CrossRef]
13. Al-Naggar, N. Modellierung und Simulation eines druckgesteuerten mechanischen Beatmungssystems. J. Biomed. Sci. Eng. 2015, 8, 707–716. [CrossRef]
14. Shi, Y.; Ren, S.; Cai, M.; Xu, W. Modellierung und Simulation eines volumengesteuerten mechanischen Beatmungssystems. Mathematisches Problem. Eng. 2014, 2014, 271053. [CrossRef]
15. Al-Naggar, NQ; Al-Hetari, HY; Al-Akwaa, FM Simulation eines mathematischen Modells für Lunge und mechanische Beatmung. J. Sci. Technol. 2016, 21, 1–9 .
16. Giri, J.; Kshirsagar, N.; Wanjari, A. Design und Simulation eines KI-basierten kostengünstigen mechanischen Beatmungsgeräts: Ein Ansatz. Mater. Today Proc. 2021, 47, 5886–5891. [CrossRef]
17. Hannon, DM; Mistry, S.; Das, A.; Saffaran, S.; Laffey, JG; Brook, BS; Hardman, JG; Bates, DG Modellierung Mechanische Beatmung in silico – Potenziale und Fallstricke. Semin. Respir. Crit. Care Med. 2022, 43, 335–345. [CrossRef]
18. Mehedi, IM; Shah, HS; Al-Saggaf, UM; Mansouri, R.; Bettayeb, M. Fuzzy-PID-Regelung für Atmungssysteme. J. Healthc. Eng. 2021, 2021, 1926711. [CrossRef]
19. Mehrmann, V.; Unger, B. Steuerung port-Hamiltonscher differentiell-algebraischer Systeme und Anwendungen. Acta Numer. 2023, 32, 395–515. [CrossRef]
20. van der Schaft, A. Port-Hamiltonian Modeling for Control. Annu. Rev. Control Robot. Auton. Syst. 2020, 3, 393–416. [CrossRef]
21. Villegas, JA Ein Port-Hamilton-Ansatz für verteilte Parametersysteme. Dissertation, Institut für Angewandte Mathematik, Fakultät EWI, Universiteit Twente, Enschede, Niederlande, 2007.
22. Le Gorrec, Y.; Zwart, H.; Maschke, B. Dirac-Strukturen und Randkontrollsysteme im Zusammenhang mit schiefsymmetrischen Differential Operatoren. SIAM J. Control Optim. 2005, 44, 1864–1892. [CrossRef]

Machine Translated by Google

23. van der Schaft, AJ; Maschke, BM Hamiltonsche Formulierung von verteilten Parametersystemen mit Energiefluss an den Rändern.
J. Geom. Phys. 2002, 42, 166–194. [CrossRef]
24. Anderson, J. Computational Fluid Dynamics: Grundlagen und Anwendungen; McGraw-Hill International Editions: Mechanical Maschinenbau; McGraw-Hill Inc.: New York, NY, USA, 1995.
25. Kami ´nski, Z. Ein vereinfachtes konzentriertes Parametermodell für pneumatische Rohre. Math. Comput. Model. Dyn. Syst. 2017, 23, 523–535. [Querverweis]
26. Albanese, A.; Cheng, L.; Ursino, M.; Chbat, NW Ein integriertes mathematisches Modell des menschlichen Herz-Lungen-Systems: Modellentwicklung. Am. J. Physiol.-Heart Circ. Physiol. 2016, 310, H899–H921. [CrossRef] [PubMed]
27. Bondy, JA; Murty, USR Graphentheorie mit Anwendungen; The Macmillan Press Ltd.: London, UK, 1976.
28. Taghizadeh, M.; Ghaffari, A.; Najafi, F. Modellierung und Identifikation eines Magnetventils für PWM-Steuerungsanwendungen. Comptes Rendus Mécanique 2009, 337, 131–140. [CrossRef]

Haftungsausschluss/Anmerkung des Herausgebers: Die in allen Veröffentlichungen enthaltenen Aussagen, Meinungen und Daten sind ausschließlich die der einzelnen Autoren und Mitwirkenden und nicht die von MDPI und/oder den Herausgebern. MDPI und/oder die Herausgeber lehnen jegliche Verantwortung für Personen- oder Sachschäden ab, die aus den im Inhalt erwähnten Ideen, Methoden, Anweisungen oder Produkten resultiere

Machine Translated by Google

Berechnung

MDPI

Artikel

Die Wirkung von Proportional-, Proportional-Integral- und Proportional-Integral-Differential-Regler zur Verbesserung der Verhalten von Torsionsschwingungen an einem dynamischen System

Khalid Alluhydan [1], Ashraf Taha EL-Sayed [2,*] und Fatma Taha El-Bahrawy [2]

[1] Abteilung für Maschinenbau, Technische Hochschule, König-Saud-Universität, Postfach 800, Riad 11421, Saudi-Arabien; kalluhydan@ksu.edu.sa
[2] Abteilung für Grundlagenwissenschaften, Modern Academy for Engineering and Technology, Elmokattam 11439, Ägypten; fatma.taha@eng.modern-academy.edu.eg * Korrespondenz: atelsayed@eng.modern-academy.edu.eg

Zusammenfassung: Das Hauptziel dieser Forschung besteht darin, die starken Vibrationen, die das Modell verursacht, durch eine geeignete Vibrationskontrolle zu verringern. Daher beginnen wir mit der Implementierung verschiedener Controllertypen, um ihre Auswirkungen auf die Reaktion des Systems zu untersuchen und die Ergebnisse jeder Steuerung zu bew Die Reglerarten werden als Proportional- (P), Proportional-Integral- (PI) und Proportional- Integral-Differential- (PID) Regler dargestellt. Wir haben eine PID-Regelung eingesetzt, um das Torsionsschwingungsverhalten eines dynamischen Systems zu regulieren. Der PID-Regler zielt darauf ab, die Systemstabilität zu erhöhen, nachdem wir die Auswirkungen der P- und PI-Regelung untersucht haben. Diese Art der Regelung stellt sicher, dass das System keine instabilen Komponenten enthält . Durch Verwendung der MTSP-Technik (Multiple Time Scale Perturbation) wurde eine Näherungslösung erster Ordnung erreicht. Unter Verwendung des Frequenzgangfunktionsansatzes werden die Stabilität und die stationäre Reaktion des Systems im primären Resonanzszenario (ÿ1 ÿ= ÿ1 , ÿ2 ÿ= ÿ2) als schlechteste Resonanz betrachtet und behandelt. Zusätzlich werden die chaotische Reaktion des nichtlinearen dynamischen Systems und die numerische Lösung für verschiedene Parameterwerte untersucht. Die MATLAB-Programme werden verwendet, um Simulationsergebnisse zu erzielen.

Schlüsselwörter: MSPT; P; PI; PID-Regler; nichtlineare Differentialgleichungen; aktive Regelung; Stabilität; Torsionsschwingung

check for updates

Zitat: Alluhydan, K.; EL-Sayed, AT; El-Bahrawy, FT Die Wirkung von Proportional-, Proportional-Integral- und Proportional-Integral-Differential-Reglern auf die Verbesserung der Verhalten bei Drehschwingungen über ein dynamisches System. Computation **2024,** 12, **157. https://doi.org/ 10.3390/ computation12080157**

Wissenschaftlicher Herausgeber:

Chathura Wanigasekara

Erhalten: 15. Juli 2024
Überarbeitet: 24. Juli 2024
Akzeptiert: 29. Juli 2024
Veröffentlicht: 3. August 2024

Copyright: © 2024 bei den Autoren. Lizenznehmer MDPI, Basel, Schweiz.

Dieser Artikel ist ein Open Access-Artikel vertrieben unter den Bedingungen und Bedingungen der Creative Commons

Namensnennungslizenz (CC BY) (https:// creativecommons.org/licenses/by/ 4.0/).

1. Einleitung

Torsionsschwingungen treten in irgendeiner Form in allen rotierenden Maschinen auf. Selbst wenn die Schwingung eine destruktive Amplitude erreicht, gibt es Situationen, in denen sie ohne spezielle Überwachungsgeräte nicht erkannt werden kann. Nachdem die Biegesteifigkeit der Welle und das diametrale Trägheitsmoment durch die Verdrehsteifigkeit bzw. das polare Trägheitsmoment ersetzt wurden, sind viele Elemente der Torsionsschwingung gleichwertig mit Wellenschwingungen. Wenn etwas die Verbindung zwischen der Schwingung und dem Boden vermittelt oder wenn Zahnradzähne oder Kupplungsbacken leer sind, können Torsionsschwingungen anhand des Geräuschpegels und der (berührbaren) Schwingungen erkannt werden. Torsionsschwingungen können über Zahnradsätze, die zur Änderung der Geschwindigkeit von Kraftübertragungssystemen verwendet werden, mit dem Boden interagieren. Bei Kolbenmaschinen wird der Weg zum Boden durch Gleitkurbelmechanismen bereitgestellt, die in Motoren und Kompressoren zu finden sind. Typischerweise manifestiert sich Torsionsschwingung als kompliziertes Schwingungssignal mit zahlreichen Frequenzkomponenten. Einige Systeme erfahren kurze Torsionsschwingungen aufgrund von Stößen du

Konventionelle PID-Regler haben sich aufgrund ihres einfachen Designs, ihres erschwinglichen Preises, ihrer einfachen Wartung und der Verfügbarkeit vorgefertigter Module in zahlreichen industriellen Anwendungen durchgesetzt **[1–3]. Ref. [4] bietet die Implementierung einer nichtlinearen zustandsabhängigen (SDP-PID+) Regelung unter Verwendung des SDP-Transferfunkt**

Machine Translated by Google

der nichtlinearen Beschreibung dynamischer Strukturen. Die Feinabstimmung der traditionellen PID-Regelung ist aufgrund der spezifischen Eigenschaften zahlreicher Verfahren problematisch, darunter binäre Abtastzeitverzögerungen, längere Dauern, TF-Modelle höherer Ordnung und Nichtlinearit Sayed et al. [8] entwickelten einen nichtlinearen, robusten SDP-PID-Regelungsansatz für eine diskrete Übertragungsfunktion mit nichtlinearen Eigenschaften. Diese Forschung konzentrierte sich auf robuste Reaktionsprozesse, für die die robusten PID- und SDP-PID-Techniken speziell entwickel Dano und Julli'ere [9] untersuchten, wie MFC-Aktuatoren Schwingungen in einer Verbundstruktur kontrollierten . Kumar und Ray [10] untersuchten Schwingungen in Sandwichschalen mit einem bis drei piezoelektrischen Verbundwerkstoffen und Schichtdämpfungstechniken. Der PD-Regler ist so ausgelegt, dass er Schwingungen eines aufgehängten Jeffcott-Rotors durch zwei Polpaare verringert [11]. Ein PD-Regler kann die Schwingungen mit stationärer Amplitude eines Balkensystems effek Eissa et al. [13,14] schlugen einen PD-Regler und einen zeitverzögerten PD-Regler vor, um die Vibrationen magnetischer Systeme mit kubischen und quadratischen nichtlinearen Koeffizienten unter parametrischen Hauptkräften zu reduzieren. Bauomy und El-Sayed verwendeten einen PD-Regler, um das Verhalten der laminierten MFC-Schalenstruktur zu steuern. Der Zweck des Einsatzes des PD-Reglers besteht darin, die Systemstabilität durch verbesserte Kontrolle zu verbessern, da er zukünftige Fehler in der Rahmenreaktion vorhersagen kann [15]. Mehr als 90 % der Industrien verwenden aufgrund ihrer Einfachheit, Funktionalität und Benutzerfreundlichkeit immer noch PID- Regler [16]. PID-Reglergewinne werden durch Anpassung der Frequenzantwort des ges Kürzlich wurde ein systematischer Ansatz verwendet, um PID-Parameter für nichtlineare unsichere Strukturen auszuwählen [18]. PID-Regler bieten gegenüber passiven Ansätzen Vorteile zur Regelung semiaktiver Federungssysteme [19–21]. Ref. [22] untersucht die Regelung eines semiaktiven Viertelauto- Federungssystems unter Verwendung eines PID-Reglers. Der typische PID-Regler wird unter Verwendung des Ziegler-Nichols-Ansatzes erstellt und wird zur Regelung des Federungssystems verwendet . Die Torsionsschwingungen einer nichtlinearen dynamischen Struktur mit einem Freiheitsgrad werden mit aktiver Steuerung geregelt [23]. Wenzhi und Zhiyong [24] schlugen eine aktive Steuerung vor , um die Torsionsschwingungen in einem großen Turbogenerator mit einer Rotorwelle zu verringern. Eine Ganzzustands- Rückkopplungsregelung unter Verwendung eines linearen quadratischen Reglers (LQR) verringert wirksam die Torsionsschwingungsenergie und -reaktion im Wellensystem des Turbogenerators. El-Sayed und Bauomy [25] gelang es, die Torsionsschwingungen eines nichtlinearen dynamischen Systems unter Verwendung passiver und aktiver Steuerungsmethoden zu verringern . Die Forschungsstudie [26] schlägt einen adaptiven PI- ereignisgesteuerten Regelungsansatz für nichtlineare MIMO-Systeme mit unvorhersehbarer Eingangsverzögerung vor . Für einen solarbetriebenen volumetrischen Methan-/Dampfreformierungsreaktor (SVMSR) mit passivem Wärmemanagement wird eine adaptive proportionale/proportional-integrale (P/PI) Regelungsstrategie vorgeschlagen. Die Strategie zielt darauf ab, Frühere Forschungen, wie Studien [28–30], haben die erfolgreiche Anwendung der Mehrskalenstörungstechnik zur Ableitung von Näherungslösungen für verschiedene Schwingungssysteme demonstriert . Diese Studien nutzen häufig MATLAB-Programme zur Analyse und Lösung von Schwingungsproblemen.

Ein Kragträgermodell wurde untersucht und abgeleitet, um eine Zwischenmasse bei harmonischer Anregung zu belasten. Die Schwingungsunterdrückung kann durch den Einsatz eines IRC+ NSC-Reglers erreicht werden. Zur Feststellung der instabilen und stabilen Zonen für jede Frequenzgangkurve wurde eine numerische Stabilitätsforschung durchgeführt [31]. Diese Forschung untersucht den Einsatz eines nichtlinearen Federpendels zur Schwingungskontrolle der Schiffsrollbewegung. Drei nichtlineare Differentialgleichungen zweiter Ordnung – eine für den Drehwinkel, eine für die relative Dehnung der Absorberfeder und eine für die Dehnung der Absorberfeder – bilden das mathematische Modell, das die Schiffsrollbewegung mit dem Absorber abbildet. Die Autoren verwenden eine Reihenlösung, in der sie Terme bis zur vierten Ordnung in trigonometrischen Funktionen des Drehwinkels berücksichtigen. Laut den Autoren können die beiden Modi des nichtlinearen Federpendels so gestaltet werden, dass sie auf multiparametrische Anregungskräfte so reagieren, dass ihre Maximalwerte um 8,8 % bzw. 0,02 % reduziert werden [32]. Die PPF-Steuerung des nichtlinearen GMA-Rahmens wurde in [33] beschrieben. Die Grundresonanz und die Stabilität der Ra

Machine Translated by Google

Es wurden Experimente durchgeführt, um die Richtigkeit der Ergebnisse zu überprüfen. Die Untersuchung illustrierte die Entwicklung des Frameworks und stellte seinen Nutzen früheren Untersuchungen gegenüber. Die 3D-Darstellung verbessert und veranschaulicht die Richtigkeit der Arbeit. Ref. [34] schlägt die Verwendung von NIPPF vor Regler zur Steuerung der nichtlinearen Schwingung der Primärresonanz einer rotierenden Welle Vibration. Dazu gehört ein Vergleich zwischen den Reglern für die FRCs unter Studie, NIPPF und ANIPPF. Ein System mit zwei Freiheitsgraden, das quadratische und kubische Nichtlinearitäten zwischen den parametrischen und externen Kräften demonstrieren das berechnete System. Mehrere Skalen werden miteinander verbunden, um die Stabilität der gemessenen Struktur und erhalten Sie Näherungen an Lösungen. Aus der mathematischen Lösung Resonanz wird abgerufen. Der Runge-Kutta-Prozess vierter Ordnung wird verwendet, um die Systemleistung zu messen Leistung. Innerhalb der numerischen Ergebnisse ist die geplante Frequenz der untersuchten Struktur Die Antwortkurven werden auf Einflüsse einschließlich signifikanter Koeffizienten untersucht [35]. Ein langsam laufender Permanentmagnet-Synchronmotor mit hohem Drehmoment treibt den halbo Antriebs-Schneidgetriebesystem eines Walzenladers, das nichtlineare integrale positive Positions Feedback (NIPPF) und adaptives nichtlineares integrales positives Positionsfeedback (ANIPPF) Regler. Mit der Mittelwertmethode zur Lösung der nichtlinearen Differentialgleichungen und Die Modellierung des Systems mit Reglern ergibt eine analytische Lösung im Fall von primären und 1:1 interne Resonanz. Das MATLAB-Programm wurde verwendet, um die numerischen und analytische Lösungen für Zeitverlauf und FRC, um deren Vergleichbarkeit zu überprüfen [36].

In dieser Arbeit verwendeten wir die PID-Regelung zur Unterdrückung der Torsionsschwingung, nachdem wir das Modell auf einer Website [37]. Ein System mit zwei Freiheitsgraden unter Mehrfachanregung ergibt sich daraus. Um eine geschätzte Lösung bis zur Näherung erster Ordnung zu liefern, MSPT wird durchgehend eingesetzt. Mithilfe von Frequenzgangfunktionen wird die Stabilität des Das System wird in der Nähe des Hauptresonanzfalls untersucht. Einige Vorschläge zur Die verschiedenen Parameter des Systems werden angegeben. Anhand von Zahlenbeispielen wird gezeigt, wie aktive Regler beeinflussen das Verhalten des Systems. Es wird ein Vergleich zwischen PID Steuerung und Zusatzcontroller.

2. Mathematische Modellierung

2.1. Systemdynamik ohne Kontrolle

Dieser Abschnitt dient der Veranschaulichung der Untersuchung des dynamischen Systems der Torsionsschwingung. Das dynamische Modell in dieser Arbeit besteht aus zwei gekoppelten Teilen, wie gezeigt in Abbildung 1. ÿ1 und ÿ2 repräsentieren die Winkelpositionen (verallgemeinerte Koordinaten) innerhalb der System. In diesem nichtlinearen dynamischen System gilt:

- **I1 und I2 stellen die polaren Massenträgheitsmomente dar.**
- **k1 ist die lineare Federsteifigkeit des ersten Teils.**
- **k2 stellt die Federsteifigkeit des zweiten Teils dar, die sich wie folgt zusammensetzt:**
  - **k21: eine lineare Komponente.**
  - **k22: nichtlineare quadratische und kubische Komponenten.**
- **F 1 und F 2 bezeichnen die verallgemeinerten Erregerkräfte.**

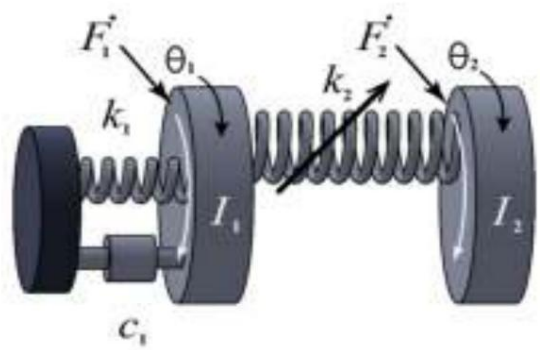


Abbildung 1. Modell des schematischen Diagramms des Hauptsystems.

$$\ddot{\theta}_1 I_1 + \dot{\theta}_1 c_1 + \theta_1 k_{21} + \theta_1^2 k_{22} - (\theta_2 - \theta_1) k_{21} - (\theta_2 - \theta_1)^2 k_{22} + (\theta_2 - \theta_1)^3 k_{23} = F_1 \cos \omega t,$$

$$\ddot{\theta}_2 I_2 + \dot{\theta}_2 c_2 + (\theta_2 - \theta_1) k_{21} + (\theta_2 - \theta_1)^2 k_{22} + (\theta_2 - \theta_1)^3 k_{23} = F_2 \cos \omega t,$$

Machine Translated by Google

Daher **können** die Bewegungsgleichungen des in Abbildung **1** **gefundenen Freikörpersystems auf die gleiche Weise wie die in [25,37] konstruiert werden:**

$$\mathbf{I1}\,\ddot{\ddot{\mathbf{y}}}\mathbf{1} + k1\ddot{y}1 + \mathbf{c1}\,\dot{\mathbf{y}}\mathbf{1} + \mathrm{k21}(\ddot{y}1\ \dot{\mathbf{y}}\mathbf{1}) + \mathrm{k22}(\ddot{y}1\ \dot{\mathbf{y}}\mathbf{2})^2 + \mathrm{k23}(\ddot{y}1\ \dot{\mathbf{y}}\mathbf{2})^3 = F1, \quad (1)$$

$$I_{ch2}\,\ddot{\mathbf{y}}\mathbf{2} + \mathrm{k21}(\ddot{y}2\ \dot{\mathbf{y}}\mathbf{1})\ \dot{\mathbf{y}}\mathbf{1} + \mathrm{k22}(\ddot{y}1\ \dot{\mathbf{y}}\mathbf{2})^2\ \dot{\mathbf{y}}\mathbf{2} + \mathrm{k23}(\ddot{y}1\ \dot{\mathbf{y}}\mathbf{2})^3 = F2, \quad (2)$$

$$\ddot{\mathbf{y}}\mathbf{1} + \frac{\mathbf{k1}}{I_{ch1}} + \frac{\mathbf{k21}}{I_{ch1}}\,\mathbf{k22}\,\mathbf{c1}\,(\ddot{y}1\ \dot{\mathbf{y}}\mathbf{2}) + (\ddot{y}1\ \dot{\mathbf{y}}\mathbf{2})\,\dot{\mathbf{y}}\mathbf{1} + \dot{\mathbf{y}}\mathbf{1} + \frac{\mathbf{k23}}{I_{ch1}}\,2\,(\ddot{y}1\ \dot{\mathbf{y}}\mathbf{2}) + \mathbf{I1}\,3 = \frac{F_1^{\bullet}}{I_{ch1}}, \quad (3)$$

$$\ddot{\mathbf{y}}\mathbf{1} + \frac{\mathbf{Ich1}\,\mathbf{k1} + \mathbf{k21}}{I_{ch1}}\,\dot{\mathbf{y}}\mathbf{2} + (\ddot{y}1\ \dot{\mathbf{y}}\mathbf{2})\,\frac{\mathbf{c1}}{I_{ch1}}\,\dot{\mathbf{y}}\mathbf{1} + \frac{\mathbf{k21}\,\mathbf{k22}\,\ddot{\mathbf{y}}\mathbf{1} + \ddot{\mathbf{y}}\mathbf{1}}{I_{ch1}}\,\frac{\mathbf{k23}}{I_{ch1}}\,2\,(\ddot{y}1\ \dot{\mathbf{y}}\mathbf{2}) + 3 = \frac{F_1^{\bullet}}{I_{ch1}}, \quad (4)$$

$$\ddot{\mathbf{y}}\mathbf{2} + \frac{\mathbf{k21}\,\mathbf{k22}\,\ddot{\mathbf{y}}\mathbf{2} + (\ddot{y}2\ \dot{\mathbf{y}}\mathbf{1})\,\dot{\mathbf{y}}}{I_{ch2}}\,(\ddot{y}1\ \dot{\mathbf{y}}\mathbf{2}) + 2\,\frac{\mathbf{k23}}{I_{ch2}}\,(\ddot{y}1\ \dot{\mathbf{y}}\mathbf{2})^3 = \frac{F_2^{\bullet}}{I_{ch2}}, \quad (5)$$

$$\frac{\ddot{\mathbf{y}}\mathbf{1}}{\ddot{\mathbf{y}}\mathbf{0}} + \frac{\mathbf{k1} + \mathbf{k21}}{I_{ch1}}\,\frac{\dot{\mathbf{y}}\mathbf{1}\,\dot{\mathbf{y}}\mathbf{1}\,\mathbf{c1} + \ddot{\mathbf{y}}\mathbf{0}}{\mathbf{I1}\,\ddot{\mathbf{y}}\mathbf{0}}\,\frac{\mathbf{k21}\,\ddot{\mathbf{y}}\mathbf{2}\,\mathbf{k22}\ddot{\mathbf{y}}\mathbf{0} + \ddot{y}}{\mathbf{I1}\,\ddot{\mathbf{y}}_{\mathbf{0}}^{\mathbf{2}}}\,(\ddot{y}1\ \dot{\mathbf{y}}\mathbf{2})^2 + \frac{\mathbf{k23}\ddot{\mathbf{y}}_{\mathbf{0}}^{\mathbf{2}}}{I_{ch1}}\,(\ddot{y}1\ \dot{\mathbf{y}}\mathbf{2})^3 = \frac{F_1^{\bullet}}{I_{ch1}}, \quad (6)$$

$$\ddot{\mathbf{y}}\mathbf{2}\,\frac{\mathbf{k21} + (\ddot{y}2\ \dot{\mathbf{y}}\mathbf{1})}{\mathbf{I2}\,\ddot{\mathbf{y}}\mathbf{0}}\,\frac{\mathbf{k22}\ddot{\mathbf{y}}\mathbf{0}}{I_{ch2}\,\ddot{y}^2}\,(\ddot{y}1\ \dot{\mathbf{y}}\mathbf{2})^2 + \frac{\mathbf{k23}\ddot{\mathbf{y}}_{\mathbf{0}}^{\mathbf{2}}}{I_{ch2}}\,(\ddot{y}1\ \dot{\mathbf{y}}\mathbf{2})^3 = \frac{F_2^{\bullet}}{I_{ch2}}. \quad (7)$$

Wir werden nun die dimensionslosen Formen der in dieser Analyse verwendeten Parameter vorstellen.

$$\ddot{y}j = \frac{\ddot{y}j}{\ddot{\mathbf{y}}\mathbf{0}}\,(j = \mathbf{1}, 2),\ \ddot{y}\,\frac{\mathbf{2}}{\mathbf{1}} = \frac{\mathbf{k1} + \mathbf{k21}}{I_{ch1}}\,\frac{\mathbf{k21}\,\mathbf{k22}\ddot{\mathbf{y}}\mathbf{0}}{\mathbf{c1}}, \ddot{y} = , \ddot{y} = , \ddot{\mathbf{y}}\mathbf{1} = , \ddot{\mathbf{y}}\mathbf{2} = \frac{\mathbf{k23}\ddot{\mathbf{y}}_{\mathbf{0}}^{\mathbf{2}}}{I_{ch1}}\,\ddot{y}^2 = \frac{\mathbf{k21}\,\mathbf{k22}\ddot{\mathbf{y}}\mathbf{0}}{I_{ch2}}, \ddot{\mathbf{y}}\mathbf{3} = \frac{}{I_{ch2}},$$

$$\ddot{\mathbf{y}}\mathbf{4} = \frac{2\,\mathbf{k23}\ddot{\mathbf{y}}_{\mathbf{0}}}{I_{ch2}}, \mathrm{fj}\,\sin(\ddot{y}j\,t) = \frac{F_j^{\bullet}}{Ij}.$$

Basierend auf den obigen Parametern können wir die folgenden Bewegungsgleichungen in ihrer dimensionslosen Form erhalten:

$$\ddot{\mathbf{y}}\mathbf{1} + \ddot{y}\,\frac{2}{1}\ddot{y}1 + \ddot{y}\ \dot{\mathbf{y}}\mathbf{1}\ \dot{\mathbf{y}}\ddot{y}2 + \ddot{y}1(\ddot{y}1\ \dot{\mathbf{y}}\mathbf{2})^2 + \ddot{y}2(\ddot{y}1\ \dot{\mathbf{y}}\mathbf{2})^3 = \mathbf{f1}\,\sin(\ddot{y}1t), \quad (8)$$

$$\ddot{y}\ \ \frac{2}{2}\,(\ddot{y}2\ \dot{\mathbf{y}}\mathbf{1})\ \dot{\mathbf{y}}\ \ddot{y}3(\ddot{y}1\ \dot{\mathbf{y}}\mathbf{2})\ \dot{\mathbf{y}}\mathbf{2} + {}^2\ \dot{\mathbf{y}}\ \ddot{y}4(\ddot{y}1\ \dot{\mathbf{y}}\mathbf{2})^3 = \mathbf{f2}\,\sin(\ddot{y}2t). \quad (9)$$

2.2. Systemdynamik mit PID-Regelung

Das Ziel des vorliegenden Abschnitts besteht darin, PID-Regler vorzuschlagen, um schädliche Torsionsschwingungen des dynamischen Systems in dieser Arbeit in einem der schlimmsten Resonanzfälle zu reduzieren, wie in Abbildung 2 dargestellt. Darüber hinaus wird die Steuerung in unserer Arbeit als zwei Nettosteuerkräfte FC1 **und** FC2 dargestellt , **die erzeugt werden, um die Torsionsschwingun**

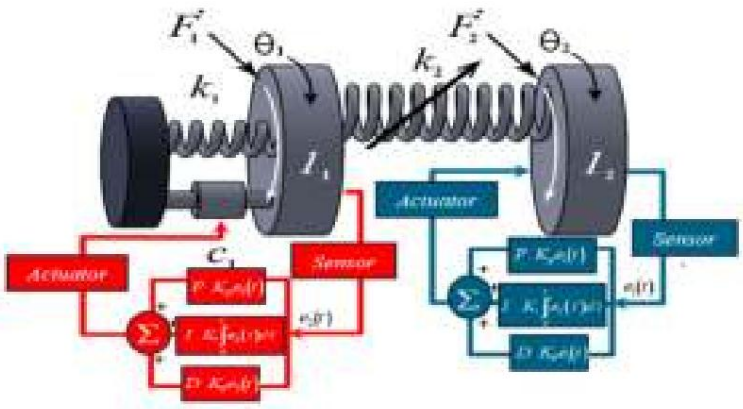


Abbildung 2. Modell des schematischen Diagramms des Hauptsystems mit PID-Reglern.

Machine Translated by Google

Rückkopplungs- und Kd **bezeichnen die proportionale Rückkopplungs-Steuerverstärkung, die integrale Steuerverstärkung. Hier bezeichnen** Kp, Ki , **Steuerverstärkung bzw. die derivative Rückkopplungs-Steuerverstärkung. Außerdem bezeichnen** e1(t) **und** e2(t) **den Fehlerwert bei einem stationären Schrittfehler von Null.**

Die Bewegungsgleichungen unter Verwendung der an das nichtlineare dynamische System gekoppelten PID-Regler, wie in Abbildung 2 dargestellt , **können wie folgt ausgedrückt werden:**

$$\ddot{\ddot{y}}1 + \ddot{y}\ 2\ddot{y}1 + \ddot{y}\ddot{y}\ \dot{\ddot{y}}1\ \ddot{y}\ \ddot{y}\ddot{y}\ddot{y}2 + \ddot{y}\ddot{y}1(\ddot{y}1\ \ddot{y}\ \ddot{y}2)^2 + \ddot{y}\ddot{y}2(\ddot{y}1\ \ddot{y}\ \ddot{y}2)^3 = \ddot{y}f1\sin(\ddot{y}1t) + \ddot{y}FC1\ , \quad (10)$$

$$\ddot{\ddot{y}}2 + \ddot{y}\ 2\ (\ddot{y}2\ \ddot{y}\ \ddot{y}1)\ \ddot{y}\ \ddot{y}\ddot{y}3(\ddot{y}1\ \ddot{y}\ \ddot{y}2)^2 \ddot{y}\ \ddot{y}\ddot{y}4(\ddot{y}1\ \ddot{y}\ \ddot{y}2)^3 = \ddot{y}f2\sin(\ddot{y}2t) + \ddot{y}FC2\ , \quad (11)$$

$$FC1 = \ddot{y}K p\ddot{y}1 \ddot{y} Ki \int_0^T \ddot{y}1(\ddot{y})d\ddot{y}\ \ddot{y}\ Kd\ \dot{\ddot{y}}1\ , \quad (12a)$$

$$FC2 = \ddot{y}K p\ddot{y}2 \ddot{y} Ki \int_0^T \ddot{y}2(\ddot{y})d\ddot{y}\ \ddot{y}\ Kd\ \dot{\ddot{y}}2\ , \quad (12b)$$

$$\ddot{\ddot{y}}1 + \ddot{y}2\ \ddot{y}1\ \ddot{y}\ \ddot{y}\ddot{y}\ddot{y}2 + \ddot{y}\ddot{y}1(\ddot{y}1\ \ddot{y}\ \ddot{y}2)\ 1\ \dot{\ddot{y}}1 + \ddot{y}\ddot{y}\ddot{y}K p\ddot{y}1\ \ddot{y}\ \ddot{y}Ki \int_0^T \ddot{y}1(\ddot{y})d\ddot{y}\ \ddot{y}\ Kd\ \dot{\ddot{y}}1\ , \quad (13)$$

$$\ddot{\ddot{y}}2 + \ddot{y}2\ddot{y}(\ddot{y}2\ \ddot{y}\ \ddot{y}1)\ \ddot{y}\ \ddot{y}\ddot{y}3(\ddot{y}1\ \ddot{y}\ \ddot{y}2)^2 \ddot{y}\ \ddot{y}\ddot{y}4(\ddot{y}1\ \ddot{y}\ \ddot{y}2)^3 = \ddot{y}f2\sin(\ddot{y}2t)\ \ddot{y}\ddot{y}K p\ddot{y}2\ \ddot{y}\ \ddot{y}Ki \int_0^T \ddot{y}2(\ddot{y})d\ddot{y}\ \ddot{y}\ Kd\ \dot{\ddot{y}}2\ . \quad (14)$$

3. Analytische Untersuchungen

3.1. Störungsanalyse **In**

diesem Abschnitt wird die Mehrskalenstörungstechnik (MSPT) angewendet, um eine Näherungslösung des nichtlinearen dynamischen Systems mit der vorgeschlagenen Regelung (d. h. PID-Regelung) zu erhalten, die durch die Gleichungen (13) und (14) gegeben ist. Entsprechend konnten wir eine Näherungslösung erster Ordnung für die Gleichungen (13) und (14) finden, die wie folgt vorgeschlagen wird **[28,29]:**

$$\ddot{y}n = \ddot{y}n0 + \ddot{y}\ddot{y}n1 + O\ddot{y}^2\ , (n = 1, 2) \quad (15)$$

wobei der Nebenstörungsparameter $\ddot{y}$ **im Bereich 0 <** $\ddot{y}$ **ÿ 1 liegt. Wir definieren zwei Zeitskalen, T0 und T1, wobei T0** = t **eine schnelle Skala darstellt, während T1** = ÿt **die langsame ist . Die Ableitungen der Zeit werden wie folgt umgewandelt:**

$$\frac{D}{dt} = \frac{dT0}{dt}\frac{D}{dT0} + \frac{d\ddot{y}1}{dt}\frac{D}{d\ddot{y}1} + \ldots + \ddot{y}\ddot{y}\ldots, \quad (16)$$

$$\frac{d^2}{dt^2} = \frac{D}{dt}\left(\frac{dT0}{dt}\frac{D}{dT0} + \ddot{y}\frac{dT1}{dt}\frac{D}{dT1} + \ldots\right) = D0^2 + 2\ddot{y}D0D1 + \ldots . \quad (17)$$

wobei Dj = (j = **0, 1**). ÿTj **Der**

folgende Satz gewöhnlicher Differentialgleichungen wurde erstellt, indem die Gleichungen (15) und (16) in die Gleichungen (13) und (14) eingesetzt wurden und die Koeffizienten der **gleichen Potenz von** $\ddot{y}$ auf beiden Seiten **gleichgesetzt wurden :** $O\ddot{y}^0$ **:**

$$D0^2\ddot{y}0 + \ddot{y}\ddot{y}0 = 0, \quad (18a)$$

$$2D0D1\ddot{y}0 + \ddot{y}2\ddot{y}0 = 0. \quad (18b)$$

$O\ddot{y}^1$ **:**

Machine Translated by Google

$$D2 + \ddot{y}2\ 1\ \ddot{y}11 = \ddot{y}2D0D1\ddot{y}10\ \ddot{y}\ \ddot{y}D0\ddot{y}10 + \ddot{y}\ddot{y}20\ \ddot{y}\ \ddot{y}1(\ddot{y}10\ \ddot{y}\ \ddot{y}20)\ 0 \quad {}^{2}\ \ddot{y}\ \ddot{y}2(\ddot{y}10\ \ddot{y}\ \ddot{y}20)^{3}$$

$$+f1\ \sin(\ddot{y}1t)\ \ddot{y}\ K\ddot{p}\ddot{y}10\ \ddot{y}\ Ki \int_{O}^{T} \ddot{y}10(\ddot{y})d\ddot{y}\ \ddot{y}\ KdD0\ddot{y}10 \quad , \quad \textbf{(19a)}$$

$$D2_0 + \ddot{y}2\ 2\ \ddot{y}21 = \ddot{y}2\ 2\ \ddot{y}11\ddot{y}\ 2D0D1\ddot{y}20 + \ddot{y}3(\ddot{y}10\ \ddot{y}\ \ddot{y}20) \quad {}^{2} + \ddot{y}4(\ddot{y}10\ \ddot{y}\ \ddot{y}20)^{3} + f2\ \sin(\ddot{y}2t)$$

$$\ddot{y}K\ddot{p}\ddot{y}20\ \ddot{y}\ Ki \int_{O}^{T} \ddot{y}20(\ddot{y})d\ddot{y}\ \ddot{y}\ KdD0\ddot{y}20 \quad . \quad \textbf{(19b)}$$

Die Näherung nullter Ordnung wird durch die allgemeine Lösung der Gleichungen (18a) und (18b) dargestellt, die wie folgt ausgedrückt werden kann:

$$\ddot{y}10 = A1(T1)\ exp(i\ddot{y}1T0) + \textbf{cc.}, \quad \textbf{(20a)}$$

$$\ddot{y}20 = A2(T1)\ exp(i\ddot{y}2T0) + \ddot{y}A1(T1)\ exp(i\ddot{y}1T0) + cc. \quad \textbf{(20b)}$$

wobei cc **die komplex konjugierte der vorhergehenden Komponenten bezeichnet,** Am **die komplexe Funktion in T1 und** $\ddot{y} = \frac{\ddot{y}2_2}{\ddot{y}2\ 2\ddot{y}\ddot{y}2_1}$ **.**

Wenn wir Gleichung (20) in Gleichung (19a) einsetzen, erhalten wir

$$D2_0 + \ddot{y}2\ 1\ \ddot{y}11 = \frac{\ddot{y}}{\ddot{y}}\ \ddot{y}2i\ddot{y}1D1A1\ \ddot{y}\ i\ddot{y}1\ddot{y}A1 + \ddot{y}\ddot{y}A1\ \ddot{y}\ \ddot{y}2 \quad 6(1\ \ddot{y}\ \ddot{y})A1A2\overline{A2} \quad \frac{\ddot{y}}{\ddot{y}}\ exp(i\ddot{y}1T0)$$

$$\ddot{y}\ \ddot{y}\ Kp\ \ddot{y}\ i\ Ki_{\ddot{y}1} + Kd\ i\ddot{y}1\ \textbf{A1} \quad +3(1\ \ddot{y}\ \ddot{y})\ 3A\ \textbf{2}\overline{A1} \quad \ddot{y}$$

$$+ \ddot{y}\ddot{y}1(1\ \ddot{y}\ \ddot{y})\ 2A\ \textbf{2}_1 exp(2i\ddot{y}1T0) + \ddot{y}\ddot{y}2(1\ \ddot{y}\ \ddot{y})\ 3A\ \textbf{3}\ exp(3i\ddot{y}1T0) + [\ddot{y}A2$$

$$\textbf{2} + \ddot{y}2\ 3A\ 2\overline{A2} + 6(1\ \ddot{y}\ \ddot{y})\ 2A1\overline{A1}A2\ exp(i\ddot{y}2T0) + \ddot{y}\ddot{y}1A\ \frac{2}{1}\ exp(2i\ddot{y}2T0)$$

$$+ \ddot{y}2A\ 2 + {}^{3}\ exp(3i\ddot{y}2T0) + \textbf{[2}\ddot{y}1(1\ \ddot{y}\ \ddot{y})A1A2] exp(i(\ddot{y}1 + \ddot{y}2)T0) \quad \textbf{(21)}$$

$$\textbf{2}\ddot{y}1(1\ \ddot{y}\ \ddot{y})A1A2\ exp(i(\ddot{y}1\ \ddot{y}\ \overline{\ddot{y}2})T0) + \textbf{3}\ddot{y}2(1\ \ddot{y}\ \ddot{y})\ 2A\ \textbf{2}\ 1\overline{A2}\ exp(i(2\ddot{y}1 + \ddot{y}2)T0) + \textbf{3}\ddot{y}2(1$$

$$\ddot{y}\ \ddot{y})\ 2A\ \textbf{2}\ 1\overline{A2}\ exp(i(2\ddot{y}1\ \ddot{y}\ \overline{\ddot{y}2})T0) + \textbf{3}\ddot{y}3\ddot{y}2(1\ \ddot{y}\ \ddot{y})A1A\ \textbf{2}\ exp(i(\ddot{y}1\ \ddot{y}\ 2\ddot{y}2)T0) + \ddot{y}\ddot{y}1\ (1\ \ddot{y}\ \ddot{y})\ \textbf{2A1A2}\frac{2}{2}\ exp(i(\ddot{y}1 + 2\ddot{y}2)T0)$$

$$+ A2A2\ \ddot{y}\ iKi + \ddot{y}3\ddot{y}2(1\ \ddot{y}\ \ddot{y})A1A\ \ddot{y}i\ \textbf{f1 2} \quad \frac{A1}{\ddot{y}1}$$

$$+ \frac{}{} exp(i\ddot{y}1T0) + \textbf{cc.},$$

Um die Lösbarkeitsbedingung der Gleichung (21) zu erhalten, wird der Näherungsterm der Anregungsfrequenzen (ÿ1) und der Eigenfrequenz (ÿ1) durch Verwendung des dimensionslosen Verstimmungsparameters ÿ1 wie folgt beschrieben:

$$\ddot{y}1 = \ddot{y}1 + \ddot{y}\ddot{y}1. \quad \textbf{(22)}$$

Indem wir Gleichung (22) in Gleichung (21) einsetzen und den Term streichen, der zu Säkularwerten führt, erhalten wir die spezielle Lösung der ersten Näherung (ÿ11) wie folgt:

$$\ddot{y}11 = \textbf{M1}\ exp(2i\ddot{y}1T0) + \textbf{M2}\ exp(3i\ddot{y}1T0) + \textbf{M3}\ exp(i\ddot{y}2T0) + \textbf{M4}\ exp(2i\ddot{y}2T0)$$
$$+M5\ exp(3i\ddot{y}2T0) + \textbf{M6}\ exp(i(\ddot{y}1 + \ddot{y}2)T0) + \textbf{M7}\ exp(i(\ddot{y}1\ \ddot{y}\ \ddot{y}2)T0)\ , \quad \textbf{(23)}$$
$$+M8\ exp(i(2\ddot{y}1 + \ddot{y}2)T0) + \textbf{M9}\ exp(i(2\ddot{y}1\ \ddot{y}\ \ddot{y}2)T0) + \textbf{M10}\ exp(i(\ddot{y}1 + 2\ddot{y}2)T0)$$
$$\textbf{+M11}\ exp(i(\ddot{y}1\ \ddot{y}\ 2\ddot{y}2)T0) + \textbf{M12} + cc.$$

Hier wird Mi (i = **1, 2, ..., 12)** im Anhang **A dargestellt .**

Wenn wir die Gleichungen (20) und (23) in Gleichung (19b) einsetzen, erhalten wir

Machine Translated by Google

$$D2_0 + \ddot{y}2\ \ 2\ \ddot{y}21 = \ddot{y}2i\ddot{y}1D1\ddot{y}A1 + \ddot{y}4\ 3(1\ \ddot{y}\ \ddot{y})\ 3A\ 2\ \ 1\overline{A1} + 6(1\ \ddot{y}\ \ddot{y})A1A2\overline{A2}$$

$$\ddot{y}\ \text{Kp}\ \ddot{y}\ \text{i Ki}\frac{}{\ddot{y}1} + i\ddot{y}1Kd\ \ddot{y}A1\ exp(i\ddot{y}1T0) + \ddot{y}2\ 2M1 + \ddot{y}3(1\ \ddot{y}\ \ddot{y})\ 2A\ 2\ \ _1\ exp(2i\ddot{y}1T0)$$

$$+ \ddot{y}2\ 2M2 + \ddot{y}4(1\ \ddot{y}\ \ddot{y})\ 3A\ 3_1\ \ exp(3i\ddot{y}1T0) + \ddot{y}2\ 2M3\ \ddot{y}\ 2i\ddot{y}2D1A2$$

$$\ddot{y}\ \text{Kp}\ \ddot{y}\ \text{ich}\frac{}{\ddot{y}2}\text{Ki} + i\ddot{y}2Kd\ A2\ \ddot{y}\ddot{y}4\ 3A + \ \ 2\overline{A2} + 6(1\ \ddot{y}\ \ddot{y})\ 2A1A1\overline{A2}\ exp(i\ddot{y}2T0)\ exp(3i\ddot{y}2T0)$$

$$\ddot{y}2\ 2M4 + \ddot{y}3A\ \ exp(2i\ddot{y}2T0) + \ddot{y}2\ 2M5\ \ddot{y}\ \ddot{y}4A + \ddot{y}2\ \ 2M6\ \ddot{y}\ 2\ddot{y}3(1\ \ddot{y}\ \ddot{y})A1A2\ exp(i(\ddot{y}1 + \ddot{y}2)T0) + \ddot{y}2\ 2M7\ \ddot{y}\ 2\ddot{y}3(1\ \ddot{y}\ \ddot{y}\ )A1A2 \times exp(i(\ddot{y}1\ \ddot{y}\ \ddot{y}2)T0) + \ddot{y}2\ 2M8\ \ddot{y}\ 3\ddot{y}4(1\ \ddot{y}\ \ddot{y})\ 2A\ 2\ \ 1A2\ exp(i(2\ddot{y}1 + \ddot{y}2)T0) + \ddot{y}2$$

$$2M9\ \ddot{y}\ 3\ddot{y}4(1\ \ddot{y}\ \ddot{y})\ 2A\ 2\ \ 1\overline{A2}\ exp(i(2\ddot{y}1\ \ddot{y}\ \ddot{y}2)T0) + \ddot{y}2\ 2M10 + 3\ddot{y}4(1\ \ddot{y}\ \ddot{y})A1A\ \ _2^2$$

$$\times exp(i(\ddot{y}1 + 2\ddot{y}2)T0) + \ddot{y}2\ 2M11 + 3\ddot{y}4(1\ \ddot{y}\ \ddot{y})A1A\ 2\ exp(i(\ddot{y}1\ \ddot{y}\ 2\ddot{y}2)T0)\ \ddot{y}i\ f2 + \ddot{y}2\ 2M12 +$$

$$(1\ \ddot{y}\ \ddot{y})\ 2A1A1 + A2\overline{A2}\ \ddot{y}\ \text{Ki i}\ A2 + \overline{i}\ \ddot{y}A1\ exp(\overline{i\ddot{y}2}T0) + cc.\ \ \frac{}{\ddot{y}2}\ \ \frac{}{\ddot{y}1}\ \ + \frac{\ddot{y}3}{2} \qquad (24)$$

Um die zweite Lösbarkeitsbedingung der Gleichung (24) zu erhalten, wird der Näherungsterm der Anregungsfrequenzen (ÿ2) und der Eigenfrequenz (ÿ2) durch Verwendung des dimensionslosen Verstimmungsparameters ÿ2 wie folgt beschrieben:

$$\ddot{y}2 = \ddot{y}2 + \ddot{y}\ddot{y}2. \qquad (25)$$

Indem wir Gleichung (25) in Gleichung (24) einsetzen und den Term streichen, der zu den Säkulartermen führt, erhalten wir die spezielle Lösung der ersten Näherung (ÿ21) wie folgt:

$$\ddot{y}21 = N1\ exp(i\ddot{y}1T0) + N2\ exp(2i\ddot{y}1T0) + N3\ exp(3i\ddot{y}1T0) + N4\ exp(2i\ddot{y}2T0)$$
$$+N5\ exp(3i\ddot{y}2T0) + N6\ exp(i(\ddot{y}1 + \ddot{y}2)T0) + N7\ exp(i(\ddot{y}1\ \ddot{y}\ \ddot{y}2)T0)\ . \qquad (26)$$
$$+N8\ exp(i(2\ddot{y}1 + \ddot{y}2)T0) + N9\ exp(i(2\ddot{y}1\ \ddot{y}\ \ddot{y}2)T0) + N10\ exp(i(\ddot{y}1 + 2\ddot{y}2)T0)$$
$$+N11\ exp(i(\ddot{y}1\ \ddot{y}\ 2\ddot{y}2)T0) + N12 + cc.$$

Hier wird Ni (i = **1, 2, ..., 12)** im Anhang **A dargestellt .**

Nach Einsetzen der Gleichungen (22) und (25) in die Gleichungen (21) und (24) und Entfernen des Säkularterms erhält man die Bedingungen der Lösbarkeit wie folgt:

$$2i\ddot{y}1D1A1 = \ddot{y}i\ddot{y}1\ddot{y} + \ddot{y}\ddot{y}\ \ddot{y}\ \text{Kp} + \text{i Ki}\ \ \frac{}{\ddot{y}1}\ \ddot{y}\ \text{Kd}\ i\ddot{y}1\ A1 + (\ddot{y}6\ddot{y}2(1\ \ddot{y}\ \ddot{y}))A1A2\overline{A2}$$
$$\ddot{y}\ \ddot{y} + \ddot{y}3\ddot{y}2(1\ \ddot{y}\ \ddot{y})\ \ddot{y}i\ f1\ 2\ \ ^3\ A\ 2\overline{1A1} \qquad \ddot{y}\ \ddot{y}\ , \qquad (27a)$$
$$+ \frac{}{} \ exp(i\ddot{y}1T1)$$

$$2i\ddot{y}2D1A2 = \ddot{y}\ddot{y}\ddot{y}\ \ddot{y}\ \text{Kp} + \text{i Ki}\ \ \frac{}{\ddot{y}2}\ \ddot{y}\ i\ddot{y}2Kd\ A2 + (\ddot{y}3\ddot{y}\ddot{y}2\ \ddot{y}\ 3\ddot{y}4)A\ \ 2\overline{A2}$$
$$+(\ddot{y}6\ddot{y}\ddot{y}2\ \ddot{y}\ 6\ddot{y}4)(1\ \ddot{y}\ \ddot{y})\ 2A1A1\overline{A2} \qquad . \qquad (27b)$$
$$+ \ \frac{\ddot{y}i\ f2}{2}\ exp(i\ddot{y}2T1)$$

Um die Amplituden-Phasen-Gleichungen des geregelten Systems zu erhalten, analysieren wir die Lösung von Gleichung (27), wobei An(T1) **durch die polare Form ersetzt wird als**

$$An = 2^{\ 1}\ \ -an(T1)e\ i\ddot{y}n(T1\ )\ ,\ (n = 1,\ 2). \qquad (28)$$

Die maßgebenden Gleichungen der Amplituden an **und der Phasen** ÿn erhalten wir , **indem wir Gleichung (28) in Gleichung (27) einsetzen und anschließend Real- und Imaginärteil trennen .**

$$\cdot \qquad \ddot{y} \qquad \text{Ki} \qquad \text{Kd} \qquad \ddot{y}f1$$
$$a1 = \ddot{y}\ 2\ddot{y}2\ 2\ 1\ \ \frac{}{}\ +\ \ \frac{}{}\ \ \ \frac{}{2}\ \ a1 + \ \ \frac{}{2\ddot{y}1}\ cos(\ddot{y}1), \qquad (29a)$$

Machine Translated by Google

$$\dot{a1}\ \dot{y}1 = \dot{y}\ 2\dot{y}1\ 2\dot{y}1\ \frac{\ddot{y}\ddot{y}}{} + \frac{Kp}{}\ a1 + \frac{3\dot{y}2(1\ \dot{y}\ \ddot{y})\ 4\ddot{y}1}{}\ a1a\ 2 + \frac{3\dot{y}2(1\ \dot{y}\ \ddot{y})\ 8\ddot{y}1^{3}}{}^{3}_{ein\ 1} + \frac{\ddot{y}f1}{2\ddot{y}1}\ sin(\ddot{y}1), \quad (29b)$$

$$\dot{a2} = \frac{Ki}{2\ddot{y}2}\ \frac{Kd}{2}\ a2 + \frac{\ddot{y}f2}{2\ddot{y}2}\ cos(\ddot{y}2), \quad (30a)$$

$$\dot{a2}\ \dot{y}2 = \frac{\ddot{y}\ddot{y}}{2\ddot{y}2} + \frac{Kp}{2\ddot{y}2}\ a2 + \frac{3\ddot{y}\ddot{y}2+3\ddot{y}4}{8\ddot{y}2}\ \frac{3}{ein\ 2}\ \frac{3\ddot{y}\ddot{y}2+3\ddot{y}4}{4\ddot{y}2}\ (1\ \dot{y}\ \ddot{y})\ ^{2\ 2\ ein}\ 1\ a2 + \frac{\ddot{y}f2}{2\ddot{y}2}\ Sünde(\ddot{y}2) \quad (30b)$$

Wo

$$\dot{y}1 = \ddot{y}1T1\ \dot{y}\ \dot{y}1,\ \dot{y}2 = \ddot{y}2T1\ \dot{y}\ \dot{y}2. \quad (31)$$

Die Fixpunkte in den Gleichungen (29)–(30) entsprechen den stationären Lösungen des Systems, die wiederum an = **0 und** ẏn = **0 entsprechen.**

Aus Gleichung (31) folgt, dass ẏ1 = **ẏ1 und als Folge davon** an = **0 und** ẏ2 = **ẏ2.**

ẏn = **0; die Frequenzganggleichungen (FRE) für den praktischen Fall** (a1 ẏ= **0, a2** ẏ= **0) ergeben sich wie folgt:**

$$0 = \dot{y} + 2\ddot{y}2\ 2\ 1\ \frac{\ddot{y}}{}\ \frac{Ki}{}\ \frac{Kd}{2}\ a1 + \frac{\ddot{y}f1}{2\ddot{y}1}\ cos(\ddot{y}1), \quad (32a)$$

$$a1\ddot{y}1 = \dot{y}\ 2\ddot{y}1\ 2\ddot{y}1\frac{\ddot{y}\ddot{y}}{} + \frac{Kp}{}\ a1 + \frac{3\dot{y}2(1\ \dot{y}\ \ddot{y})\ 4\ddot{y}1}{}\ a1a\ 2 + \frac{3\dot{y}2(1\ \dot{y}\ \ddot{y})\ 8\ddot{y}1^{3}}{}^{3}_{ein\ 1} + \frac{\ddot{y}f1}{2\ddot{y}1}\ sin(\ddot{y}1), \quad (32b)$$

$$0 = \frac{Ki}{2\ddot{y}2}\ \frac{Kd}{2}\ a2 + \frac{\ddot{y}f2}{2\ddot{y}2}\ cos(\ddot{y}2), \quad (33a)$$

$$a2\ddot{y}2 = \frac{\ddot{y}\ddot{y}}{2\ddot{y}2} + \frac{Kp}{2\ddot{y}2}\ a2 + \frac{3\ddot{y}\ddot{y}2+3\ddot{y}4}{8\ddot{y}2}\ \frac{3}{ein\ 2}\ \frac{3\ddot{y}\ddot{y}2+3\ddot{y}4}{4\ddot{y}2}\ (1\ \dot{y}\ \ddot{y})\ ^{2\ 2\ ein}\ 1\ a2 + \frac{\ddot{y}f2}{2\ddot{y}2}\ Sünde(\ddot{y}2). \quad (33b)$$

3.2. Stabilitätsanalyse durch Linearisierung des obigen

Systems **Um die Stabilität der gegebenen Fixpunkt-nichtlinearen Lösung zu untersuchen, lassen Sie**

$$am = am0 + \mathbf{am1},\ \ddot{y}m = \ddot{y}m0 + \ddot{y}m1 \quad (34)$$

wobei am1 **und** ẏm1 Störungen sind, die im Vergleich zu am0 **und** ẏm0 **als winzig angesehen werden . Hier** sind am0 **und** ẏm0 **die Lösungen der Gleichungen (29) und (30). Gleichung (34) wird in die Gleichungen (29) und (30) mit Gleichung (31) eingesetzt, wobei nur die linearen Terme in** am1 **und ẏm1 erhalten bleiben. Daher hat das linearisierte System der Gleichungen (29) und (30) die Formen**

$$\dot{a11} = \dot{y}\ 2\ddot{y}2\ \frac{\ddot{y}}{2} + \frac{Ki}{1}\ \frac{Kd}{2}\ a11 + \frac{f1}{sin(\ddot{y}10)}\ \dot{y}11,\ 2\ddot{y}1 \quad (35a)$$

$$\dot{y}11 = \frac{\ddot{y}1}{a10} + \frac{\ddot{y}\ddot{y}}{2a10\ddot{y}1}\ \frac{Kp}{2a10\ddot{y}1} + \dot{y}\ \frac{3\dot{y}2(1\ddot{y}\ddot{y})}{4a10\ddot{y}1}\ \dot{y}\ a\ 20\ 8\ddot{y}1\ \frac{9\dot{y}2(1\ddot{y}\ddot{y})\ 2 + }{}^{3}\ a10\ a11 + \frac{f1}{2a10\ddot{y}1}\ cos(\ddot{y}10)\ \dot{y}11 + \dot{y}\ 2\ddot{y}1\ \frac{3\dot{y}2(1\ddot{y}\ddot{y})}{}\ a20\ a21, \quad (35b)$$

$$\dot{a21} = \frac{Ki}{2\ddot{y}2}\ \frac{Kd}{2}\ a21 + \frac{f2}{sin(\ddot{y}20)}\ \dot{y}21,\ 2\ddot{y}2 \quad (36a)$$

Machine Translated by Google

$$\dot{y}21 = \dot{y}\,2\dot{y}2\,\frac{3\ddot{y}\dot{y}2+3\dot{y}4}{9\ddot{y}\dot{y}2+9\dot{y}4}\,(1\,\ddot{y}\,\dot{y})\,a10\,a11 + \frac{\dot{y}2}{a20}\,\frac{\ddot{y}\dot{y}}{2a20\dot{y}2}\,\frac{Kp}{2a20\dot{y}2} \cdot \frac{8\dot{y}2}{a20\,\dot{y}}\,\frac{3\ddot{y}\dot{y}2+3\dot{y}4}{4a20\dot{y}2}\,(1\,\ddot{y}\,\dot{y})\,a10\,a21 + \frac{f2}{2\dot{y}2a20}\,cos(\dot{y}20)\,\dot{y}21 \quad (36b)$$

Die obigen Gleichungen (35) und (36) können als folgende Matrix beschrieben werden:

$$\begin{matrix} a11 & \dot{y}11 & a21 \\ \cdot & \cdot & \cdot \end{matrix} \cdot \dot{y}21T = [J]\,a11\,\dot{y}11\,a21\,\dot{y}21T \cdot \quad (37)$$

Hier wird [J] **durch die entsprechenden Teile der Gleichungen (35) und (36) dargestellt.**
Die mit der folgenden Gleichung ermittelten Eigenwerte von [J] **lauten wie folgt:**

$$\dot{y}^4 + \dot{y}1\,\dot{y}^3 + \dot{y}2\,\dot{y}^2 + \dot{y}3\dot{y} + \dot{y}4 = 0{,}100 \quad (38)$$

Die Koeffizienten der Gleichung (38) werden als ym bezeichnet (m = **1, 2, . . . ,** 4). **Die Lösungen des Systems mit PID-Regelung sind stabil, wenn die Realteile von** *ẏ* der Wurzeln **negative Werte haben; wenn nicht, sind sie instabil. Es ist eine notwendige und hinreichende Voraussetzung für eine stationäre Lösung Routh-Hurwitz-Kriterium zu verwenden, das besagt, dass alle Wurzeln der Gleichung (38) negative Realteile haben müssen, genau dann, wenn alle Hauptminorwerte und die folgende Determinante** D **positiv sind.**

$$D = \begin{matrix} \dot{y}1 & 1 & 0 & 0 \\ \dot{y}3 & \dot{y}2 & \dot{y}1 & 1 \\ 0 & \dot{y}4 & \dot{y}3 & \dot{y}2 \\ 0 & 0 & 0 & \dot{y}4 \end{matrix} \cdot \quad (39)$$

4. Ergebnisse und Diskussion

4.1. Zeitverlauf des unkontrollierten Verhaltens **(2; 0,5 ; 0,3 Zur Analyse des Verhaltens des dynamischen 0,2; 0,3; 10; 2 ; 2 ;**) **Systems wird der Runge-Kutta- Algorithmus** vierter Ordnung **(ode45 in MATLAB)** [30] angewendet, um die numerische Lösung des gegebenen **unkontrollierten Systems der Gleichungen (8) und (9) zu finden .**

Das zeitliche Verhalten des Systems ohne Regler bei der Primärresonanz (ÿ1 ÿ= **ÿ1, ÿ2** ÿ= **ÿ2) ist in Abbildung** 3 **bei den gewählten Werten** *(ÿ1* = **3;** *ÿ* = **0,2; ÿ2** = **2;** *ÿ* = **0,5ÿ2 2 ; ÿ1** = **0,2; ÿ2** = **0,3; f1** = **10; ÿ3** = **2ÿ1; ÿ4** = **2ÿ2; f2** = **5; ÿ1** = **ÿ1; ÿ2** = ÿ2) dargestellt.

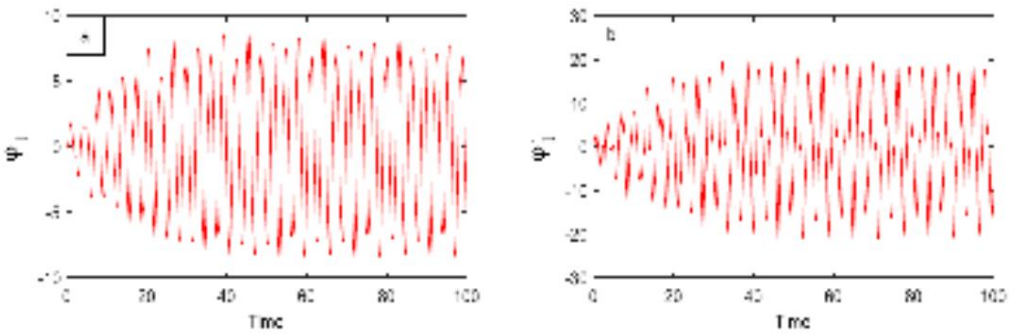


Abbildung 3. Das Zeitdiagramm ohne Regler (a) der erste Teil des Systems, ÿ1 (b) die Reaktion seiner Geschwindigkeit, ẏ1 .

Abbildung 3a,b zeigt die stationäre Zeitantwort gegenüber der Amplitude ÿ1 für das unkontrollierte erste System bzw. die Geschwindigkeit ÿ1 . In ähnlicher Weise zeigt Abbildung 4a,b das unkontrollierte zweite Hauptsystem und seine Amplitude ÿ2 und Geschwindigkeit ÿ2 mit der Zeitantwort .



Machine Translated by Google

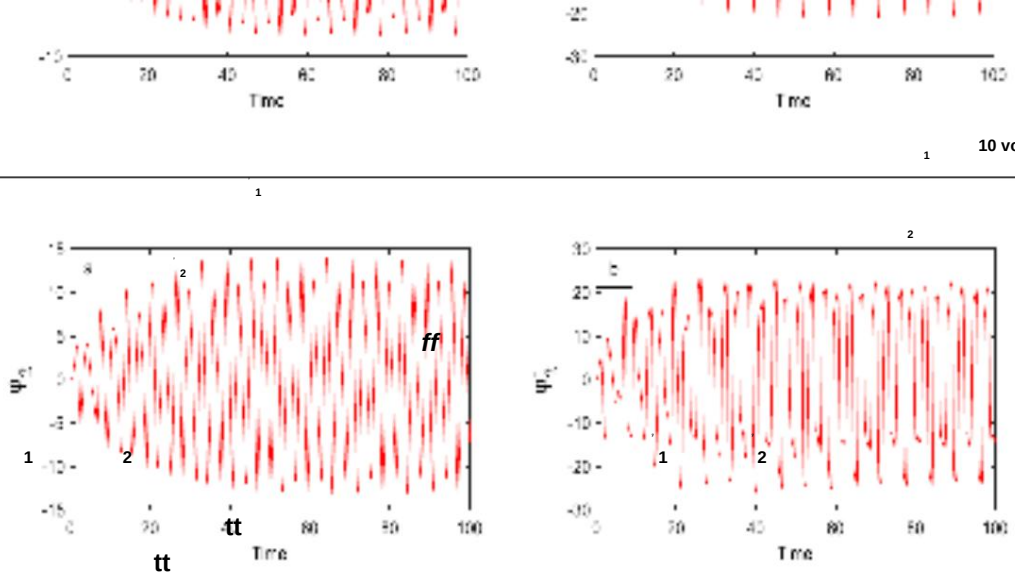


Abbildung 4. Das Zeitdiagramm ohne Regler (a) der zweite Teil des Systems, ÿ2 (b) Reaktion seiner Geschwindigkeit, ÿ2 .

4.2. Zeitverlaufsleistung mit unterschiedlicher Steuerung **Die**

Regelkreisleistungen der P-, PI- und PID-Regler für die beiden Systeme ÿ1 und ÿ2 zusammen mit ihren entsprechenden Geschwindigkeiten ÿ1 und sind in Abbildung 5 dargestellt. Die Regelkreisantworten der herkömmlichen P- und PI-Regler sind instabil und weisen Spitzenüberschwingen auf . Eine bessere Regelkreisleistung, wie z. B. Antworten mit weniger Spitzenüberschwingen und Einschwingzeit, wurde durch die neu gestaltete PID-Reglerstruktur erreicht, die Regelkreisantworten mit weniger Spitzen und Überschwingen und einer stabileren Kurve als die anderen liefert.

Die Studie bezog sich auf das erste Hauptsystem und seine Geschwindigkeit, wie in Abbildung 5a,b, und das zweite Hauptsystem, das in Abbildung 5c,d dargestellt ist. Abbildung 5 zeigt Hinweise auf sowohl gleichmäßiges Verhalten als auch das Fehlen von Chaos in den erzeugten Wellenlängen und Amplituden in jedem Abschnitt. Wir nutzten die in Tabelle 1 **dargestellten Verstärkungswerte,** um diese geschlossenen Schleifen mithilfe der **drei Steuerungsansätze zu erhalten .**

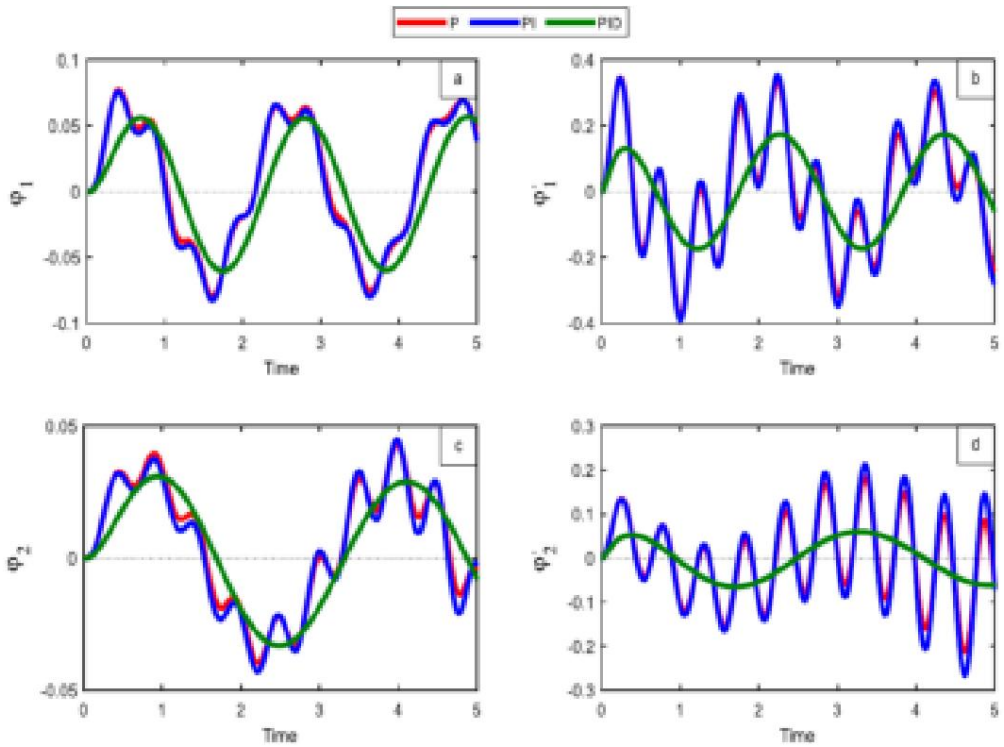


Abbildung 5. Reaktionen im geschlossenen Regelkreis mit P-, PI- und PID-Regler. (a) der erste Teil des Systems ÿ1,(b) die Reaktion seiner Geschwindigkeit ÿ1 (c) der zweite Teil des Systems ÿ2 (d) die Reaktion seiner Geschwindigkeit ÿ

Machine Translated by Google

Tabelle 1. Parameter eines PID-Reglers.

Regler		Gewinnen		
		KP	Ki	Kd
P	**(Rot)**	**150**	**-**	**-**
PI	**(Blau)**	**150**	**20**	**-**
PID	**(Grün)**	**150**	**20**	**20**

In Abbildung 6a,b ist die abnehmende Amplitude des ersten Hauptsystems dargestellt von 7,788 auf 0,0569 nach Einsatz eines zeitgesteuerten PID-Reglers. Dies deutet darauf hin, dass die Die Wirksamkeit des Reglers (Ea = Amplitude ohne Regelung/Amplitude mit Regelung) war gleich auf 136,87 für das erste Hauptsystem ÿ1, mit einer proportionalen Reduktion von 99,27%. Ebenso die Amplitude ÿ2 des zweiten Systems, die 13,59 beträgt, wie in Abbildung 7 dargestellt, sank auf 0,02886, wobei Ea = 470,89, was einer proportionalen Verringerung von 99,79 % entspricht.

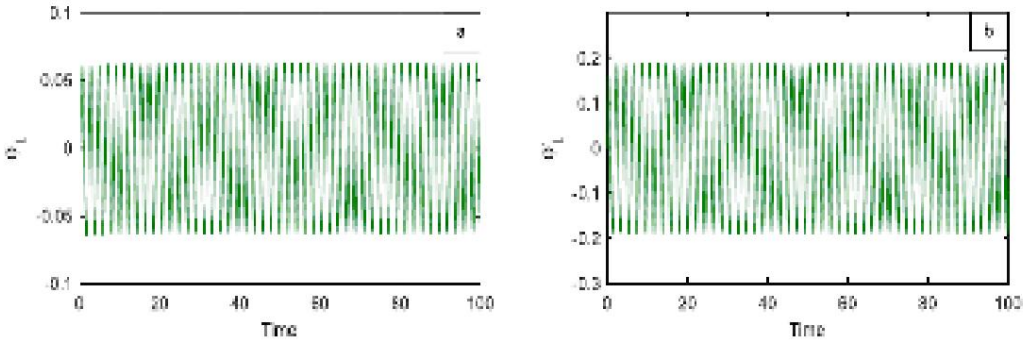


Abbildung 6. Das Zeitdiagramm in der primären Resonanzsituation mit dem PID-Regler (a) der erste Teil des Systems ÿ1 (b) die Reaktion seiner Geschwindigkeit ÿ1 .

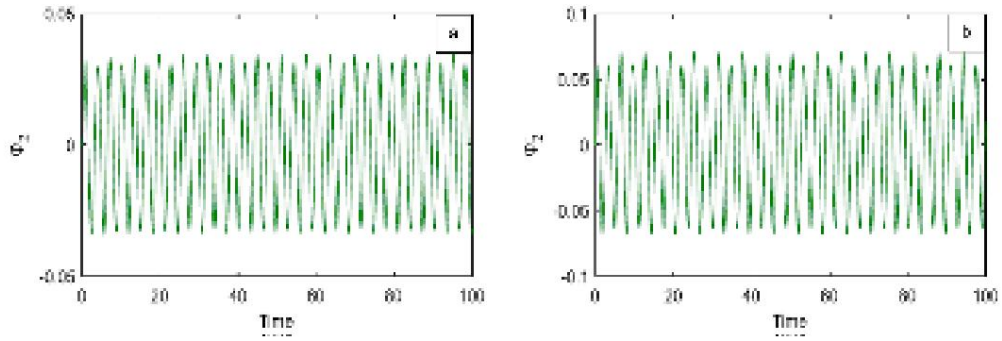


Abbildung 7. Das Zeitdiagramm in der primären Resonanzsituation mit dem PID-Regler (a) der zweite Teil des Systems ÿ2 (b) die Reaktion seiner Geschwindigkeit ÿ2 .

Abbildung 8 zeigt die Phasenebene beider Hauptsysteme vor und nach dem Hinzufügen der PID-Regler. Abbildung 8a zeigt, dass das erste Hauptsystem ÿ1 mit einem Multi-Limit-Zyklus im Fall, bei dem keine Steuerung hinzugefügt wird, und wie bei einem begrenzten Zyklus nach dem Hinzufügen von PID verbessert. Mit dem zweites Hauptsystem ÿ2, wie in Abbildung 8b vor dem Hinzufügen der Steuerung dargestellt, ist die Phasenebene der Multi-Limit-Zyklus, der nach dem Hinzufügen von PID abnahm.

Machine Translated by Google

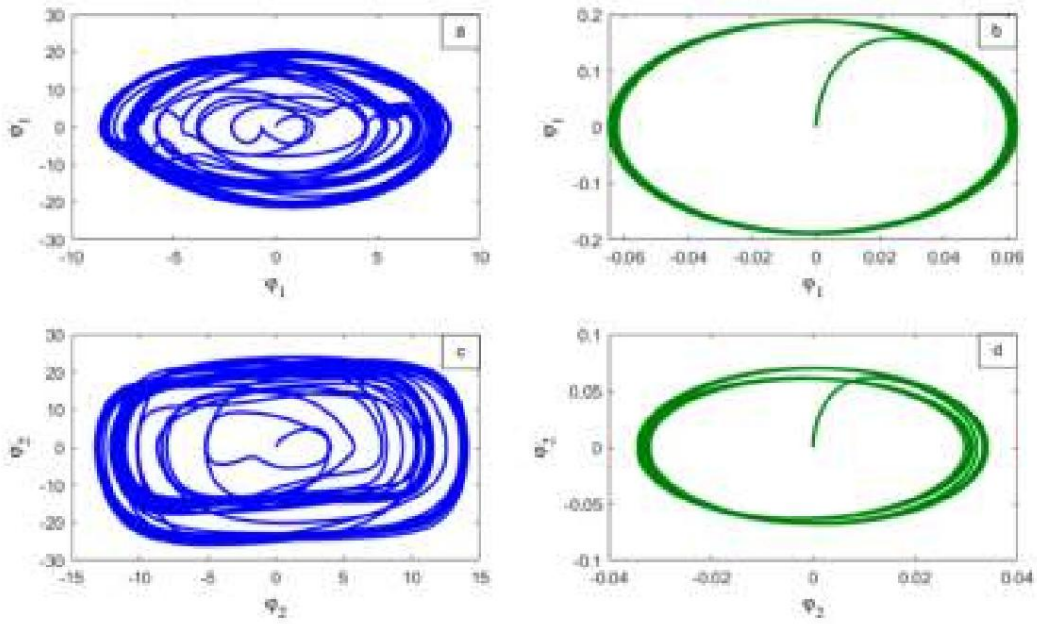


Abbildung 8. Die Phasenebene des Systems (a) ÿ1 mit Winkelgeschwindigkeiten ẏ1 in der primären Resonanzsituation ohne Steuerung (b) ÿ1 mit ẏ1 in der primären Resonanzsituation mit ÿ2 in Winkelgeschwindigkeiten der PID-Regler (c) ÿ2 mit Winkelgeschwindigkeiten ẏ2 in der primären Resonanzsituation ohne Regelung (d) ÿ2 mit Winkelgeschwindigkeiten ẏ2 in der primären Resonanzsituation mit dem PID-Regler.

4.3. Frequenzgangkurven (FRC)

Die Frequenzgangkurven der Gleichungen (32) und (33) des ersten Hauptsystems a1 gegenüber dem Verstimmungsparameter ÿ1 sind in Abbildung **9a ohne Einfluss eines** Reglers **dargestellt , wobei die durchgezogene schwarze Linie die stabile Lösung darstellt, während die rote Linie die instabile Lösung derselben Gleichung anzeigt. Die Amplitude des ersten Hauptsystems wird nach Hinzufügen des P-Reglers vollständig reduziert; wie Abbildung 9b zeigt, ist dieser abfallende Teil der Kurve jedoch instabil. Die Reaktionskurve in Abbildung 9c zeigt, was passiert , wenn ein PI-Regler hinzugefügt wird. Es zeigt sich, dass dies die Amplitude des Primärsystems a1 vollständig reduziert, die Kurve jedoch absolut instabil ist. Nach Hinzufügen eines PID-Reglers ist das Verhalten des ersten Hauptsystems in Abbildung 9d dargestellt, wo festgestellt wird, dass die Kurve eine monoton abnehmende Amplitude aufweist und vollständig stabil ist. Die Reaktionskurven des zweiten Hauptsystems a2 gegenüber dem Verstimmungsparameter ÿ2 sind in Abbildung 10a ohne Einfluss eines Reglers dargestellt. Die Amplitude des zweiten Hauptsystems wird nach Hinzufügen des P-Reglers vollständig reduziert; wie Abbildung 10b zeigt, ist dieser abfallende Teil der Kurve jedoch instabil. Die Reaktionskurve in Abbildung 10c zeigt, was passiert, wenn ein PI-Regler hinzugefügt wird. Es zeigt sich, dass dieser Regler die Amplitude des zweiten Systems a2 reduziert, die Kurve sich jedoch instabil verhält. Nach Hinzufügen eines PID-Reglers ist das Verhalten des zweiten Hauptsystems in Abbildung 10d dargestellt, wo festgestellt wird, dass die Kurve eine monoton abnehmende Amplitude aufweist und vollständig stabil ist. Abbildung 11 veranschaulicht deutlich den Unterschied in den Reaktionen der Kurven vor und nach Hinzufügen des PID-Reglers für die beiden primären Systeme a1 und a2. Abbildung 11a,b zeigt, wie das System nur stabil ist und keine instabilen Teile enthält, und wie das Hinzufügen eines PID-Reglers dazu führt, dass die Amplitude bei a1** abfällt **und bei a2 verschwindet . Die Amplitude stieg bei steigenden Werten der äußeren Kraft f1 für das erste Hauptsystem a1, wie Abbildung 12a mit der ersten Komponente des Systems, a1, zeigt. Die Amplitude des ersten Hauptsystems wird nach rechts verschoben und zeigt eine monoton abnehmende Kurve, wenn die Werte der Eigenfrequenz ÿ1 steigen, wie in Abbildung 12b zu sehen ist. Die Amplitude nimmt monoton ab, wenn die Werte des Dämpfungskoe**

Machine Translated by Google

verhält sich sowohl bei positiven als auch bei negativen Parameterwerten. Bei sehr kleinen negativen Werten von ÿ2 biegt die Kurve nach links, bei hohen positiven Werten von ÿ2 jedoch **nach rechts. Die Amplitude des zweiten Hauptsystems steigt bei großen Werten der äußeren Kraft f2, wie in Abbildung 13a gezeigt, mit dem zweiten Teil des Systems, a2, an. Wie in Abbildung 13b zu sehen ist, wird die Amplitude des zweiten Hauptsystems nach rechts verschoben und weist bei erhöhten Werten der Eigenfrequenz ÿ2 eine monoton abfallende Kurve auf. Wie in Abbildung 13c zu sehen ist, bleibt die Amplitude konstant und verschiebt sich bei außerordentlich hohen positiven Werten des nichtlinearen Parameters ÿ4** nach rechts und bei außerordentlich niedrigen negativen Werten von **ÿ4 nach links . Die Reaktion der Verstärkungen auf die Amplitude wird in Abbildung 14** untersucht. **Abbildung 14a legt die Werte von** Ki **und** Kd fest . **Bei der weiteren Untersuchung des Einflusses von** Kp **stellten wir fest, dass bei** steig Bei unterschiedlichen Ki **-Werten haben wir beobachtet, dass die Amplitude beider Hauptsysteme bei den festen Werten von** Kp **und** Kd ununterscheidbar zunimmt . **Bei** Ki = **80 verhielten sich jedoch beide Hauptsysteme instabil, wie in Abbildung 14b gezeigt. Obwohl die anderen beiden Verstärkungen fest sind, zeigt Abbildung 14c die Verbesserung von** Kd . **Durch das Malen wurde deutlich, dass** die Amplitude bei den anfänglichen Kd- Werten **instabil ist und dass in beiden Systemen die Amplitude** mit zunehmendem Kd **abnimmt .**

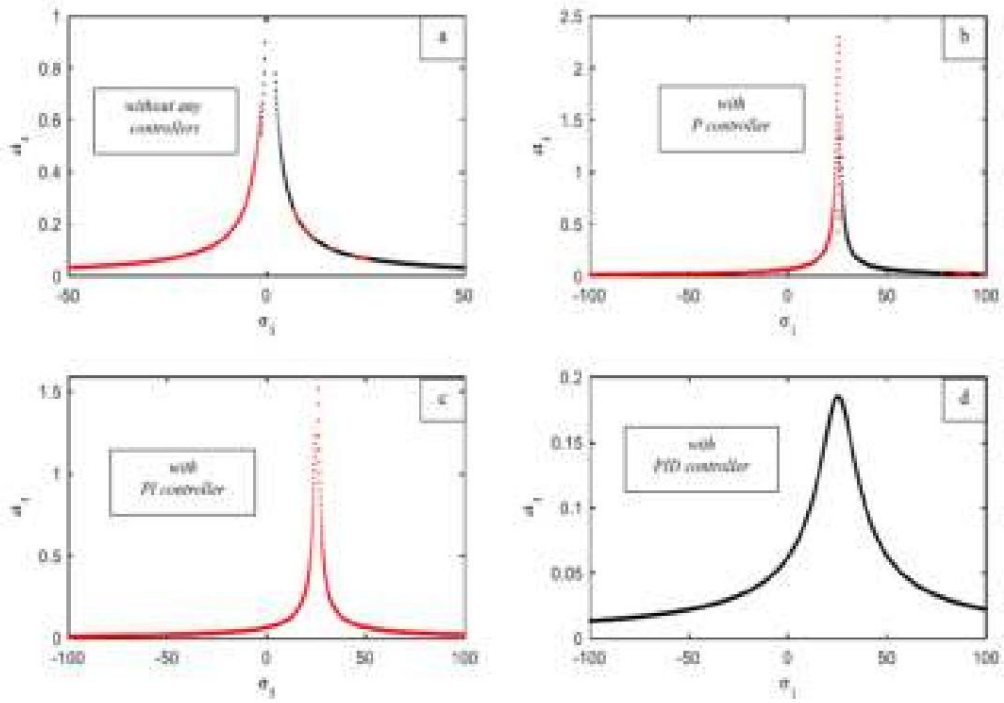


Abbildung 9. Die Frequenzgangkurven auf der Ebene ÿ1 und dem ersten Teil des Systems (a1) **(a) ohne Regler, (b) mit P-Regler, (c) mit PI-Regler und (d) mit PID-Regler. (rote Farbe) instabiler Bereich (schwarze Farbe) stabiler Bereich**

Machine Translated by Google

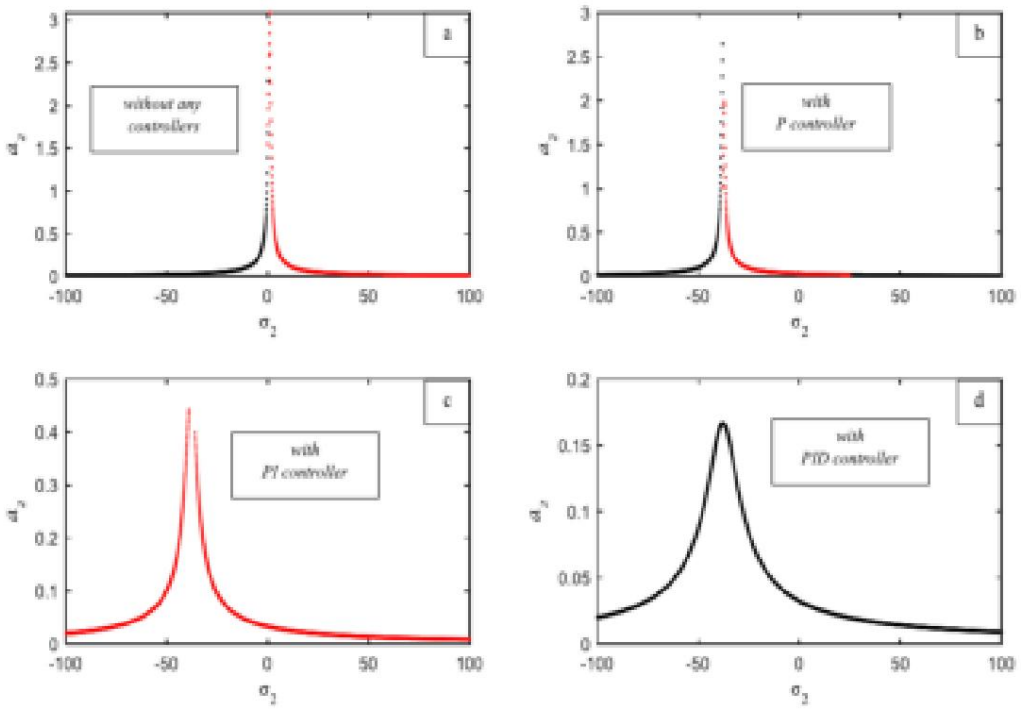


Abbildung 10. Die Frequenzgangkurven in der Ebene ÿ2 und im ersten Teil des Systems (a2) (a) ohne Regler, (b) mit P-Regler, (c) mit PI-Regler und (d) mit PID-Regler. (rote Farbe) instabiler Bereich (schwarze Farbe) stabiler Bereich.

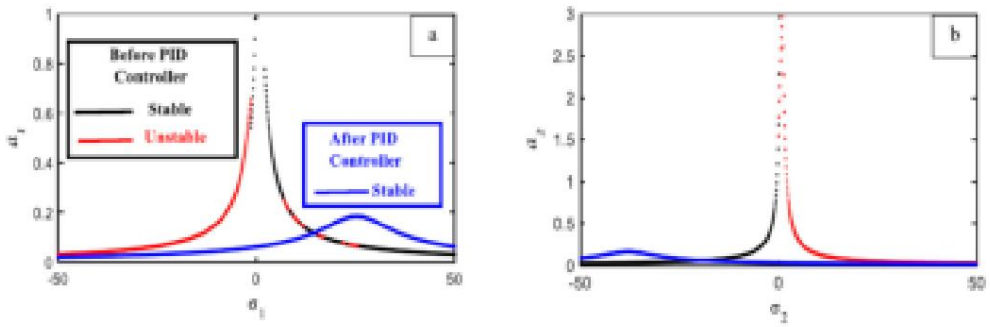


Abbildung 11. Frequenzgang vor und nach PID: (a) erstes Hauptsystem a1 und (b) erstes Hauptsystem a2.

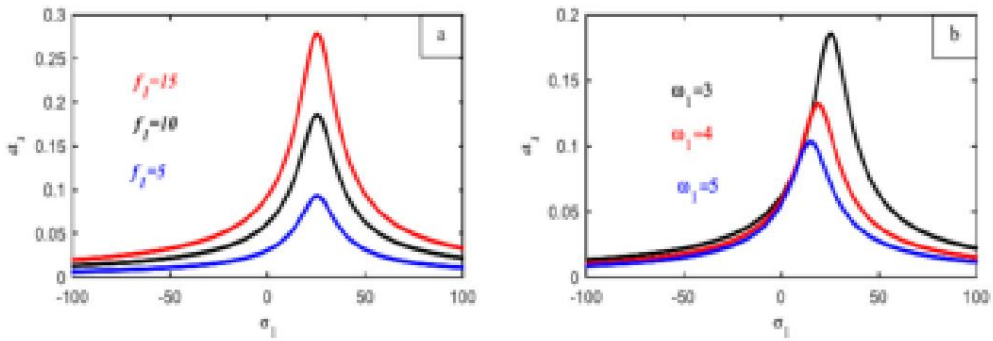


Abbildung 12. Fortsetzung

Machine Translated by Google

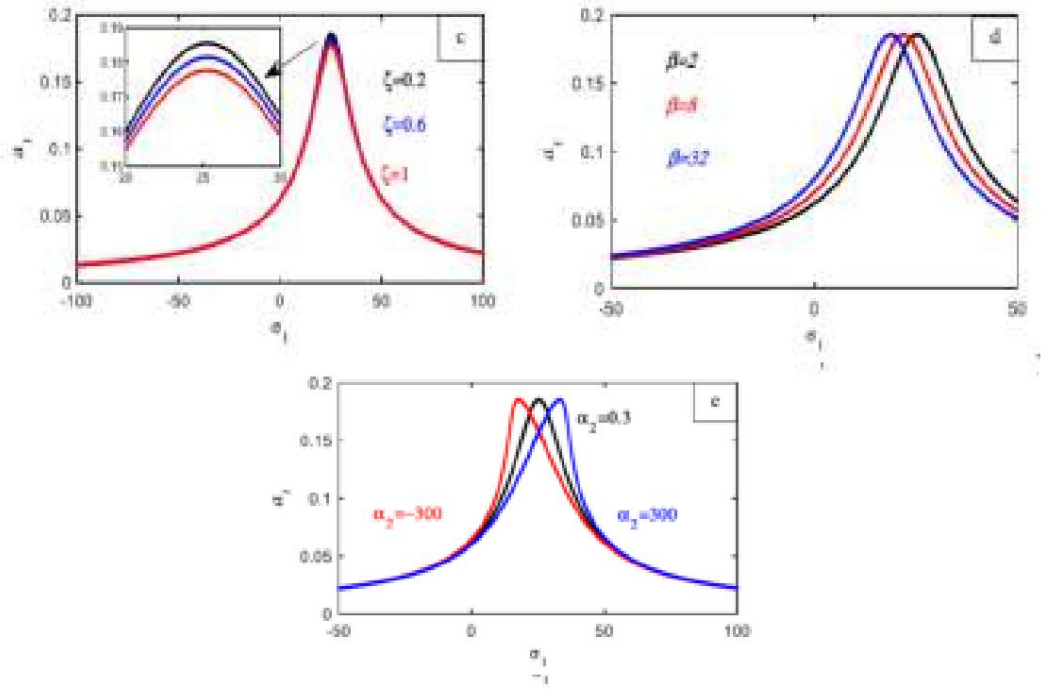


Abbildung 12. (a) Die FRC der äußeren Krafteinwirkung f1 . (b) Eigenfrequenz ÿ1 . (c) Dämpfung
-Koeffizient ÿ. (d) Linearer Parameter ÿ. (e) Nichtlinearer Parameter ÿ2. Alle diese beziehen sich auf den ersten Teil von das System a1 .

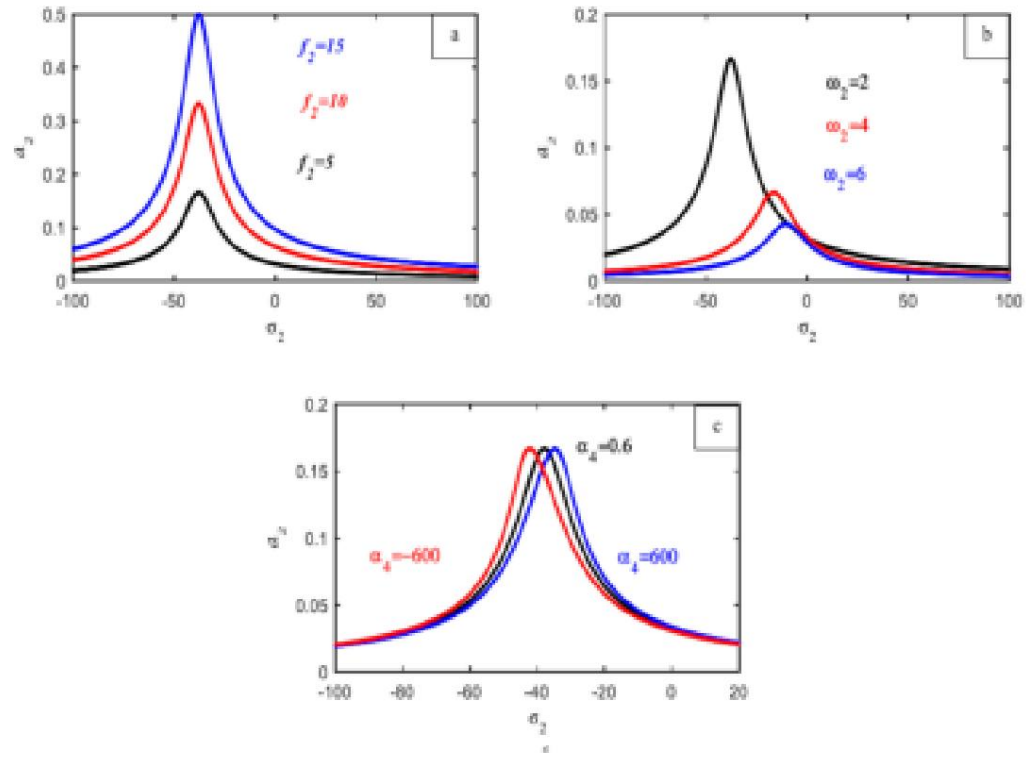


Abbildung 13. (a) Die FRC der äußeren Krafteinwirkung f2. (b) Eigenfrequenz ÿ2. (c) Nichtlinear Parameter ÿ4 . Alle diese Punkte betreffen den zweiten Teil des Systems a2.

Machine Translated by Google

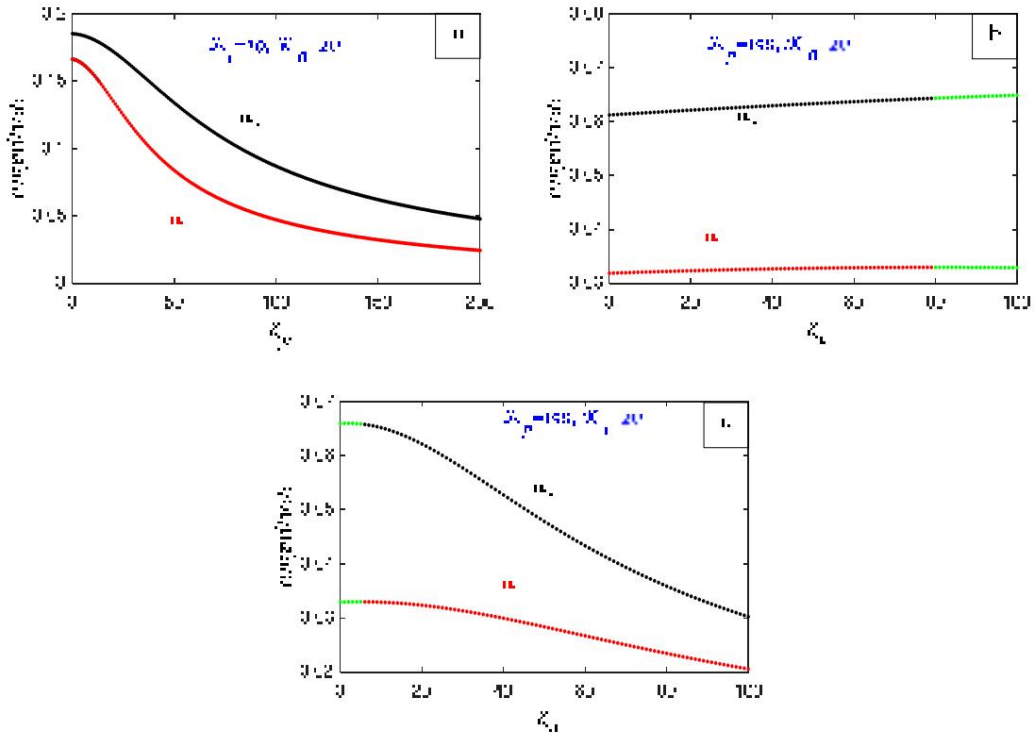


Abbildung 14. Antwortkurve für die Systemamplituden mit (a) Kp (b) Ki **(c)** Kd .

P

5. Vergleich

5.1. Vergleich der Lösungen für die zeitliche Antwort der Störung mit numerischen Techniken

Analytische Lösungen der Gleichungen (29) und (30) werden grafisch durch (---) Linien dargestellt, die den numerischen Lösungen der Gleichungen (13) und (14) entsprechen, wie in **Abbildung 15a für das erste Hauptsystem und in Abbildung 15b für das zweite Hauptsystem dargeste**

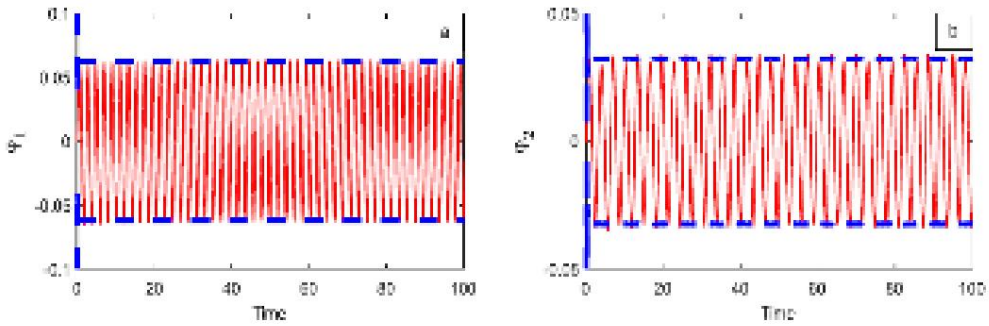
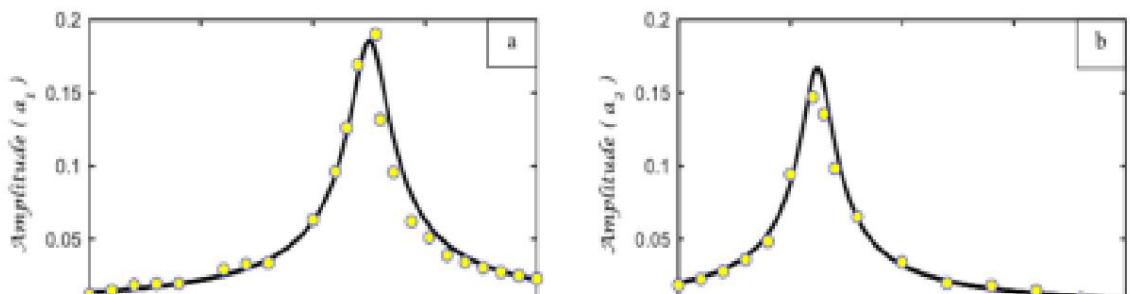


Abbildung 15. Vergleich der numerischen Simulation und der Störungsanalyse für beide Rahmenmodi in PID-Reglern. (a) der erste Teil des Systems ÿ1 (b) der zweite Teil des Systems ÿ2

1 2

5.2. Vergleich zwischen RK-4 und FRC

Abbildung 16 zeigt eine akzeptable Übereinstimmung mit den numerischen Lösungen der Gleichungen (4) und (5) unter Verwendung von (RK-4), hervorgehoben durch gelbe Kreise, und den Frequenzgangkurven (FRC) für die beiden Hauptsysteme a1 in Abbildung 16a und a2 in Abbildung 16b, die mit **der durchgezogenen Linie dargestellt sind .**



Machine Translated by Google

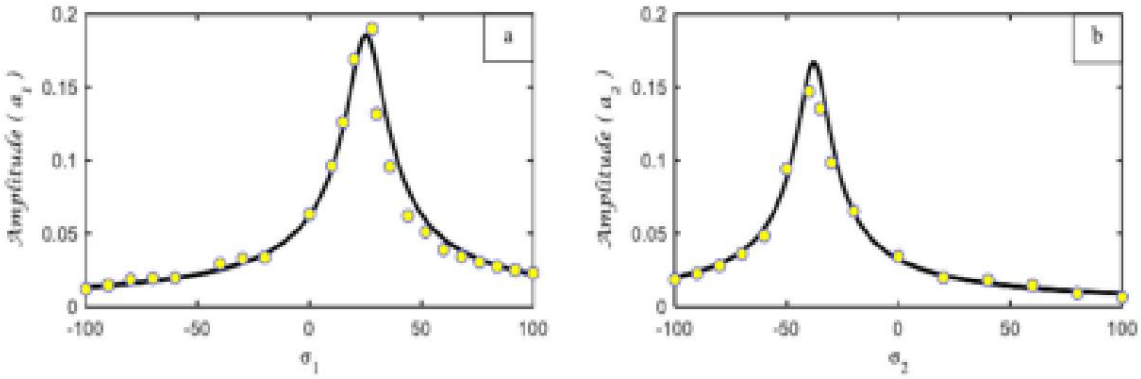


Abbildung 16. Kontrast zwischen der FRC-Lösung und der RK-4-Lösung für beide Systeme (a) der erste Teil des Systems a1 (b) der zweite Teil des Systems a2.

5.3. Vergleich mit veröffentlichten Arbeiten

Zu früheren Arbeiten kann Folgendes festgestellt werden:

(1) In einer Literaturübersicht [25] wurde die Torsionsschwingung **auf aktive und passive Regelung untersucht. Diese Regelung stellt ein nützliches Mittel zur Beherrschung der Torsionsschwingung eines nichtlinearen dynamischen Systems dar, das mehreren parametrischen Anregungen ausgesetzt ist.**

(2) Sie benutzen die Frequenzganggleichungen; die Stabilität des Systems wird in der Nähe der gleichzeitig auftretenden subharmonischen und inneren Resonanzen untersucht.

(3) Das Verhalten des Systems mit und ohne zwei Regler wird numerisch integriert und untersucht.

Für diese Arbeit verglichen wir nach dem Hinzufügen von Kontrollen die Zeitverläufe unserer Arbeit und einer früheren Studie und stellten fest, dass die Amplituden und Wellenlängen zeigten, dass die generierten Lösungen ein stabiles Verhalten zeigten und frei von Chaos waren.

6. Schlussfolgerungen

In diesem Artikel **wurde die Torsionsschwingungsregelung eines nichtlinearen dynamischen Systems behandelt . Zur Regelung der schädlichen Torsionsschwingungen des Systems wurden PID-Regler (Proportional-Integral-Differential) vorgeschlagen ,** wie in Abbildung **2 für einen der schlimmsten Resonanzfälle dargestellt. Der mehrskalige Störungsansatz wird angewendet, um die Näherungslösung für das gekoppelte Regelsystem zu erhalten. Der Zeitverlauf wird aufgezeichnet, um die stationären Schwingungsamplituden und die Wirksamkeit der angewendeten Regelalgorithmen bei der Unterdrückung von Schwingungen zu untersuchen. Darüber hinaus werden die Stabilität und die Auswirkungen verschiedener System- und Regelparameter in Frequenzgangkurven gemäß dem Routh-Hurwitz-Kriterium dargestellt. Basierend auf der obigen Diskussion können die folgenden Schlussfolgerungen gezogen werden:**

(1) Es wird darauf hingewiesen, dass der PID-Regler dazu dient, die gefährlichen Schwingungen in einem kurze Zeit.

(2) Diese Arbeit lieferte einen Vergleich zwischen P-, PI- und PID-Reglern im Rahmen von FRCs.

(3) Die Auswirkungen zahlreicher Koeffizienten werden untersucht und numerisch dargestellt.

(4) Unabhängig von der Erregerfrequenz ist der PID-Regler der wirksamste Regler Verfahren zur Minimierung der Schwingungen im Fachwerk.

(5) Die Reaktion des geschlossenen Regelkreises auf die relative Verschiebung wird mit dem PID-Regler ermittelt, der das Spitzen-Überschwingen berücksichtigt.

(6) Die modifizierte Struktur des PID-Reglers, wie sie auch bei den P- und PI-Reglern zum Einsatz kommt, wird zur Regelung der relativen Verschiebung des Federungssystems verwendet. Die Ergebnisse zeigen, dass der PID-Regler eine bessere Regelkreisleistung hinsichtlich der minimierten Spitzenüberschreitung und Einschwingzeit bietet.

Machine Translated by Google

Beiträge der Autoren: KA: Ressourcen; Methodik; formale Analyse; Validierung; Visualisierung; Schreiben – Originalentwurf; Schreiben – Überprüfung und Bearbeitung (gleich); Mittelbeschaffung. ATE-S.: Konzeptualisierung ; Untersuchung; Methodik; Datenkuratierung; Validierung; Schreiben – Originalentwurf; Schreiben – Überprüfung und Bearbeitung. FTE-B.: formale Analyse; Validierung; Untersuchung; Methodik; Datenkuratierung; Konzeptualisierung; Schreiben – Originalentwurf; Schreiben – Überprüfung und Bearbeitung. Alle Autoren haben die veröffentlichte Version des Manuskripts gelesen und ihr zugestimmt.

Finanzierung: Diese Forschung wurde vom Researchers Supporting Project, Zuschussnummer (RSPD2024R 588), King Saud University, Riad, Saudi-Arabien, finanziert.

Datenverfügbarkeitserklärung: Alle während dieser Studie generierten oder analysierten Daten sind in diesem veröffentlichten Artikel enthalten.

Danksagungen: Die Autoren möchten dem Researchers Supporting Project, Zuschussnummer (RSPD2024R588), King Saud University, Riad, Saudi-Arabien, ihren Dank aussprechen.

Interessenkonflikte: Die Autoren haben keine Interessenkonflikte offengelegt.

Nomenklatur

I1 , I2	**Polares Massenmoment des nichtlinearen dynamischen Systems**
k1 ,	**Lineare Federsteifigkeit des nichtlinearen dynamischen Systems**
k2 k21, k22, k23	**Quadratische und kubische Steifigkeitsteile**
F_1, F_2	**Erregerkräfte**
c1	**Lineare Dämpfungskoeffizienten des nichtlinearen dynamischen Systems**
ÿ1 , ÿ2	**Eigenfrequenzen** *ÿ*
	Dämpfungskoeffizient
ÿ	**Linearer Parameter**
ÿi(i = **1, 2, 3,** 4)	**Nichtlinearer Parameter**
FC1 , FC2	**Zwangssteuerung**
Kp	**Proportionale Verstärkung**
Kd	**Ableitungsgewinn**
Ki	**Integralverstärkung**
ÿ0	**Referenzwinkel**

Anhang A

M1 = $\frac{\ddot{y}1(1\ddot{y}\ddot{y})\ 2A_1}{2\ 3\ddot{y}2}$, **M2** = $\frac{\ddot{y}2(1\ddot{y}\ddot{y})\ 3A_1}{3\ 8\ddot{y}2}$, **M3** = $\frac{\ddot{y}A2+\ddot{y}2(3A\ 2\ \ddot{y}2\overline{2A2+6(1\ddot{y}\ddot{y})\ 2A1A1A2)}}{1\ddot{y}\ddot{y}2\ 2}$

M4 = $\frac{\ddot{y}\ddot{y}1A\ \frac{2}{1}}{1\ddot{y}4\ddot{y}2\ 2}$, **M5** = $\ddot{y}2\ \frac{\ddot{y}2A\ \frac{3}{2}}{\ddot{y}2\ 1\ddot{y}9\ddot{y}2\ 2}$, **M6** = $\frac{2\ddot{y}1(1\ddot{y}\ddot{y})A1A2}{(\ddot{y}1+\ddot{y}2)\ 2}$, **M7** = $\ddot{y}2\ 1\ddot{y}\ \frac{2\ddot{y}1(1\ddot{y}\ddot{y})A1A2}{\ddot{y}2\ 1\ddot{y}(\ddot{y}1\ddot{y}\ddot{y}2)\ 2}$

M8 = $\frac{3\ddot{y}2(1\ \ddot{y}\ \ddot{y})\ 2A\ 2\ \ 1A2}{\ddot{y}\ (2\ddot{y}1+\ \ddot{y}2)\ 2}$, **M9** = $\ddot{y}2\ \frac{3\ddot{y}2(1\ \ddot{y}\ \ddot{y})\ 2A\ 2\ \ \overline{1A2}}{\ddot{y}\ (2\ddot{y}1\ \ddot{y}\ \ddot{y}2)\ 2}$, **M10** = $\ddot{y}2\ \frac{\ddot{y}3\ddot{y}2(1\ \ddot{y}\ \ddot{y})A1A\ \frac{2}{2}}{\ddot{y}2\ 1\ddot{y}\ (\ddot{y}1+\ 2\ddot{y}2)\ 2}$

M11 = $\frac{\ddot{y}3\ddot{y}2(1\ \ddot{y}\ \ddot{y})A1A\ \overline{\ \frac{2}{2}}}{\ddot{y}\ 2\ddot{y}2)\ 1\ 2}$, **M12** = $\ddot{y}2\ \ddot{y}\ (\ddot{y}1\ \frac{\ddot{y}\ \ddot{y}\ddot{y}1\ (1\ \ddot{y}\ \ddot{y})\ 2A1A1+\ A2A2\ \ddot{y}\ iKi\ \ddot{y}\ \ddot{y}2\ \frac{A1}{\ddot{y}1}}{1}\ \ddot{y}\ \ddot{y}$

N1 = $\ddot{y}2\ \frac{1}{\ddot{y}\ \ddot{y}2\ 2\ 1}\ \ddot{y}2i\ddot{y}1D1\ddot{y}A1 + \ddot{y}4\ 3(1\ \ddot{y}\ \ddot{y})\ 3A\ 2\ \ \overline{1A1} + 6(1\ \ddot{y}\ \ddot{y})A1A2A2\ \overline{\ \ddot{y}}\ Kp\ \ddot{y}\ \ \frac{Ki}{\ddot{y}1} + \ddot{y}1Kd\ \ddot{y}A1$

N2 = $\frac{\ddot{y}2\ 2M1 + \ddot{y}3(1\ \ddot{y}\ \ddot{y})\ 2A_1}{2\ \ddot{y}2\ \ddot{y}\ 4\ddot{y}2_1}$, **N3** = $\frac{\ddot{y}2\ 2M2 + \ddot{y}4(1\ \ddot{y}\ \ddot{y})\ 3A_1}{3\ \ddot{y}2\ \ddot{y}\ 9\ddot{y}2_1}$

Machine Translated by Google

$$N4 = \frac{\ddot{y}\ddot{y}2\ 2M4\ \ddot{y}\ \ddot{y}3A\ \frac{2}{2}}{3\ddot{y}2_2}, \quad N5 = \frac{\ddot{y}\ddot{y}2\ 2M5 + \ddot{y}4A\ \frac{3}{2}}{8\ddot{y}2_2}, \quad N6 = \frac{\ddot{y}2\ 2M6\ \ddot{y}\ 2\ddot{y}3(1\ \ddot{y}\ \ddot{y})A1A2\ \ddot{y}2\ \ddot{y}\ (\ddot{y}1 + \ddot{y}2)\ 2}{2}$$

$$N7 = \frac{\ddot{y}2\ 2M7\ \ddot{y}\ 2\ddot{y}3(1\ \ddot{y}\ \ddot{y})A1A2\ \ddot{y}2\ \ddot{y}\ (\ddot{y}1}{\ddot{y}\ \ddot{y}2)}, \quad N8 = \frac{\ddot{y}2\ 2M8\ \ddot{y}\ 3\ddot{y}4(1\ \ddot{y}\ \ddot{y})\ 2A\ 2A2}{\ddot{y}2_2\ \ddot{y}\ (2\ddot{y}1 + \ddot{y}2)}$$

$$N9 = \frac{\ddot{y}2\ 2M9\ \ddot{y}\ 3\ddot{y}4(1\ \ddot{y}\ \ddot{y})\ 2A\ 2A2}{\ddot{y}2\ \ddot{y}\ (2\ddot{y}1\ \ddot{y}\ \ddot{y}2)\ 2}, \quad N10 = \frac{\ddot{y}2\ 2M10 + 3\ddot{y}4(1\ \ddot{y}\ \ddot{y})A1A\ \ddot{y}2\ \ddot{y}\ (\ddot{y}1 + 2\ddot{y}2)\ 2\ 2}{2}$$

$$N11 = \frac{\ddot{y}2\ 2M11 + 3\ddot{y}4(1\ \ddot{y}\ \ddot{y})A1A\ \ddot{y}2\ \ddot{y}\ (\ddot{y}1\ \ddot{y}\ 2\ddot{y}2)\ 2}{2}, \quad N12 = \frac{\ddot{y}\ \ddot{y}2\ 2M12 + \ddot{y}3\ (1\ \ddot{y}\ \ddot{y})\ 2A1A1 + A2A2\ \ddot{y}\ Ki\ \ddot{y}}{\ddot{y}2_2}$$

$$\frac{A2\ \ddot{y}A1 + \ddot{y}2\ \ddot{y}1}{\ddot{y}\ \ddot{y}}$$

Verweise

1. **Sowmya, VS; Dharsini, SP; Dharshini, RP; Aravind, P. Anwendung verschiedener PID-Regler-Tuning-Techniken für eine Temperatur System.** Int. J. Comput. Appl. **2014,** 103, **32–34.**
2. **Pradeepkannan, D.; Sathiyamoorthy, S. Implementierung eines PID-Reglers mit Verstärkungsplanung für einen nichtlinearen gekoppelten Kugeltankprozess.** Int. J. Mech. Mechatron. Eng. **2014,** 14, **93–98.**
3. **Sabri, LA; Hussein, AA Implementierung eines Fuzzy- und PID-Reglers für ein Wasserstandssystem mit LabView.** Int. J. Comput. Appl. **2015,** 116, **6–10.**
4. **Bashiri, AH Empirische Untersuchung einer robusten/entwickelten PID-Regelung für nichtlineare zeitverzögerte dynamische Systeme im diskreten Zeitbereich .** Heliyon **2024,** 10, **e29749. [CrossRef] [PubMed]**
5. **Hamed, A.; Shaban, EM; Darwish, RR; Abdel Ghany, AM Entwurf und Implementierung einer diskreten PID-Regelung für Bitumentank basierend auf einem neuen Ansatz der Mastplatzierungstechnik.** Int. J. Dynam. Control **2017, 5, 604–613. [CrossRef]**
6. **Shaban, EM; Hamed, A.; Darwish, RR; Abdel Ghany, AM Neuer Abstimmungsansatz für diskrete PI/PID-Regler, angewendet auf Bitumensysteme, basierend auf einer nicht-minimalen Zustandsraumformulierung. In Proceedings der 25. Internationalen Konferenz für Computertheorie und -anwendungen (ICCTA), Alexandria, Ägypten, 24.–26. Oktober 2015; S. 52–57.**
7. **Hamed, AR; Shaban, EM; Abdelhaleem, AM Industrielle Implementierung einer zustandsabhängigen Parameter-PID+-Steuerung für ein nichtlineares zeitverzögertes Bitumentanksystem.** Iran J. Sci. Technol. Trans. Electr. Eng. **2022,** 46, **743–751. [CrossRef]**
8. **Sayed, H.; Shaban, EM; Abdelhamid, A. Zustandsabhängige Parameter-PID+-Steuerung angewendet auf einen nichtlinearen Manipulatorarm. In** Recent Advances in Engineering Mathematics and Physics; **Farouk, M., Hassanein, M., Hrsg.; Springer: Cham, Schweiz, 2020.**
9. **Dano, ML; Julli'ere, B. Aktive Kontrolle thermisch induzierter Verformungen in Verbundstrukturen durch Makrofaser-Verbundaktuatoren .** Smart Mater. Struct. **2007,** 16, **2315–2322. [CrossRef]**
10. **Kumar, RS; Ray, MC Aktive Steuerung geometrisch nichtlinearer Schwingungen doppelt gekrümmter intelligenter Sandwichschalen mit 1–3 piezoelektrische Verbundwerkstoffe.** Compos. Struct. **2013,** 105, **173–187. [CrossRef]**
11. **Saeed, N.; Kamel, M. Nichtlinearer PD-Regler zur Unterdrückung nichtlinearer Schwingungen eines horizontal gelagerten Jeffcott-Rotorsystems .** Int. Non-Linear Mech. **2016,** 87, **109–124. [CrossRef]**
12. **Fey, RHB; Wouters RM, T.; Nijmeijer, H. Proportional- und Differenzialregelung zur stationären Schwingungsminderung in einer stückweise lineares Balkensystem.** Nonlinear Dyn. **2010,** 60, **535–649. [CrossRef]**
13. **Eissa, M.; Kandil, A.; El-Ganaini, WA; Kamel, M. Analyse der Schwingungen eines nichtlinearen Magnetschwebesystems, das durch einen zeitverzögerten proportionalen Differenzialregler gesteuert wird.** Nonlinear Dyn. **2015,** 79, **1217–1233. [CrossRef]**
14. **Eissa, M.; Kandil, A.; Kamel, M.; El-Ganaini, WA Über die Kontrolle der Reaktion von primären und parametrischen Resonanzen eines nichtlineares Magnetschwebesystem.** Meccanica **2015,** 50, **233–251. [CrossRef]**
15. Bauomy , **HS; EL-Sayed, AT Wirkung des nichtlinearen proportionalen Differenzialreglers für MFC-** Laminatschalen . **095210. [CrossRef]**
16. **Hote, YV; Jain, S. PID-Reglerdesign für die Lastfrequenzregelung: Vergangenheit, Gegenwart und zukünftige Herausforderungen.** IFAC-Pap. Online **2018,** 51, **604–609. [CrossRef]**
17. **Darwish, NM PID-Reglerentwurf im Frequenzbereich für Zeitverzögerungssysteme mit direkter Methode.** Trans. Inst. Meas. Control **2018,** 40, **940–950. [CrossRef]**
18. **Zhao, C.; Guo, L. PID-Reglerdesign für nichtlineare unsichere Systeme zweiter Ordnung.** Sci. China Inf. Sci. **2017,** 60, **022201. [Querverweis]**
19. **Hanafi, D. PID-Reglerdesign für semiaktive Fahrzeugfederung basierend auf einem Modell der intelligenten Systemidentifikation. In Proceedings of the IEEE Computer Society, Zweite Internationale Konferenz für Computertechnik und -anwendungen, Bali, Indonesien, 19.–21. März 2010; S. 60–63.**

Machine Translated by Google

20. Constantin, M.; Popescu, OS; Mastorakis, NE Prüfung und Simulation der Federung von Kraftfahrzeugen. Int. J. Syst. Appl. Eng. Dev. **2009, 3, 74–83.**

21. Kumar, MS Entwicklung eines aktiven Systems für Automobile mit PID-Regler. In Proceedings des Weltkongresses über Engineering, London, Großbritannien, 2.–4. Juli 2008; Band II.

22. Govinda, KE; Raghul, S.; Kishore, KR; Mathan, KM; Prasanth, C. Verbesserung der Closed Loop-Leistung von semiaktiven Federungssystem mit I-PD-Controller. Mater. Sci. Eng. **2019,** 561, **012085. [CrossRef]**

23. Amer, YA; EL-Sayed, AT; El-Bahrawy, FT Reduzierung der Torsionsschwingung des Hauptantriebssystems eines Walzwerks durch negative Geschwindigkeitsrückkopplung unter parametrischer Anregung. J. Mech. Sci. Technol. **2015,** 29, **1581–1589. [CrossRef]**

24. Wenzhi, G.; Zhiyong, H. Aktive Steuerung und Simulationsteststudie zur Torsionsschwingung der Rotorwelle eines großen Turbogenerators. Mech Mach. Theory **2010,** 45, **1326–1336. [CrossRef]**

25. El-Sayed, AT; Bauomy, HS Passive und aktive Regler zur Unterdrückung der Torsionsschwingung von Systemen mit mehreren Freiheitsgraden . J. Vib. Control **2015,** 21, **2616–2632. [CrossRef]**

26. Jianhui, W.; Yushen, W.; Philip Chen, CL; Zhi, L.; Wenqiang, W. Adaptive PI-ereignisgesteuerte Steuerung für nichtlineare MIMO-Systeme mit Eingangsverzögerung. Inf. Sci. **2024,** 677, **120817.**

27. Yang, WW; Yang, YJ; Tang, XY; Zhang, KR; Li, JC; Xu, C. Eine adaptive P/PI-Regelstrategie für einen solaren volumetrischen Methan/Dampfreformierungsreaktor mit passivem Wärmemanagement. Chem. Eng. Sci. **2023,** 281, **119005. [CrossRef]**

28. Kevorkian, J.; Cole, JD Multiple Scale and Singular Perturbation Methods. In Angewandte Mathematik; **Springer: Berlin/Heidelberg, Deutschland, 1996.**

29. Nayfeh, A. Perturbation Methods; **Wiley: New York, NY, USA, 1973.**

30. Dukkipati, RV Lösen von Schwingungsanalyseproblemen mit Matlab; **New Age International Pvt Ltd Verlag: Neu-Delhi, Indien, 2007.**

31. Bauomy, HS; El -Sayed, AT Gemischter Controller (IRC+ NSC), der am Kragträgermodell mit harmonischer Schwingungsantwort beteiligt ist. Meas. Control **2020,** 53, **1954–1967. [CrossRef]**

32. Kamel, M.; Eissa, M.; El-sayed, AT Schwingungsreduktion eines nichtlinearen Federpendels unter mehrparametrischer Anregung über einen Längsabsorber. Phys. Scr. **2009,** 80, **025005. [CrossRef]**

33. Bauomy, HS; El-Sayed, AT; Salem, AM; El-Bahrawy, FT Die verbesserten Schwingungen des riesigen magnetostriktiven Aktuators durch einen Dämpfer mit positiver Positionsrückkopplung. AIMS Math. **2023, 8, 16864–16886. [CrossRef]**

34. Bauomy, HS; El -Sayed, AT; El-Bahrawy, FT; Salem, AM Sicherheit einer kontinuierlich rotierenden Wellenstruktur vor nichtlinearen Vibration mit NIPPF. Alex. Eng. J. **2023,** 67, **193–207. [CrossRef]**

35. Bauomy, HS; El -Sayed, AT Schwingungsverhalten eines vertikalen Fördersystems unter zwei gleichzeitigen Resonanzen. Arch. Appl. Mech. **2018,** 88, **1349–1368. [CrossRef]**

36. El-Sayed, AT; Bauomy, HS NIPPF versus ANIPPF Reglerergebnisse bei halbdirektem Schneidgetriebe in einem Scherer. Chaos Solitons Fractals **2022,** 156, **111778. [CrossRef]**

37. Bilden von Bewegungsgleichungen für Systeme mit mehreren Freiheitsgraden. Online verfügbar: www.efunda.com/formulae/ Vibrationen/mdof_eom.cfm (abgerufen am 1. Januar 2013).

Haftungsausschluss/Anmerkung des Herausgebers: Die in allen Veröffentlichungen enthaltenen Aussagen, Meinungen und Daten sind ausschließlich die der einzelnen Autoren und Mitwirkenden und nicht die von MDPI und/oder den Herausgebern. MDPI und/oder die Herausgeber lehnen jegliche Verantwortung für Personen- oder Sachschäden ab, die aus den im Inhalt erwähnten Ideen, Methoden, Anweisungen oder Produkten resultieren.

Machine Translated by Google

Berechnung

MDPI

Rezension

Systematische Überprüfung von Prognosemodellen mit Hilfe von Evolving Fuzzy-Systeme

Sebastian-Camilo Vanegas-Ayala [1,2,*,†], **Julio Barón-Velandia** [1,†] **und Efren Romero-Riaño** [3,†]

[1] Doktorat in Ingenieurwissenschaften, Fakultät für Ingenieurwissenschaften, Universidad Distrital Francisco José de Caldas, Bogotá 111611-111611537, Kolumbien;
[2] jbaron@udistrital.edu.co Systems Engineering Program, Fakultät für Ingenieurwissenschaften und Grundlagenwissenschaften, Fundación Universitaria Los Libertadores, Bogotá 111221-111221440, Kolumbien
[3] Unterdirektion Forschung, Observatorio Colombiano de Ciencia y Tecnología (OCyT), Bogotá 111311-111311474, Kolumbien; eromero@ocyt.org.co
* Korrespondenz: scvanegasa@libertadores.edu.co Diese
† Autoren haben zu gleichen Teilen zu dieser Arbeit beigetragen.

Zusammenfassung: Derzeit wirkt sich die Zunahme von Geräten, die kontinuierlich Daten zu nichtstationären und dynamischen Variablen erfassen können, auf Vorhersagemodelle aus, insbesondere wenn sie nicht mit Algorithmen ausgestattet sind, die ihre Parameter und Struktur anpassen können, wodurch sie bestimmte zeitabhängige Eigenschaften oder das Vorhandensein fehlender Daten in Datenströmen nicht erkennen können. Eine sich ständig weiterentwickelnde Lösung für solche Probleme sind sich entwickelnde Fuzzy-Inferenzsysteme. Ziel dieser Arbeit war es, Prognosemodelle, die durch sich entwickelnde Fuzzy-Inferenzsysteme implementiert werden, systematisch zu überprüfen und die gängigsten Strukturen, Implementierungsergebnisse und vorhergesagten Variablen zu ermitteln, um einen Überblick über den aktuellen Stand dieser Technik und ihre möglichen Anwendungen in anderen unerforschten Bereichen zu erhalten. Diese Forschung folgte der PRISMA-Methodik systematischer Überprüfungen und umfasste wissenschaftliche Artikel und Patente aus drei akademischen Datenbanken, von denen eine kostenlosen Zugriff bietet. Dies wurde durch einen Identifizierungs-, Auswahl- und Aufnahme-Workflow erreicht, bei dem 323 Datensätze erhalten wurden, an denen Analysen basierend auf den vorgeschlagenen Überprüfungsfragen durchgeführt wurden. Insgesamt wurden 62 Untersuchungen identifiziert, die 115 verschiedene Systemstrukturen vorschlagen, die sich hauptsächlich auf die Erhöhung der Präzision konzentrierten und neben acht Hauptanwendungsbereichen und einigen Optimierungstechniken auch acht Hauptanwendungsbereiche behandelten. Es wurde festgestellt, dass diese Systeme erfolgreich bei der Prognose von Variablen mit dynamischem Verhalten **und bei der Handhabung fehlender Werte, kontinuierlicher Datenflüsse und nichtstationärer Eigenschaften impleme**

Schlüsselwörter: sich entwickelndes Fuzzy-System; Prognose; Fuzzy; Literaturübersicht; PRISMA; VOSviewer

check for updates

Zitat: Vanegas-Ayala, S.-C.; Barón-Velandia, J.; Romero-Riaño, E. Systematische Überprüfung von Prognosemodellen unter Verwendung sich entwickelnder Fuzzy-Systeme. Computation **2024,** 12, **159. https://doi.org/10.3390/ calculation12080159**

Wissenschaftlicher Herausgeber: Demos T. Tsahalis

Empfangen: 12. Juni 2024
Überarbeitet: 18. Juli 2024
Akzeptiert: 27. Juli 2024
Veröffentlicht: 8. August 2024

Copyright: © 2024 bei den Autoren. Lizenznehmer MDPI, Basel, Schweiz.

Dieser Artikel ist ein Open Access-Artikel vertrieben unter den Bedingungen und Bedingungen der Creative Commons

Namensnennungslizenz (CC BY) (https:// creativecommons.org/licenses/by/ 4.0/).

1. Einleitung

1.1. Prognosemodelle

Prognosemodelle ermöglichen Kontrolle und Entscheidungsfindung über die modellierte Umgebung. Ein Modell mit einem hohen Grad an Komplexität kann den Rechenaufwand dieser Aufgabe erheblich erhöhen, während ein zu einfaches Modell die Leistung verringern oder das Phänomen falsch darstellen kann **[1]. Die Dynamik der modellierten Phänomene kann sich im Laufe der Zeit ändern, was bedeutet, dass sich die Modelle während ihres Betriebs durch datenbasierte Ansätze und kontinuierliches Lernen anpassen müssen [2]. Dies erfordert, dass die Modelle über evolutionäre dynamische Strukturen verfügen, die in der Lage sind, Variationen im Datenfluss zu erfassen [1,3,4].**

Derzeit verwenden die meisten Prognosemethoden zur Generierung ihrer Anfangskonfigurationen nur begrenzte historische Informationen, und die Beschaffung dieser Informationen kann schwierig oder teuer sein. Dieser Ansatz kann dazu führen, dass Modelle nicht auf unerwartete Änderungen des modellierten Phänomens reagieren. Darüber hinaus basieren einige maschinelle Lernansätze häufig auf Offline-Training, was zu langen Trainingszyklen, erhöhter Rechenkomplexität und Fehlerfortpflanzung führt, was die Prognosegenauigkeit beeinträchtigen kann [5,6].

Machine Translated by Google

Die Implementierung einer effektiven Online-Vorhersagemethode ist zwingend erforderlich, um die Reaktionsstrategie des Modells zu verbessern und die Transformation des erlernten Wissens auf eine höchst intuitive und interpretierbare Weise zu ermöglichen **[3,6].** Modelle müssen schnell reagieren und aus **Situationen mit unterschiedlichen Systembedingungen wie Drifts, Ausreißern, fehlenden Werten, Verschiebungen oder** nicht stationären Umgebungen **lernen . Sie müssen außerdem unbegrenzte Datenströme verarbeiten und online und in Echtzeit** arbeiten **[7].**

1.2. Evolvierende Fuzzy-Inferenzsysteme

Evolvierende Fuzzy-Inferenzsysteme (EFS) haben sich in jüngster Zeit als Modellierungslösung für hochkomplexe, nichtlineare, online und instationäre Prozesse etabliert. Sie können ihre Parameter anpassen und ihre internen Strukturen schrittweise mit neuen, eingehenden Datenproben verändern – zum Beispiel durch Modifizierung des Regelsatzes oder der Anzahl der Ein- oder Ausgänge des Systems. Dadurch können sie sich im Laufe der Zeit an neue Zustände oder Verhaltensänderungen anpassen, ohne dass zeitintensive Umschulungsphasen oder Modellierungsunterbrechungen erforderlich sind [8–11].

EFSs bieten eine flexible Struktur mit inkrementellem und kontinuierlichem Lernen, verarbeiten Datenflussproben nur einmal und reduzieren so den Speicherverbrauch [7]. Darüber hinaus sind sie Fuzzy-Regel-basierte Systeme (FRSs), die sich zusammen mit ihren Metaparametern selbst aktualisieren können . Dies beinhaltet das Identifizieren und Verfeinern der Vorder- und Folgeteile der Regeln sowie das dynamische Anpassen der Parameter der Mitgliedschaftsfunktionen aus dem kontinuierlichen Datenfluss [3,9,12,13]. Bisher wurden verschiedene EFSs mit unterschiedlichen evolutionären Strukturen und Parameterlernschemata vorgeschlagen, um reale Klassifizierungs-, Identifikations- und Regressionsprobleme zu lösen, bei denen die Interpretierbarkeit des Modells eine Schlüsselrolle spielt **[3,9,14].**

EFS werden derzeit als praktische Werkzeuge in Datenstreaming-Anwendungen wie autonomem Fahren, Wettervorhersagen und Hochfrequenzhandel eingesetzt **[15]. Infolgedessen wurden zahlreiche EFS eingeführt, die sich durch bemerkenswerte Flexibilität, sprachliche Interoperabilität und dynamische Autonomie auszeichnen. Diese Systeme ermöglichen die Darstellung von Informationen mit effizienter Rechenleistung für kontinuierliches Selbstlernen in nichtstationären Prozessen [10,11] und bieten darüber hinaus schnelle Trainingsgeschwindigkeiten und eine hohe Präzision im Vergleich zu anderen nichtlinearen Vorhersagestrategien [6].**

Diese Arbeit bietet einen systematischen Überblick über EFS für Prognoseprobleme und hebt hervor, dass ihre Bedeutung durch andere Übersichtsarbeiten aufgezeigt wurde, die andere Ansätze abdeckten, wie z. B. die Kontrolltheorie [16], heuristisches Design [14], Interpretierbarkeit [17], ihre Anwendung in Datenflüssen [18] und die Herausforderungen zu Beginn ihrer Entwicklung [19].
Daher wird eine systematische Überprüfung von Prognosemodellen unter Verwendung von EFSs gegeben, um einen Überblick über den aktuellen Stand der Technik zu geben und potenzielle Anwendungen in unerforschten Bereichen zu erkunden. Um dies zu erreichen, zielt die

Überprüfung darauf ab, die folgenden Fragen zu beantworten: 1. Welche Autoren haben den größten Einfluss auf die E
2. Was sind die Trends bei den Themen, Konzepten oder Schlüsselwörtern, die mit Prognosen verbunden sind?
Modelle, die EFSs verwenden?
3. Wie hat sich die Häufigkeit der Forschung zu Prognosemodellen unter Verwendung von EFS entwickelt?
4. Welche Variablen oder Phänomene werden von EFSs vorhergesagt?
5. Welche Strukturen von EFS sind für Prognosen anwendbar?
6. Welche Optimierungsmethoden werden in EFSs implementiert, um deren Prognosegenauigkeit zu verbessern?
7. Welche Leistungsergebnisse wurden bei Prognosemodellen mit EFS erzielt?

Dieses Manuskript präsentiert eine Analyse des aktuellen Stands der EFS-Technik zur Prognose von Problemen und beschreibt die vorhandenen Strukturen, die Anwendungsbereiche und ihre Variablen sowie die Ergebnisse ihrer Umsetzung auf der Grundlage der Antworten auf die in der Übersicht behandelten Fragen. Dadurch können wir **neue Möglichkeiten für Forschung, Innovation und Entwicklung sowie mögliche Anwendungen bei Problemen mit denselben Merkmalen visualisieren .**

Diese systematische Übersicht folgt einer klaren und geordneten Struktur und adaptiert die PRISMA-Methodik für systematische Übersichten, die in den folgenden Abschnitten des

Machine Translated by Google

Dokument. Der Abschnitt „Materialien und Methoden“ beschreibt die verwendete Methodik im Detail; im Abschnitt „Ergebnisse und Diskussion“ werden die erzielten Erkenntnisse präsentiert und analysiert; im Abschnitt „Schlussfolgerungen“ werden die wichtigsten Schlussfolgerungen der Überprüfung zusammengefasst; und schließlich beschreibt der Abschnitt „Zukünftige Richtungen“ zukünftige Forschungsfelder und bestehende Herausforderung

2. Materialien und Methoden

Die vorliegende Übersichtsarbeit folgt dem PRISMA-Arbeitsablaufleitfaden für systematische Übersichtsarbeiten [20]. Dieser Prozess gliedert sich in drei Phasen: Identifizierung, Auswahl und Einbeziehung (Abbildung 1).

1. **Die Identifikationsphase umfasst die Definition der Eignungskriterien, die Auswahl der Informationen Informationsquellen und Entwicklung einer Suchstrategie.**
2. **Die Auswahlphase umfasst die Auswahl und Sammlung der Daten, einschließlich der Beschreibung der gesammelten Datenelemente und der Synthesemethode.**
3. **Die Aufnahmephase erfordert keine besondere Entwicklung, da sie sich auf die Durchführung einer gründlichen Suche konzentriert, um zu vermeiden, dass während des gesamten Arbeitsablaufs relevante Datensätze übersehen we**

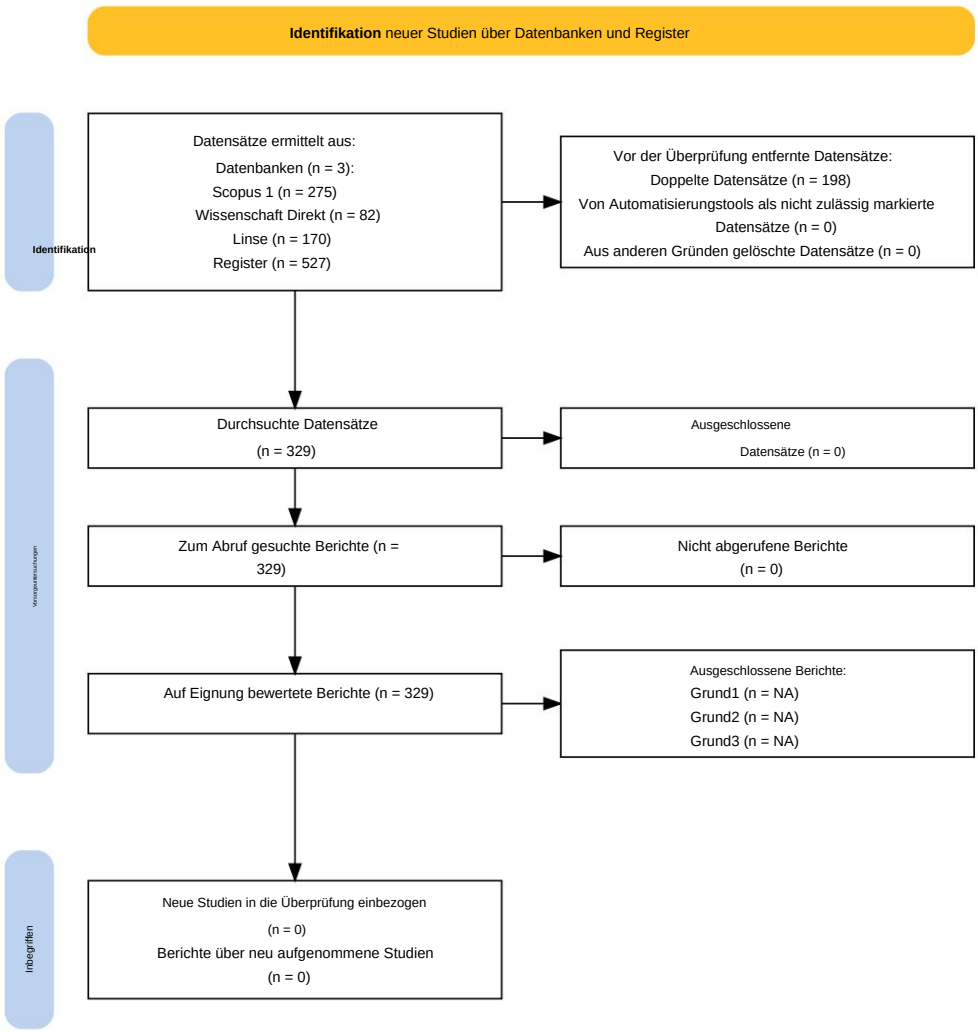


Abbildung 1. Beschreibung der Methodik nach dem Flussdiagramm der systematischen Überprüfung nach PRISMA [20,21].

2.1. Eignungskriterien, Informationsquellen und Suchstrategie

Alle Studien und Forschungsarbeiten, die in den ersten beiden Monaten des Jahres 2024 zu Prognosemodellen mit EFS durchgeführt werden, werden im Rahmen der Zulassungskriterien berücksichtigt. Als Datenquellen werden die wissenschaftlichen Datenbanken Scopus, Science Direct und Lens ve

Machine Translated by Google

Für jede Quelle wird die entsprechende Suchgleichung zusammen mit der Anzahl der in jedem Repository gefundenen Datensätze bereitgestellt.

Tabelle 1. Beschreibung der Suchstrategie für die systematische Überprüfung.

DB	Gleichung	Aufzeichnungen
Scopus	TITEL-ABS-SCHLÜSSEL („Modell*“ ODER „Vorhersage*“ ODER „Schätzung*“ ODER „Mathematisches Modell*“ ODER „Computersimulation*“ ODER „Prognose*“ ODER „Vorhersagemodell*“ ODER „Parameterschätzung*“ ODER „Parameterschätzung*“) UND TITEL-ABS-SCHLÜSSEL („fuzzy“ ODER „ANFIS“ ODER „Mitgliedschaft Funktion*“) UND TITEL-ABS-SCHLÜSSEL („Evolvierendes Fuzzy-System*“ ODER „Evolvierendes System*“)	275
Wissenschaft direkt	Finden Sie Artikel mit diesen Begriffen: („Modell“ ODER „Vorhersage“ ODER „Schätzung“ ODER „Mathematische Modell“ ODER „Computersimulation“ ODER „Prognose“ ODER „Vorhersagemodell“ ODER „Parameter Schätzung“ ODER „Parameterschätzung“) Titel, Zusammenfassung oder vom Autor angegebene Schlüsselwörter: ((„unscha“ ODER „ANFIS“ ODER „Mitgliedschaftsfunktion“) UND („Sich entwickelndes Fuzzy-System“ ODER „Entwicklungssystem“))	82
Linse	(Titel: ((„Modell*“ ODER „Vorhersage*“ ODER „Schätzung*“ ODER „Mathematisches Modell*“ ODER „Computersimulation*“ ODER „Prognose*“ ODER „Vorhersagemodell*“ ODER „Parameterschätzung*“ ODER „Parameterschätzung*“) UND („Fuzzy“ ODER „ANFIS“ ODER „Mitgliedschaftsfunktion*“) UND („Sich entwickelndes Fuzzy-System*“ ODER „Sich entwickelndes System*“))) ODER (Zusammenfassung: ((„Modell*“ ODER „Vorhersage*“ ODER „Schätzung*“ ODER „Mathematisches Modell*“ ODER „Computersimulation*“ ODER „Prognose*“ ODER „Vorhersagemodell*“ ODER „Parameterschätzung*“ ODER „Parameterschätzung*“) UND („Fuzzy“ ODER „ANFIS“ ODER „Mitgliedschaftsfunktion*“) UND („Entwickelndes Fuzzy-System*“ ODER „Sich entwickelndes System*“))) ODER (Schlüsselwort: ((„Modell*“ ODER „Vorhersage*“ ODER „Schätzung*“ ODER „Mathematisches Modell*“ ODER „Computersimulation*“ ODER „Prognose*“ ODER „Vorhersagemodell*“ ODER „Parameterschätzung*“ ODER „Parameterschätzung*“) UND („fuzzy“ ODER „ANFIS“ ODER „Mitgliedschaftsfunktion*“) UND („Sich entwickelndes Fuzzy-System*“ ODER „Sich entwickelndes System*“)))	165
Patentsuche für Objektive	(Titel: ((„Fuzzy“ ODER „ANFIS“ ODER „Mitgliedschaftsfunktion*“) UND („Sich entwickelndes Fuzzy-*“))) ODER (Zusammenfassung: ((„Fuzzy“ ODER „ANFIS“ ODER „Mitgliedschaftsfunktion*“) UND („Sich entwickelndes Fuzzy-*“))) ODER (Behauptung: ((„Fuzzy“ ODER „ANFIS“ ODER „Mitgliedschaftsfunktion*“) UND („Sich entwickelndes Fuzzy-*“)))	5

Nach dem Entfernen der Duplikate aus den 527 ursprünglichen Datensätzen verbleiben 323 eindeutige Datensätze für die Verwendung im Überprüfungsprozess.

2.2. Auswahlverfahren und Datenerhebungsverfahren

Jedes Dokument wurde zur bibliometrischen Analyse in kommagetrennten Werten und im RIS- Format aus der Datenbank exportiert. Die Methode zur Bestimmung der Einschlusskriterien speziell für die Untersuchungsanalyse wird im Folgenden beschrieben.

1. Es werden nur Patente und Artikel ausgewählt.

2. Die Artikel müssen in wissenschaftlichen Zeitschriften veröffentlicht werden.

3. Auf der **Grundlage einer bibliometrischen Analyse wird ein Zeitfenster ausgewählt, das eine Steigerung oder einen Fortschritt im Studienfach anzeigt .**

4. Alle Datensätze, die nicht mit dem Forschungsthema (Prognosen mit EFS) in Zusammenhang stehen, werden ausgeschlossen.

2.3. Datenelemente und Synthesemethoden

Aus der Gesamtzahl der Datensätze wurden die folgenden Daten extrahiert und gruppiert entsprechend ihrer Relevanz für die Überprüfung.

1. Bibliometrie

• Autoren: Wird verwendet, um Zusammenarbeit und Autorenrelevanz zu analysieren. • Schlüsselwörter: Wird verwendet, um das gemeinsame Auftreten von Begriffen zu analysieren. • Veröffentlichungsjahr: Wird verwendet, um die zeitliche Verteilung von Veröffentlichungen auf das Thema.

2. Investigativ •

Analysierte Variable: Entspricht der modellierten Variable oder dem modellierten Phänomen. • Typ des Fuzzy-Inferenzsystems: Gibt den Typ des verwendeten Fuzzy-Inferenzsystems an.

Machine Translated by Google

• Optimierung: Gibt die Methode oder Art der angewandten Optimierung an. • Modellbeschreibung: Liefert detaillierte Informationen über die Struktur der Entwicklung. oped-Modell.

- **Präzision: Gibt den Mess- und Leistungswert des erhaltenen Modells an.**

3. Filterfelder für die investigative Analyse Titel,

- **Abstract: Wird verwendet um zu ermitteln, ob die Dokumente dem Thema entsprechen.**

• Art der Veröffentlichung: Gibt das Veröffentlichungsmedium an, beispielsweise eine Zeitschrift, ein Buch, eine Konferenz oder anderes.

2.4. Datenanalyse-Tools **Zur**

Durchführung der bibliometrischen Analyse wurde das Tool VOSviewer verwendet. Dieses Tool ermöglicht die Visualisierung von Beziehungen, die sich auf die Überprüfungsfragen beziehen. Insbesondere erleichtert es die Analyse von Co-Autorenschaft und gemeinsamem Auftreten von Schlüsselwörtern mit zeitlichem Fokus. Die investigative Analyse umfasst auch die Tabellierung jedes Artikels gemäß den Untersuchungsfeldern der analysierten Variablen, dem Typ des Fuzzy-Inferenzsystems, der Optimierung und den Ergebnissen.

3. Ergebnisse

Die Ergebnisse wurden anhand ihrer Zielsetzung in zwei Abschnitte unterteilt: Der erste konzentriert sich auf bibliometrische Daten zur Beantwortung der Überprüfungsfragen 1 bis 3, der andere erfordert eine umfassendere Untersuchungsanalyse zur Beantwortung der Fragen 4 bis 7.

3.1. Bibliometrische Analyse

Beginnen wir mit der in Abbildung 2 dargestellten Co-Autorenschaftsanalyse . Dort sind alle Autoren aufgelistet, wobei drei Hauptcluster als die bedeutendsten identifiziert wurden. Diese Cluster repräsentieren die Forscher Fernando Gomide (hellblau), Edwin Lughofer (grün) und Plamen Angelov (rot).

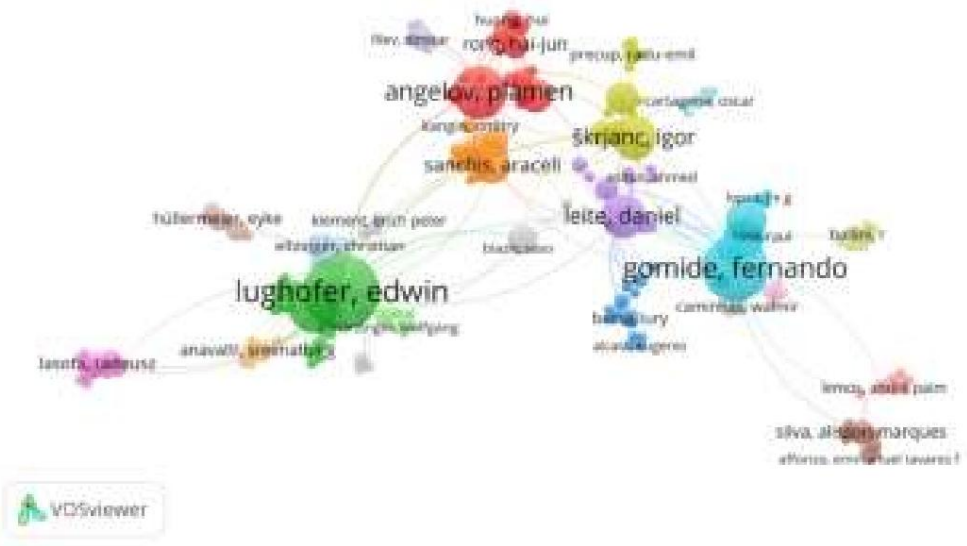


Abbildung 2. Co-Autorennetzwerk nach Anzahl der Dokumente auf EFSs.

In Abbildung 3 wird das gemeinsame Vorkommen von Schlüsselwörtern untersucht, wobei der Mindestwert für das Vorkommen auf 13 Wiederholungen festgelegt ist, um die relevantesten Themen im Rahmen der Überprüfung zu identifizieren. Zusätzlich zu EFSs wird beobachtet, dass es Elemente gibt, die mit Anwendungen wie Echtzeitsystemen, Datenströmen und Kommunikationssystemen zusammenhäng
Darüber hinaus sind Implementierungen wie mathematische Modellierung, Takagi-Sugeno-Modelle,

Machine Translated by Google

und neuronale Netzwerke werden erwähnt (blau hervorgehoben), zusammen mit Ansätzen wie Vorhersage, Klassifizierung, Online-Lernen und künstlicher Intelligenz (grün hervo

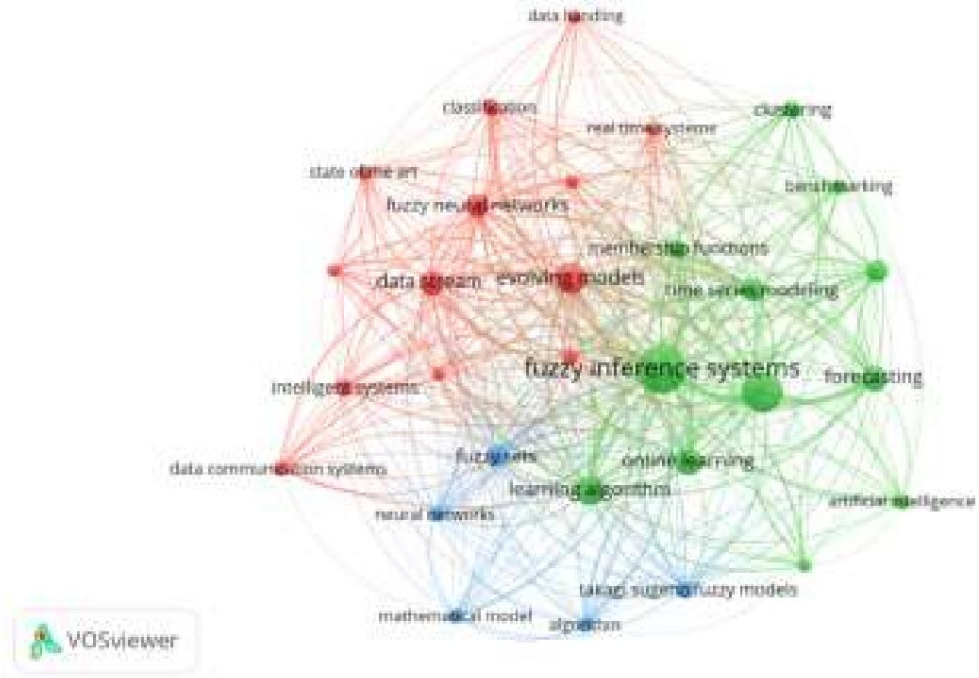


Abbildung 3. Karte des gemeinsamen Auftretens von Schlüsselwörtern für jedes Dokument auf EFSs.

In Abbildung 4 wird das gemeinsame Auftreten von Schlüsselwörtern im Laufe der Zeit untersucht, wobei die Mindesthäufigkeitsschwelle auf 13 Wiederholungen festgelegt ist. Zu den Forschungsthemen mit der jüngsten Entwicklung zählen Datenströme, Informationsklassifizierung, Prognosen u

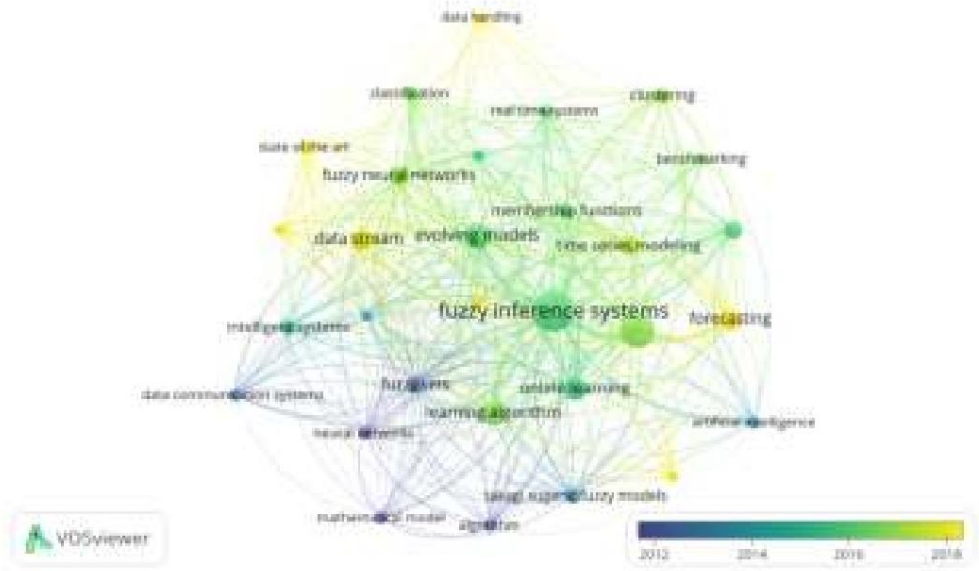


Abbildung 4. Karte des gemeinsamen Auftretens von Schlüsselwörtern für jedes Dokument auf EFSs im Zeitverlauf.

Abbildung 5 zeigt die Häufigkeit der Forschung zu Prognosemodellen unter Verwendung von EFS im Zeitverlauf. Seit 2010 ist ein Wachstumstrend zu beobachten, mit einem Durchschnitt von ungefähr 20 Studien pro Jahr. Dieses Wachstum ist auf die Weiterentwicklung der Technologie und der unterstützenden Computertools zurückzuführen.

Machine Translated by Google

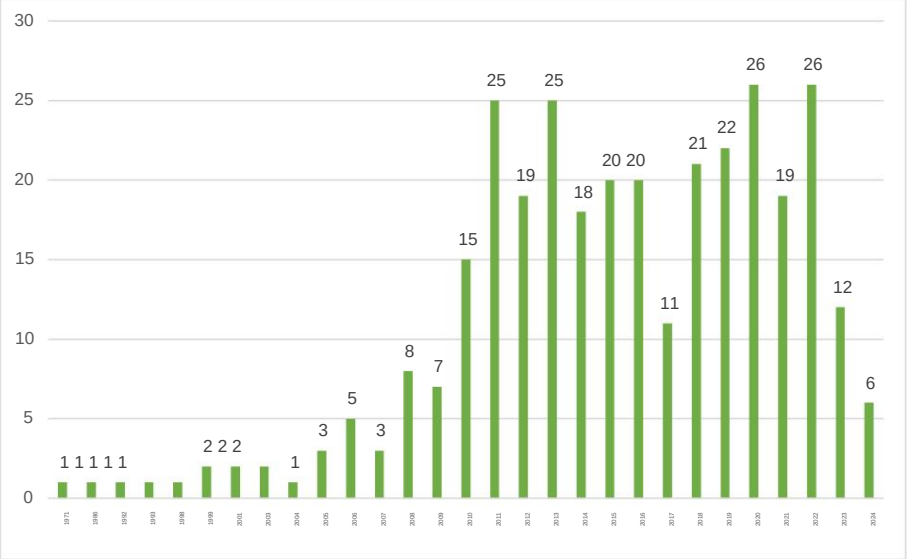


Abbildung 5. Histogramm der Verteilung des Forschungsumfangs zu EFS im Zeitverlauf.

3.2. Untersuchungsanalyse **Aus**

der Gesamtzahl der Untersuchungen wurden seit 2010 durch Filterung 82 Studien ausgewählt, wobei der Schwerpunkt auf Zeitschriftenartikeln und Patentanmeldungen lag, wie in der Auswahlmethodik festgelegt. Davon wurden 20 Studien verworfen, da sie nicht den Prognosemodellen entsprachen oder keine EFS verwendeten.

Tabelle 2 analysiert die verbleibenden 62 Untersuchungen und beschreibt kurz die durchgeführten Modelle. Bemerkenswerterweise beziehen sich die ersten fünf Einträge auf Patente.

Tabelle 2. Von jeder Untersuchung implementierte EFS-Typen.

Forschung	EFS-Typ
[22]	Fuzzy-Logik-Datenbank
[23]	Sich entwickelndes Fuzzy-Neuralnetz (EFuNN)
[24]	Sich entwickelndes Fuzzy-Neuralnetz (EFuNN)
[25]	Sich entwickelndes Fuzzy-Neuralnetz (EFuNN)
[26]	Fuzzy-Netzwerk
[27]	Selbstorganisierendes Fuzzy-Inferenzsystem (SOFIS+)
[28]	Dynamisch ähnlichkeitsgewichtetes EFS (DSW-EFS)
[29]	Nullordnungs-EFSs: Selbstorganisierendes Fuzzy-Inferenzsystem (SOFIS+); Nullordnungs-ALMMo (ALMMo0); Selbstorganisierendes Fuzzy-Belief-Inferenzsystem (SOFBIS)
[30]	Fuzzy-Vorhersageintervall (FPI)
[5]	Dual-Modell-Halb-überwachtes selbstorganisierendes Fuzzy-Inferenzsystem (DMS3OF); selbstorganisierendes Fuzzy-Inferenzsystem (SOFIS+); selbstorganisierendes Fuzzy-Belief-Inferenzsystem (SOFBIS)
[31]	Entwicklung eines neurofuzzy (eNF)
[32]	Fuzzifizierungs-DSP-Algorithmus (FDSPA)
[33]	Adaptives, sich entwickelndes Fuzzy-Modell (AEF)
[34]	Entwickelnde ellipsoidische Fuzzy-Informationsgranulate (EEFIGs); TS Fuzzy Autoregressiv mit exogenen Eingaben (TS Fuzzy ARX)
[35]	Modifizierte Set-Mitgliedschaft-eMG (MSM-eMG); variable Schrittweite-eMG (VS-eMG)
[36]	Entwicklung eines Neo-Fuzzy-Neurons mit Verfahren für fehlende Daten (eNFN-MDP)
[11]	Statistisches sich entwickelndes Fuzzy-Inferenzsystem (SEFIS)
[37]	Online-sequentielle Ensemblebildung von Fuzzy-Systemen (OS-FS)
[38]	Selbstadaptives Fuzzy-Lernen (SAFL)
[39]	Schwach überwachtes skalierbares Lehrer-Forcing-Netzwerk (WeScatterNet)
[40]	Mehrschichtiges Ensemble, das sich mit Fuzzy-Inferenzsystemen entwickelt (MEEFIS); sich mit Fuzzy-Inferenzsystemen erster Ordnung entwickelnde Systeme (EFISs)
[41]	TSK-Streams
[42]	EFS mit selbstlernenden/adaptiven Schwellenwerten (EFS-SLAT)
[43]	Entwicklung des neuro-fuzzy Takagi-Sugeno-Netzwerks (Entwicklung des NF-TS)

Machine Translated by Google

Tabelle 2. Fortsetzung

Forschung	EFS-Typ
[44]	Erweiterte Set-Mitgliedschaft ePL-KRLS (ESM-ePL-KRLS); Set-Mitgliedschaft ePL-KRLS (SM-ePL-KRLS)
[45]	Erweiterter ALMMo nullter Ordnung (ALMMo-0*)
[46]	Inkrementelle Fuzzy-C-Regression (InFuR)
[47]	Verallgemeinerter heterogener Intervall-Fuzzy-Klassifikator Typ 2 (GHIT2Class)
[48]	Entwicklung eines Fuzzy-Granular-Prädiktors (eFGP)
[49]	TS-Entwicklung eines Fuzzy-Kalman-Filters
[50]	Adaptiver Fuzzy-Klassifikator basierend auf Gradientenabstieg (AFCGD)
[51]	Entwicklung des Takagi-Sugeno-Prinzips (eTS); erweitertes Takagi-Sugeno-Prinzip (xTS); Entwicklung des Fuzzy-Partizipativen Lernens (ePL)
[52]	Robuste Strukturidentifikationsmethode (RSIM)
[53]	Sparsames Netzwerk basierend auf einem Fuzzy-Inferenzsystem (PANFIS)
[54]	Cloudbasiertes Identifizierungsverfahren
[55]	Zeitreihen entwickelnde Fuzzy-Engine (TiSEFE)
[56]	Gewichtetes Neuro–Neo–Fuzzy–ANARX-Modell
[57]	GENERISCHER Klassifikator (gClass)
[58]	Scaffolding Typ-2-Klassifikator (ST2Class)
[59]	Entwicklung eines heterogenen Fuzzy-Inferenzsystems (eHFIS)
[60]	Entwicklung von Fuzzy-GARCH
[61]	Entwickelnder Klassifikator (eClass)
[62]	Entwicklung eines Output-Kontext-Fuzzy-Systems (EOCFS)
[63]	Entwickelndes Informationsgranulat (EIG)
[64]	Generalisiertes intelligentes EFS (Gen-Smart-EFS) (GS-EFS)
[65]	eTS-Anomalieerkennung (eTSAD)
[66]	Adaptives Neuro-Fuzzy-Inferenzsystem (ANFIS)
[67]	Sich entwickelndes neuro-fuzzy rekurrierendes Netzwerk (ENFRN)
[68]	Entwickelnder Klassifikator (eClass)
[69]	Generisches sich entwickelndes neuro-fuzzy Inferenzsystem (GENEFIS)
[70]	Entwicklung des erweiterten Takagi-Sugeno-Systems (exTS)
[71]	Entwicklung eines unscharfen partizipativen Lernens + (ePL+)
[72]	Gaußsches partizipatorisches, sich entwickelndes Clustering
[73]	Entwickelnder Klassifikator (eClass)
[74]	Entwicklung eines neuronalen Fuzzy-Inferenzsystems vom Typ 2 (eT2FIS)
[75]	eTS basierend auf Umschaltung auf Nachbarnetze (eTS-N)
[76]	Vierschichtiges Fuzzy-Multiagentensystem (FMAS)
[77]	Selbstorganisierendes FNN (SOFNN)
[4]	Weiterentwicklung von Takagi–Sugeno (eTS); flexible Fuzzy-Inferenzsysteme (FLEXFIS)
[78]	Entwicklung von Takagi–Sugeno (eTS)
[79]	Entwickelnder Klassifikator für Agentenverhalten (EvCAB)
[80]	eSensoren

Tabelle 3 zeigt die von EFSs vorhergesagten Variablen oder Phänomene, wobei jede Variable gruppiert nach dem jeweiligen Studienbereich. Die Bereiche mit den bedeutendsten Zu den Anwendungsgebieten gehören Wirtschaft oder Finanzen, Gesundheit, Fertigung und Technologie. Insbesondere im technologischen Bereich wird ein beträchtlicher Anteil der Anwendung syn Variablen zur Überprüfung und Validierung neuer Modellentwicklungen.

Tabelle 3. Liste der mithilfe von EFS vorhergesagten Variablen nach Anzahl der Untersuchungen.

Feld	Analysierte Variable	Zählen
Klimatisch-meteorologisch	Wärmetauschersystem	1
Wirtschaftlich – Finanziell	Kryptowährung	1
	Volatilität der Finanzrenditen	1
	Immobilienpreise	1
	Volatilität der Aktienmärkte	2
	Renditekurve	1

Machine Translated by Google

Tabelle 3. Fortsetzung

Feld	Analysierte Variable	Zählen
Energie	Verbleibende Batterielebensdauer	1
	Hot-Spot-Temperatur	1
	Thermische Modellierung von Leistungstransformatoren	1
Gesundheit	Aktivitätserkennung	1
	Stammbäume	1
	Genexpression	3
	Herztöne	2
Herstellung	Fehlererkennung und Diagnose	1
	Herstellungsverfahren	1
	Getriebefehler in Echtzeit	1
	Restnutzungsdauer	1
	Robotergestützte Demontagesequenzplanung (DSP)	1
	Wasserkühlanlage	1
Sozial	Immobilienbewertung	1
	Web-Neuigkeiten	1
Technologisch	Beispieldaten	30
	Beispielbild	1
	Fuzzy-Netzwerkstrukturen	1
	Netzwerkverkehr	1
	Nicht-Gaußsches Rauschen	1
	Sensordaten	1
	UNIX-Befehle	1
Transport und Logistik	Hubschrauberrotor	1

Tabelle 2 beschreibt die 115 evolutionären Fuzzy-Inferenzsystemstrukturen, die anwendbar sind zur Prognose. Darüber hinaus zeigt Abbildung 6 die Nutzungsprozentsätze verschiedener EFS, mindestens zwei Anwendungen in Betracht ziehen. eTS hat die höchste Anwendungshäufigkeit, gefolgt von eClass, eMG und xTS bei der Vorhersage der in Tabelle 3 angegebenen Variablen.

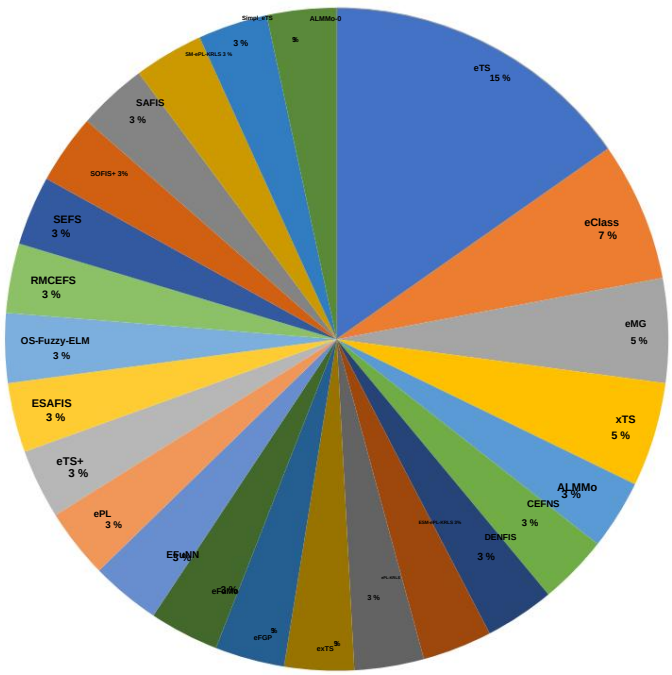


Abbildung 6. Kreisdiagramm der Verteilung der auf Vorhersageprobleme angewendeten EFS-Typen.

Machine Translated by Google

Darüber hinaus zeigt Abbildung 7 die verschiedenen EFS, die bei der Prognose der identifizierten Variablen mindestens zweimal. Insbesondere Beispieldaten, die thermische Modellierung von Leistungstransformatoren, und nicht-Gaußsches Rauschen sind die Variablen, die von der größten Anzahl verschiedener EFS vorhergesagt werden.

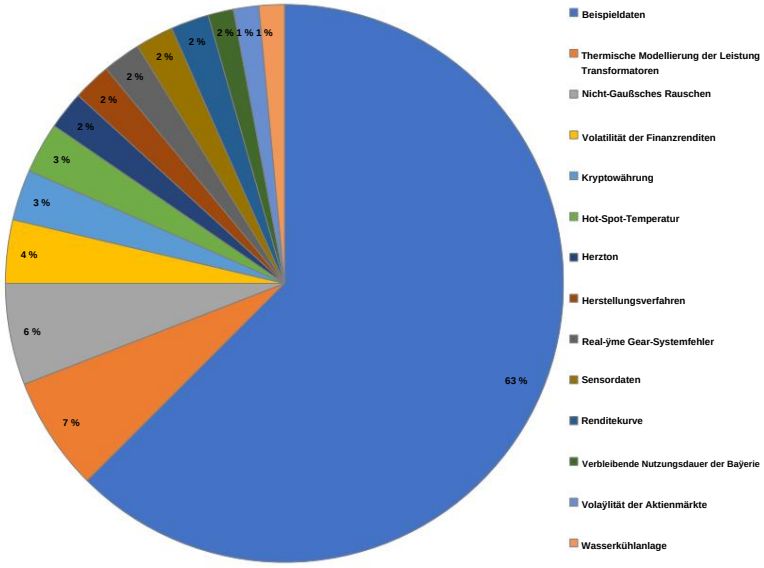


Abbildung 7. Kreisdiagramm der Verteilung der Variablentypen in der Forschung, in der EFSs angewendet werden.

In Bezug auf die in EFS implementierten Optimierungsmethoden zur Verbesserung der Prognose Präzision zeigt Tabelle 4 , dass 12 Untersuchungen Optimierungselemente enthalten, die welche Methoden umgesetzt wurden und wie häufig.

Tabelle 4. Liste der Optimierungsmethoden nach Anzahl der Untersuchungen, bei denen sie angewendet werden.

Optimierung	Zählen
Adadelta-Funktion (NaD)	1
Adaptives Boosting (AdaBoost)	1
Adaptiver Partikelfilter (aPF)	1
Adaptive halbüberwachte Ensemble-Methode (ASSEMBLE)	1
Adaptives Wavelet	1
Boosting-Framework für halbüberwachtes Lernen (SemiBoost)	1
Entkoppelter erweiterter Kalman-Filter (DEKF)	1
Drifterkennung und -reaktion	1
Erweiterter binärer Suchbaum (E-BST)	1
Fuzzig gewichteter AdaBoost (FWAdaBoost)	1
Fuzzy-gewichtete rekursive kleinste Quadrate mit variablem Richtungsvergessen (FWRLS-VDF)	1
Genetischer Algorithmus (GA)	1
Globale kleinste Quadrate	1
Gradientenabstieg (GD)	2
Allmähliches Vergessen	1
Hyperparameteroptimierung basierend auf Hoeffdings Ungleichung	1
MapReduce	1
Zusammenführungsalgorithmus	1
ModifizierteEntwicklung	1
Robuster AdaBoost (RobAdaBoost)	1
Halbüberwachter FWAdaBoost (SSFWAdaBoost)	1
Stufenweise additive Modellierung mit einer Mehrklassen-Exponentialfunktion (SAMME)	1
Adadelta-Funktion (NaD)	1

Darüber hinaus nutzen Prognosemodelle mit EFS verschiedene Leistungsmaße. Insbesondere wird der mittlere quadratische Fehler (RMSE) in 23 Untersuchungen erwähnt, während

Machine Translated by Google

Der mittlere quadratische Fehler (MSE) wird in fünf Schritten berücksichtigt. Die erhaltenen Werte betragen 0,0662 bzw. 0,0561.

4. Diskussion

In diesem Abschnitt diskutieren wir relevante Elemente, die aus den durchgeführten Analysen abgeleitet wurden, und konzentrieren uns dabei auf die Erkenntnisse zu den gemeinsamen Strukturen, die Ergebnisse der Implementierung der Modelle und die Variablen, die für die Prognose mit EFSs verwendet werden.

Unter den Typen von EFS-Strukturen, die für Prognosen anwendbar sind, werden eGNN, FLEXFIS, eTS und eClass am häufigsten verwendet und zitiert. Diese wurden von Fernando Gomide, Edwin Lughofer und Plamen Angelov vorgeschlagen und bieten einen Vergleichspunkt für zukünftige Forschungen, in denen sie implementiert, gegenübergestellt und verbessert werden können. Darüber hinaus haben verschiedene Autoren im letzten Jahrzehnt neue Vorschläge vorgelegt, die neuartige **Ansätze oder Verbesserungen früherer Implementierungen einführen ,** was auf ein aufstrebendes und **wachsendes Feld hindeutet.**

Schon jetzt werden aus den analysierten Ansätzen neue Vorschläge entwickelt, etwa zur Verbesserung der Interpretierbarkeit (X-Fuzz [81]), zum Umgang mit fehlenden Daten [82], zur Verwendung anderer Ansätze (wie der Verwendung mehrerer Schichten in hierarchisch evolvierenden Fuzzy-Systemen [83]) oder zur Verbesserung bestehender Ansätze (wie der dynamischen Regelgenerierung [84].

Bei der Analyse der aktuellen Trends fällt auf, dass die Strukturen der für Prognosen anwendbaren EFS überwiegend auf Fuzzy-Inferenzsystemen vom Typ Takagi–Sugeno basieren . Diese Systeme befassen sich mit Ansätzen wie der Erstellung oder dynamischen Anpassung von Regeln [31,38,41,45] und der Konfiguration oder Überwachung von Eingangs- oder A
Es gibt jedoch einige Konfigurationen, die sich auf die Verwaltung fehlender Daten [36,48] konzentrieren **und ebenfalls auf Fuzzy-Inferenzsystemen vom Mamdani-Typ [62,63,74] basieren, welche eine höhere Interpretierbarkeit bieten.**

Dieser Trend zeigt, dass es derzeit viele Vorschläge gibt, die sich auf Präzision konzentrieren, aber nur wenige, die sich mit Interpretierbarkeit oder dem Umgang mit fehlenden Daten befassen, was eine Forschungsmöglichkeit b
Dies wird beispielsweise dadurch belegt, dass von den 115 analysierten Vorschlägen nur 10 Systeme vom Typ Mamdani

verwenden: • Sich entwickelndes Output-Context-Fuzzy-System (EOCFS); • Sich entwickelndes Konstruktionsschema für Fuzzy-Systeme (ECSFS); • Sich entwickelndes Informationsgranulat (EIG); • Sich entwickelndes neuronales Fuzzy-Inferenzsystem vom Typ 2 (eT2FIS); • Fuzzy-adaptives Lernkontrollnetzwerk unter Anwendung der adaptiven Resc ART);
• Sich entwickelndes unscharfes neuronales Netzwerk (EFuNN); • Sich entwickelndes neuronal-fuzzy semantisches Gedächtnis (eFSM); • Generisches SOFNN (GenSoFNN); • Auf Rough-Sets basierendes Pseudo-Außenprodukt (RSPOP); • Selbstorganisierendes neuronales Fuzzy-System vom Typ 2 (T2SONFS).

Die mit den verschiedenen EFS-Ansätzen erzielten Präzisionswerte zeigen, dass sie bei der Implementierung robust sind. Insbesondere passen diese Systeme ihre Strukturen kontinuierlich an, um neuen Datenflüssen oder Variationen im Verhalten der analysierten Variablen Rechnung zu tragen.

Es wird beobachtet, dass durch die Implementierung von Optimierungsmethoden die Eigenschaften der bestehenden Systeme verbessert werden, wodurch ihre Präzision erhöht oder die algorithmische Komplexität und Zeit reduziert werden. Ihre begrenzte Implementierung ist jedoch auf den aktuellen Reifegrad der Technik zurückzuführen; daher wird in Zukunft mit einer verstärkten Implementierung gerechnet. Derzeit liegt der Schwerpunkt eher auf der Entwicklung neuer Vorschläge mit unterschiedlichen Eigenschaften als auf der Implementierung von Optimierungsmechanismen in bestehende Strukturen.

Im Anwendungsbereich der Datenflussprognose ergeben sich mehrere Forschungsmöglichkeiten im Zusammenhang mit den prognostizierten Variablen oder Phänomenen:

Machine Translated by Google

- **Variablen, die im Laufe der Zeit nichtstationäre und dynamische Eigenschaften aufweisen – beispielsweise klimatische oder meteorologische Variablen, wie diejenigen im Wärmetauschersystem [30].**

- **Phänomene, die starke Schwankungen im Laufe der Zeit aufweisen und von unbekannten Variablen abhängig sind** – zum Beispiel in wirtschaftlichen Phänomenen wie **der Volatilität der Aktienmärkte [60,76];**
- **Variablen in kontinuierlichen Datenströmen, wie Echtzeit-Getriebesystemfehler [31] und Netzwerkverkehr [55];**
- **Zeitreihen mit fehlenden Daten [36] innerhalb dynamischer und instationärer Datenströme, wie zum Beispiel bei Kryptowährungen [48].**

5. Schlussfolgerungen

Anwendungen von EFS finden sich in Bereichen wie Klima, Wirtschaft, Energie, Gesundheit, Fertigung, Sozialwissenschaften und Transport, mit hohen Leistungswerten bei der Prognose dynamischer, nichtstationärer Variablen, selbst bei kontinuierlichen Datenflüssen und fehlenden Daten. Es ist offensichtlich, dass es möglich ist, bei der Prognose von Phänomenen mit diesen Eigenschaften hohe Genauigkeitswerte zu erzielen , insbesondere in Verbindung mit Optimierungsmethoden, die derzeit nur begrenzt einsetzbar sind, hauptsächlich aufgrund des aktuellen Re

Es wurde festgestellt, dass es eine erhebliche Vielfalt an Konfigurations- und Montagevorschlägen für EFSs zur Datenflussprognose gibt. Es wird vorgeschlagen, dass Strukturen vom Typ Sugeno die gebräuchlichsten Strukturen sind, wenn eine höhere Genauigkeit gewünscht wird. Wenn wir uns andererseits auf eine höhere Interpretierbarkeit konzentrieren, basiert nur ein kleiner Anteil, etwa 8,6957 %, der Vorschläge auf Fuzzy-Inferenzsystemen vom Typ Mamdan

6. Zukünftige Richtungen

In diesem Abschnitt untersuchen wir die möglichen zukünftigen Forschungsansätze und Fortschritte im Bereich EFS bei Prognoseproblemen auf der Grundlage der durchgeführten Überprüfung. Neue Trends und ungelöste Probleme, die das Feld voranbringen können, werden hervorgehoben.

- **Neue Trends – Die Prognose dynamischer, nicht stationärer Datenflüsse und fehlender Daten wie Wirtschaftsindizes, Gesundheitszustände in Echtzeit, Umweltdaten, Verbraucherverhalten , Interaktionen in sozialen Netzwerken, Daten aus Interaktionen auf Bildungsplattformen , Mobilitätsdaten und Sensordaten, um nur einige zu nennen.**
  - **Die Implementierung von Optimierungsalgorithmen zur Steigerung der Präzision der Modelle, mit dem Ziel, die erreichte Interpretierbarkeit beizubehalten, ohne die Semantik des Modells zu verändern.**
  - **Die Entwicklung neuer Vorschläge, deren Schwerpunkt auf der Gewährleistung der Prognose von Datenflüssen mit hoher Interpretierbarkeit und dem Umgang mit fehlenden Daten oder kontinuierlichen Datenflüssen liegt.**
- **Ungelöste Probleme**
  - **Was die Klassifizierung bestehender Strukturen betrifft, wurden mehr als 100 Vorschläge für evolutionäre Fuzzy-Inferenzsysteme gefunden. Daher ist es notwendig, ein Klassifizierungssystem zu entwickeln, um die Implementierung und den Vergleich zu erleichtern. Einige der in dieser Überprüfung identifizierten Vorschläge sind beispielsweise nach ihrem Ansatz gruppiert, d. h. Präzision oder Interpretierbarkeit, oder sie konzentrieren sich auf die Änderung von Regeln oder Ein- und A**
  - Es ist notwendig, Vorschläge, die ein hohes Maß an **Interpretierbarkeit und Präzision mit einer einfach umzusetzenden Art und Weise vereinen, effizient zu kombinieren .**

Beiträge der Autoren: Konzeptualisierung, S.-CV-A. und JB-V.; Methodik, ER-R.; Software, S.-CV-A.; Validierung, S.-CV-A., JB-V. und ER-R.; Untersuchung, S.-CV-A.; Ressourcen, ER-R.; Datenkuratierung , S.-CV-A.; Schreiben – Vorbereitung des Originalentwurfs, S.-CV-A.; Schreiben – Überprüfung und Bearbeitung, S.- CV-A.; Visualisierung, ER-R.; Überwachung, JB-V. Alle Autoren haben die veröffentlichte **Version des Manuskripts gelesen und ihr zugestimmt .**

Machine Translated by Google

Finanzierung: Diese Forschung erhielt keine externe Finanzierung.

Erklärung zur Datenverfügbarkeit: Die Rohdaten, die die Schlussfolgerungen dieses Artikels stützen, werden von den Autoren auf Anfrage zur Verfügung gestellt.

Interessenkonflikte: Die Autoren erklären, dass keine Interessenkonflikte bestehen.

Verweise

1. **Alcalá, E.; Bessa, I.; Puig, V.; Sename, O.; Palhares, R. MPC unter Verwendung eines Online-TS-Fuzzy-Learning-Ansatzes mit Anwendung auf autonomes Fahren.** Appl. Soft Comput. **2022,** 130, **109698.** [CrossRef]
2. **Andonovski, G.; Costa, BSJ; Blažiÿc, S.; Škrjanc, I. Robuster, sich entwickelnder Regler für simulierten Ausgleichsbehälter und für reale Zwei-Tank- Anlage.** Automatisierungstechnik **2018,** 66, **725–734.** [CrossRef]
3. **Gu, X.; Angelov, P.; Shen, Q. Selbstorganisierendes Fuzzy-Belief-Inferenzsystem zur Klassifizierung.** IEEE Trans. Fuzzy Syst. **2022,** 30, **5473–5483.** [CrossRef]
4. **Lughofer, E.; Angelov, P. Umgang mit Drifts und Verschiebungen in Online-Datenströmen mit sich entwickelnden Fuzzy-Systemen.** Appl. Soft Comput. **2011,** 11, **2057–2068.** [CrossRef]
5. **Gu, X. Ein duales, halbüberwachtes, selbstorganisierendes Fuzzy-Inferenzsystem zur Klassifizierung von Datenströmen.** Appl. Soft Comput. **2023,** 136, **110053.** [CrossRef]
6. **Sun, J.; Gan, X.; Gong, D.; Tang, X.; Dai, H.; Zhong, Z. Ein selbstentwickelndes Fuzzy-System auf der Grundlage von Online-Vorhersagen mit dynamischen Multi-objektiver evolutionärer Algorithmus.** Inf. Sci. **2022,** 612, **638–654.** [CrossRef]
7. **Rodrigues, F.; Silva, A.; Lemos, A. Entwicklung eines Fuzzy-Prädiktors mit multivariablem Gaußschen partizipativem Lernen und rekursiven gewichteten kleinsten Quadraten für mehrere Innovationen: eFMI.** Evol. Syst. **2022,** 13, **667–686.** [CrossRef]
8. **Lughofer, E.; Skrjanc, I. Entwicklung eines Fuzzy-Modells mit Fehlerrückkopplung zur Verbesserung der Robustheit bei Messrauschen.** IEEE Trans. Fuzzy Syst. **2022,** 31, **997–1008.** [CrossRef] **Škrjanc,**
9. **I.; Iglesias, JA; Sanchis, A.; Leite, D.; Lughofer, E.; Gomide, F. Entwicklung von Fuzzy- und Neuro-Fuzzy-Ansätzen in Clustering, Regression, Identifikation und Klassifizierung: Eine Untersuchung.** Inf. Sci. **2019,** 490, **344–368.** [CrossRef]
10. **Ferdaus, M.; Pratama, M.; Anavatti, S.; Garratt, M. PALM: Eine inkrementelle Konstruktion von Hyperebenen für Datenströme Regression.** IEEE Trans. Fuzzy Syst. **2019,** 27, **2115–2129.** [CrossRef]
11. **Yang, ZX; Rong, HJ; Angelov, P.; Yang, ZX Statistisch weiterentwickeltes Fuzzy-Inferenzsystem für nicht-Gaußsches Rauschen.** IEEE Trans. Fuzzy Syst. **2021,** 30, **2649–2664.** [CrossRef]
12. **Angelov, P.; Filev, D. Ein Ansatz zur Online-Identifizierung von Takagi-Sugeno-Fuzzy-Modellen.** IEEE Trans. Syst. Man Cybern. Teil B Cybern. **2004,** 34, **484–498.** [CrossRef] [PubMed]
13. **Dell'Anna, D.; Jamshidnejad, A. Entwicklung von Fuzzy-Logik-Systemen für kreative, personalisierte, sozial unterstützende Roboter.** Eng. Appl. Artif. Intell. **2022,** 114, **105064.** [CrossRef]
14. **Ojha, V.; Abraham, A.; Snášel, V. Heuristisches Design von Fuzzy-Inferenzsystemen: Ein Überblick über drei Jahrzehnte Forschung.** Eng. Appl. Artif. Intell. **2019,** 85, **845–864.** [CrossRef]
15. **Huang, H.; Rong, HJ; Yang, ZX; Vong, CM Rekursive kleinste mittlere duale p-Potenz-Lösung zur Verallgemeinerung der sich entwickelnden Fuzzy-System unter mehreren Geräuschen.** Inf. Sci. **2022,** 609, **228–247.** [CrossRef]
16. **Radu-Emil Precup, ATN; Blažiÿc, S. Eine Untersuchung zur Fuzzy-Steuerung für mechatronische Anwendungen.** Int. J. Syst. Sci. **2024,** 55, **771–813.** [Querverweis]
17. **Lughofer, E. Online-Sicherung von Interpretierbarkeitskriterien in sich entwickelnden Fuzzy-Systemen – Erfolge, neue Konzepte und offene Probleme.** Inf. Sci. **2013,** 251, **22–46.** [CrossRef]
18. **Baruah, RD; Angelov, P. Entwicklung von Fuzzy-Systemen für Datenströme: Eine Untersuchung.** WIREs Data Min. Knowl. Discov. **2011, 1, 461–476.** [Querverweis]
19. **Pedrycz, W. Evolvierbare Fuzzy-Systeme: Einige Erkenntnisse und Herausforderungen.** Evol. Syst. **2010, 1, 73–82.** [CrossRef]
20. **Page, M. PRISMA 2020 – Erläuterung und Ausarbeitung: Aktualisierte Leitlinien und Muster für die Berichterstattung systematischer Übersichtsarbeiten.** BMJ **2021,** 372, **160.** [CrossRef]
21. **Haddaway, N.; Page, M.; Pritchard, C.; McGuinness, L. PRISMA2020: Ein R-Paket und eine Shiny-App zur Erstellung PRISMA 2020-kompatibler Flussdiagramme mit Interaktivität für optimierte digitale Transparenz und Open Synthesis.** Campbell Syst. Rev. **2022,** 18, **1230.** [CrossRef] [PubMed]
22. **Charles, DM Methode und System zur Ermittlung von Vorfahren anhand genomischer und genealogischer Daten. US 2017/0213127 A1, 27. Juli 2017.**
23. **Edmund, RA; Erwin, FM; James, SM; Kirilov, KN; John, GP Medizinische Anwendungen von adaptiven Lernsystemen mit Genexpressionsdaten. US 7370021 B2, 6. Mai 2008.**
24. **Edmund, RA; Erwin, FM; James, SM; Kirilov, KN; John, GP Medizinische Anwendungen von adaptiven Lernsystemen und Diagnosekits. NZ 547894 A, 6. Mai 2008.**
25. **Kirilov, KN; Erwin, FM; James, SM; Edmund, RA Medizinische Entscheidungsunterstützungssysteme unter Verwendung von Genexpression und klinischen Informationen und Verwendungsmethode. EP 1534122 B1, 20. Juli 2016.**
26. **Flinn, SD; Moneypenny, NF Adaptive Recombinant Systems. WO 2005/054982 A2, 16. Juni 2005.**

Machine Translated by Google

27. **Xiao, F.; Liu, H.; Lu, J. Ein neuer Ansatz basierend auf einem 1D + 2D Convolutional Neural Network und einem sich entwickelnden Fuzzy-System zur Diagnose von Herz-Kreislauf-Erkrankungen anhand von Herztonsignalen.** Appl. Acoust. **2024,** 216, **109723.** [CrossRef]
28. **Li, H.; Zhao, T. Ein dynamisches, ähnlichkeitsgewichtetes, sich entwickelndes Fuzzy-System für die Konzeptdrift von Datenströmen.** Inf. Sci. **2024,** 659, **120062.** [Querverweis]
29. **Gu, X.; Angelov, P.; Shen, Q. Halbüberwachtes, unscharf gewichtetes adaptives Boosting zur Klassifizierung.** IEEE Trans. Fuzzy Syst. **2024,** 32, **2318–2330.** [CrossRef]
30. **Cartagena, O.; Ožbot, M.; Sáez, D.; Škrjanc, I. Entwicklung eines Fuzzy-Vorhersageintervalls zur Fehlererkennung in einem Wärmetauscher.** Appl. Soft Comput. **2023,** 145, **110625.** [CrossRef]
31. **Shah, J.; Wang, W. Ein sich entwickelnder Neuro-Fuzzy-Klassifikator zur Fehlerdiagnose von Getriebesystemen.** ISA Trans. **2022,** 123, **372–380.** [CrossRef] [PubMed]
32. **Ye, F.; Perrett, J.; Zhang, L.; Laili, Y.; Wang, Y. Ein selbstentwickelndes System zur Roboter-Demontagesequenzplanung unter unsicheren Interferenzbedingungen.** Robot. Comput. Integr. Manuf. **2022,** 78, **102392.** [CrossRef]
33. **Ahwiadi, M.; Wang, W. Eine adaptive, sich entwickelnde Fuzzy-Technik zur Prognose dynamischer Systeme.** IEEE Trans. Fuzzy Syst. **2021,** 30, **841–849.** [CrossRef]
34. **Cordovil, L.; Coutinho, P.; Bessa, I.; Peixoto, M.; Palhares, R. Erlernen der ereignisgesteuerten Steuerung auf der Grundlage sich entwickelnder datengesteuerter Systeme Fuzzy-Granularmodelle.** Int. J. Robust Nonlinear Control **2022,** 32, **2805–2827.** [CrossRef]
35. **Rocha, M.; Alves, K.; Queiroz, E.; Oliveira, F.; Hell, M.; Aguiar, E. Thermische Modellierung von Leistungstransformatoren basierend auf der modifizierten Set-Membership-Evolving-Multivariable-Gauß-Verteilung und der Variable Step-Size-Evolving-Multivariable-Gauß-Verteilung.** J. Control Elektr . Syst. **2022,** 33, **1044–1055.**
36. **da Silva Júnior, GA; Silva, A. Eine einfache und effiziente inkrementelle Imputationsmethode für fehlende Daten zur Entwicklung von Neo-Fuzzy Netzwerk.** Evol. Syst. **2022,** 13, **201–220.** [CrossRef]
37. **Lughofer, E.; Pratama, M. Online-Sequenzielles Ensemble prädiktiver Fuzzy-Systeme.** Evol. Syst. **2022,** 13, **361–386.** [CrossRef]
38. **Gu, X.; Shen, Q. Ein selbstadaptives Fuzzy-Lernsystem zur Vorhersage von Streaming-Daten.** Inf. Sci. **2021,** 579, **623–647.** [CrossRef]
39. **Pratama, M.; Za'in, C.; Lughofer, E.; Pardede, E.; Rahayu, DA Skalierbares Lehrer-Forcing-Netzwerk für halbüberwachte große Datenströme.** Inf. Sci. **2021,** 576, **407–431.** [CrossRef]
40. **Gu, X. Mehrschichtiges Ensemble, das sich zu einem Fuzzy-Inferenzsystem entwickelt.** IEEE Trans. Fuzzy Syst. **2020,** 29, **2425–2431.** [CrossRef]
41. **Shaker, A.; Hüllermeier, E. TSK-Streams: Lernen von TSK-Fuzzy-Systemen für die Regression auf Datenströme.** Data Min. Knowl. Discov. **2021,** 35, **1941–1971.** [CrossRef]
42. **Ge, D.; Zeng, XJ Datenströme online lernen – Ein sich entwickelnder Fuzzy-System-Ansatz mit selbstlernenden/adaptiven Schwellenwerten.** Inf. 2020 , 507, **172–184.** [CrossRef]
43. **Júnior, S.; Oliveira Serra, G. Intelligente Prognose von Zeitreihen basierend auf einem sich entwickelnden verteilten Neuro-Fuzzy-Netzwerk.** Comput. Intell. **2020,** 36, **1394–1413.** [CrossRef]
44. **Alves, K.; Hell, M.; Oliveira, F.; Aguiar, E. Ein verbessertes partizipatives Lernen zur Entwicklung von Set-Membership mit Kernel-rekursiven kleinsten Quadraten, angewendet auf die thermische Modellierung von Leistungstransformatoren.** Electr. Power Syst. Res. **2020,** 184, **106334.** [CrossRef]
45. **Soares, E.; Angelov, P.; Gu, X. Autonomer Lern-Mehrfachmodell-Klassifikator nullter Ordnung zur Klassifizierung von Herztönen.** Appl Soft Comput. J. **2020,** 94, **106449.** [CrossRef]
46. **Blazic, S.; Skrjanc, I. Inkrementelles Fuzzy-C-Regressionsclustering aus Streaming-Daten zur Identifizierung lokaler Modellnetzwerke.** IEEE Trans. Fuzzy Syst. **2019,** 28, **758–767.** [CrossRef]
47. **Zhao, J.; Yang, L.; Wang, L.; Wang, W. Ein verallgemeinerter heterogener Fuzzy-Klassifikator vom Typ 2 und seine industrielle Anwendung.** IEEE Trans. Fuzzy Syst. **2019,** 28, **2287–2301.** [CrossRef]
48. **Garcia, C.; Esmin, A.; Leite, D.; Škrjanc, I. Evolvierbare Fuzzy-Systeme aus Datenströmen mit fehlenden Werten: Mit Anwendung auf zeitliche Mustererkennung und Kryptowährungsvorhersage.** Pattern Recognit. Lett. **2019,** 128, **278–282.** [CrossRef]
49. **Pires, D.; Serra, GO-Methodik zur Entwicklung von Fuzzy-Kalman-Filter-Identifikation.** Int. J. Control Autom. Syst. **2019,** 17, **793–800.** [Querverweis]
50. **Shahparast, H.; Mansoori, E.; Jahromi, M. AFCGD: Ein adaptiver Fuzzy-Klassifikator basierend auf Gradientenabstieg.** Soft Comput. **2019,** 23, **4557–4571.** [CrossRef]
51. **Maciel, L.; Ballini, R.; Gomide, F. Entwicklung von Fuzzy-Modellen zur Prognose von Renditekurven.** Int. J. Econ. Bus. Res. **2018,** 15, **290–311.** [Querverweis]
52. **Sa'ad, H.; Isa, N.; Ahmed, MM; Sa'd, A. Eine robuste Strukturidentifikationsmethode für sich entwickelnde Fuzzy-Systeme.** Expert Syst. Appl. **2018,** 93, **267–282.** [CrossRef]
53. **Za'in, C.; Pratama, M.; Lughofer, E.; Ferdaus, M.; Cai, Q.; Prasad, M. Big Data Analytics basierend auf PANFIS MapReduce.** Procedia 2018 , 144, **140–152.** [CrossRef]
54. **Andonovski, G.; Mušiÿc, G.; Blažiÿc, S.; Škrjanc, I. Entwicklung einer Modellidentifikation zur Prozessüberwachung und Vorhersage nichtlinearer Systeme.** Eng. Appl. Artif. Intell. **2018,** 68, **214–221.** [CrossRef]
55. **Abdullah, S.; AL-Hashmi, A. TiSEFE: Zeitreihen entwickelnde Fuzzy-Engine zur Klassifizierung des Netzwerkverkehrs.** Int. J. Commun. Netw. Inf. Secur. **2018,** 10, **116–124.** [CrossRef]
56. **Hu, Z.; Bodyanskiy, Y.; Tyshchenko, O.; Boiko, O. Adaptive Prognose nichtstationärer nichtlinearer Zeitreihen auf Basis der Entwicklung eines gewichteten Neuro-Neo-Fuzzy-ANARX-Modells.** arXiv **2016, arXiv:1610.06486.**

Machine Translated by Google

57. Pratama, M.; Lu, J.; Anavatti, S.; Lughofer, E.; Lim, CP Ein inkrementelles, auf Metakognitivismus basierendes, gerüstbildendes Fuzzy-Neuralnetzwerk. Neurocomputing **2016,** 171, **89–105.** [CrossRef]

58. Pratama, M.; Lu, J.; Lughofer, E.; Zhang, G.; Anavatti, S. Scaffolding Typ-2-Klassifikator für inkrementelles Lernen unter Konzeptdriften . Neurocomputing **2016,** 191, **304–329.** [CrossRef]

59. Alizadeh, S.; Kalhor, A.; Jamalabadi, H.; Araabi, B.; Ahmadabadi, M. Online-Auswahl lokaler Eingaben durch sich entwickelndes heterogenes Fuzzy-Inferenzsystem. IEEE Trans. Fuzzy Syst. **2016,** 24, **1364–1377.** [CrossRef]

60. Maciel, L.; Gomide, F.; Ballini, R. Entwicklung des Fuzzy-GARCH-Ansatzes für die Modellierung und Prognose finanzieller Volatilität. Comput. Econ. **2016,** 48, **379–398.** [CrossRef]

61. Iglesias, J.; Tiemblo, A.; Ledezma, A.; Sanchis, A. Web-News-Mining in einem sich entwickelnden Rahmen. Inf. Fusion **2016,** 28, **90–98.** [Querverweis]

62. Ahmed, MM; Isa, N. Entwicklung eines Output-Kontext-Fuzzy-Systems für eine effektive Regelbasis. Expert Syst. Appl. **2015,** 42, **1972–1986.** [Querverweis]

63. Ahmed, MM; Isa, N. Informationsgranularitätsmodell für sich entwickelnde kontextbasierte Fuzzy-Systeme. Appl. Soft Comput. J. **2015,** 33, **183–196.** [CrossRef]

64. Lughofer, E.; Cernuda, C.; Kindermann, S.; Pratama, M. Generalized smart developing fuzzy systems. Evol. Syst. **2015, 6, 269–292.** [Querverweis]

65. Moshtaghi, M.; Bezdek, J.; Leckie, C.; Karunasekera, S.; Palaniswami, M. Entwicklung von Fuzzy-Regeln zur Anomalieerkennung in Datenströmen . IEEE Trans. Fuzzy Syst. **2014,** 23, **688–700.** [CrossRef]

66. Ye. Bodyanskiy, A.; Vynokurova, O. Sich entwickelndes, spikendes Wavelet-Neuro-Fuzzy-Selbstlernsystem. Appl. Soft Comput. **2014,** 14, **252–258.** [CrossRef]

67. Jesús Rubio, J.; Pérez-Cruz, J. Entwicklung eines intelligenten Systems zur Modellierung nichtlinearer Systeme mit Totzonen-Eingang. Appl. Soft Comput. J. **2014,** 14, **289–304.** [CrossRef]

68. Iglesias, J.; Ledezma, A.; Sanchis, A. Entwicklung der Klassifizierung des Verhaltens von UNIX-Benutzern. Evol. Syst. **2014, 5, 231–238.** [CrossRef]

69. Pratama, M.; Anavatti, S.; Lughofer, E. Genefis: Auf dem Weg zu einem effektiven lokalistischen Netzwerk. IEEE Trans. Fuzzy Syst. **2013,** 22, **547–562.** [Querverweis]

70. Ramasso, E.; Gouriveau, R. Schätzung der Restnutzungsdauer durch Klassifizierung von Vorhersagen auf der Grundlage eines Neuro-Fuzzy-Systems und Theorie der Glaubensfunktionen. IEEE Trans. Reliab. **2014,** 63, **555–566.** [CrossRef]

71. Maciel, L.; Gomide, F.; Ballini, R. Verbesserte sich entwickelnde partizipatorische Lern-Fuzzy-Modellierung: Eine Anwendung für die **Volatilitätsprognose von Vermögensrenditen .** Evol. Syst. **2014, 5, 75–88.** [CrossRef]

72. Lemos, A.; Caminhas, W.; Gomide, F. Adaptive Fehlererkennung und -diagnose mithilfe eines sich entwickelnden Fuzzy- Klassifikators 220, **64–85. .** [CrossRef]

73. Ordóñez, FJ; Iglesias, J.; Toledo, P.; Ledezma, A.; Sanchis, A. Online-Aktivitätserkennung mithilfe sich entwickelnder Klassifikatoren. Expert Syst. Appl. **2013,** 40, **1248–1255.** [CrossRef]

74. Tung, S.; Quek, C.; Guan, C. eT2FIS: Ein sich entwickelndes neuronales Fuzzy-Inferenzsystem vom Typ 2. Inf. Sci. **2013,** 220, **124–148. .** [CrossRef]

75. Kalhor, A.; Araabi, B.; Lucas, C. Entwicklung eines Takagi-Sugeno-Fuzzy-Modells basierend auf dem Wechsel zu benachbarten Modellen. Appl. Soft Comput. J. **2013,** 13, **939–946.** [CrossRef]

76. Zarandi, M.; Hadavandi, E.; Turksen, I. Ein hybrides, fuzzy-intelligentes agentenbasiertes System zur Vorhersage von Aktienkursen. Int. J. Intell. Syst. **2012,** 27, **947–969.** [CrossRef]

77. Leng, G.; Zeng, XJ; Keane, J. Ein verbesserter Ansatz für ein selbstorganisierendes Fuzzy-Neuralnetz basierend auf Ähnlichkeitsmaßen. Evol. Syst. **2012, 3, 19–30.** [CrossRef]

78. Lasota, T.; Telec, Z.; Trawinski, B.; Trawinski, K. Untersuchung der eTS-Entwicklung von Fuzzy-Systemen in der Immobilienbewertung. J. -Mehrwertiges Log. Soft Comput. **2011,** 17, **229–253.**

79. Iglesias, J.; Angelov, P.; Ledezma, A.; Sanchis, A. Sich entwickelnde Klassifizierung des Verhaltens von Agenten: Ein allgemeiner Ansatz. Evol. Syst. **2010, 1, 161–171.** [CrossRef]

80. Angelov, P.; Kordon, A. Adaptive inferentielle Sensoren basierend auf sich entwickelnden Fuzzy-Modellen. IEEE Trans. Syst. Man, Cybern. Teil B Cybern. **2009,** 40, **529–539.** [CrossRef]

81. Ferdaus, MM; Dam, T.; Alam, S.; Pham, DT X-Fuzz: Ein sich entwickelnder und interpretierbarer Neurofuzzy-Lerner für Datenströme. IEEE Trans. Artif. Intell. **2024, 1–12.** [CrossRef]

82. Yan, L.; Zhao, T.; Xie, X.; Precup, RE OSSEFS: Ein online halbüberwachtes Ensemble-Fuzzy-System für Datenströme, die mit fehlende Werte. Expert Syst. Appl. **2024,** 255, **124695.** [CrossRef]

83. Hu, L.; Xu, X.; Ren, W.; Han, M. Hierarchisch evolvierendes Fuzzy-System: Eine Methode für mehrdimensionale chaotische Zeitreihen Online-Vorhersage. IEEE Trans. Fuzzy Syst. **2024,** 32, **3329–3341.** [CrossRef]

84. Mei, Z.; Zhao, T.; Gu, X. Ein dynamisches, sich entwickelndes Fuzzy-System zur Vorhersage von Streaming-Daten. IEEE Trans. Fuzzy Syst. **2024, 1–14.** [Querverweis]

Haftungsausschluss/Anmerkung des Herausgebers: Die in allen Veröffentlichungen enthaltenen Aussagen, Meinungen und Daten sind ausschließlich die der einzelnen Autoren und Mitwirkenden und nicht die von MDPI und/oder den Herausgebern. MDPI und/oder die Herausgeber lehnen jegliche Verantwortung für Personen- oder Sachschäden ab, die aus den im Inhalt erwähnten Ideen, Methoden, Anweisungen oder Produkten resultieren.

Machine Translated by Google

computation

MDPI

Artikel

Bewertung der Dynamik des psychologischen Panikfaktors, Glukoserisiko und Östrogeneffekte auf das Brustkrebsmodell

1 von 1 , Shireen Jawad 1Belal Batiha 2,Ali Hasan Ali 3,4,*, Firas Ghanim 5 und Alina Alb Lupaÿ 6,*

1 Fakultät für Mathematik, College of Science, Universität Bagdad, Bagdad 10071, Irak; zahraa.aamer1703a@sc.uobaghdad.edu.iq (ZA); shireen.jawad@sc.uobaghdad.edu.iq (SJ)
2 Fakultät für Naturwissenschaften und Informationstechnologie, Fachbereich Mathematik, Jadara University, Irbid 21110, Jordanien; b.bateha@jadara.edu.jo
3 Institut für Mathematik, Universität Debrecen, Pf. 400, H-4002 Debrecen, Ungarn
4 Jadara University Research Center, Jadara University, Irbid 21110, Jordanien
5 Fakultät für Mathematik, College of Sciences, Universität Sharjah, Sharjah 27272, Vereinigte Arabische Emirate; fgahmed@sharjah.ac.ae
6 Fakultät für Mathematik und Informatik, Universität Oradea, Universitatii-Straße 1, 410087 Oradea, Rumänien
*** Korrespondenz: ali.hasan@science.unideb.hu (AHA); ablupas@gmail.com (AAL)**

Zusammenfassung: Eine Krebserkrankung löst bei den Betroffenen typischerweise einen Zustand der Angst aus. Um Wege zu finden, die Ausbreitung von Krebs zu stoppen, muss untersucht werden, wie ein Überschuss an Glukose, ein Überschuss an Östrogen und Angst zusammenwirken, um die Geschwindigkeit zu beeinflussen, mit der sich Brustkrebszellen vermehren, und um das Reaktionsmodell des Immunsystems zu entwickeln. In diesem Artikel wird ein mathematisches Modell vorgeschlagen, um die Auswirkungen von psychologischer Panik, Glukoseüberschuss und Östrogenüberschuss auf die Wechselwirkung zwischen Krebs und Immunität zu untersuchen. Das vorgeschlagene Modell wird genau beschrieben. Der Schwerpunkt der dynamischen Analyse des Modells liegt auf der Identifizierung der potenziellen Gleichgewichtspositionen. Der Analyse zufolge ist es möglich, vier Gleichgewichtspositionen festzulegen. Die Stabilitätsanalyse zeigt, dass alle Gleichgewichtspunkte unter den definierten Bedingungen durchgängig Stabilität aufweisen. Die transkritische Bifurkation tritt auf, wenn der Glukoseüberschuss als Bifurkationspunkt betrachtet wird. Numerische Simulationen werden verwendet, um die theoretische Studie zu validieren, die zeigt, dass psychologische Panik, Glukoseüberschuss und Östrogenüberschuss e

Schlüsselwörter: psychologische Panik; Glukoserisiko; Östrogenwirkung; Brustkrebsmodell; Stabilitätsanalyse

Zitat: Aamer, Z.; Jawad, S.; Batiha, B.; Ali, AH; Ghanim, F.; Lupaÿ, AA Bewertung der Dynamik des psychologischen Panikfaktors, des Glukoserisikos und des Östrogens Auswirkungen auf das Brustkrebsmodell. ***Berechnung*** **2024,** ***12,*** **160. https://doi.org/10.3390/Berechnung12080160**

Wissenschaftlicher Redakteur: Simeone Marino

Empfangen: 23. Mai 2024
Überarbeitet: 12. Juli 2024
Akzeptiert: 2. August 2024
Veröffentlicht: 8. August 2024

Copyright: © 2024 bei den Autoren. Licensee MDPI, Basel, Schweiz.
Dieser Artikel ist ein Open Access-Artikel vertrieben unter den Bedingungen und Konditionen Bedingungen der Creative Commons Attribute-Lizenz (CC BY) (https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

1. Einleitung

Eine Gruppe von Erkrankungen, die zusammen als Krebs bezeichnet werden, sind solche, bei denen sich Zellen unkontrolliert schneller teilen als gesunde Zellen und das Potenzial haben, in andere Teile des Körpers zu metastasieren [1]. Den Daten zufolge betrug die Zahl der durch Krebs verursachten Todesfälle im Jahr 2010 etwa 8,2 Millionen. Es wird erwartet, dass die durch Krebs verursachte Sterblichkeitsrate stetig ansteigen wird und bis zum Jahr 2030 etwa 13 Millionen Todesfälle verursachen wird [2]. Brustkrebs ist die zweithäufigste Krebsart bei Frauen, neben vielen anderen Krebsarten nur übertroffen von Hautkrebs. Knapp 12 % der Frauen erkranken im Laufe ihres Lebens an invasivem Brustkrebs [3]. Es gibt drei primäre Risikofaktoren für Brustkrebs: genetische Faktoren (wie Familienanamnese), hormonelles Ungleichgewicht (nämlich Östrogen) und Umweltfaktoren (einschließlich Alkoholkonsum, schlechte Ernährung, Kontakt mit Giftstoffen, Rauchen usw.) [4]. Um das dynamische Verhalten von Krebszellen in Gegenwart verschiedener Reize zu untersuchen, wurden im Laufe der Jahre zahlreiche mathematische Modelle entwickelt. So entwickelten Dehingia et al. ein mathematisches Modell, um die Auswirkungen von Fettleibigkeit auf Tumorwachstum und Immunreaktion zu bewerten, wobei sie Fettleibigkeit als Risikofaktor in einer Studie betrachteten, die zeigte, dass das angesamm

Machine Translated by Google

Faktoren, die mit dem Überleben in Zusammenhang stehen [5]. Ein Anstieg des Östrogenspiegels könnte möglicherweise die Tumorbildung beschleunigen [6,7]. Sorofa et al. [8] untersuchten, wie Östrogen die Dynamik normaler Immunzellen und von Brustkrebs beeinflusst. Die Ergebnisse zeigten, dass erhöhte Östrogenspiegel die Entwicklung des Immunsystems verlangsamen und die Tumorentstehung fördern können.

Es wurde nachgewiesen, dass der Großteil der Energie für Brustkrebszellen aus der Glykolyse stammt, bei der Glukose im Laufe des Glykolyseprozesses zur Energiegewinnung in Laktat umgewandelt wird [9,10]. Mehrere Studien haben bestätigt, dass Krebszellen einen hohen Bedarf an Glukose als Nährstoffquelle haben. Daher wird die Wirkung von Glukose in das Tumormodell einbezogen, um seine Auswirkungen auf Brustkrebszellen zu beurteilen. So untersuchten Sun et al. beispielsweise die Auswirkungen von Glukosemangel auf die Apoptose von Brustkrebszellen in einer Studie, die zeigte, dass der Konsum einer übermäßigen Menge an Glukose die Entwicklung und Vermehrung von Krebszellen fördern kann, während die Einschränkung des Glukosekonsums das Wachstum von Krebszellen verringern und unterdrücken kann [11]. Ein pathologischer Zustand und eine beeinträchtigte Funktion des Immunsystems können die Folge einer hohen Glukoseaufnahme sein. Die Aufrechterhaltung einer ausreichenden Glukosemenge ist jedoch für die Funktion des Immunsystems von entscheidender Bedeutung. Infolgedessen kann das Eindringen einer erheblichen Menge an Glukose in Immunzellen schädliche Auswirkungen auf das Immunsystem haben. In der Folge kommt es zu einer Beeinträchtigung der Funktion des Immunsystems, welche pathologische Zustände au Alharbi et al. haben ein Modell entwickelt, das ein grundlegendes Verständnis des Prozesses von Brustkrebs bei Patienten bietet, die bereits Risikofaktoren im Zusammenhang mit Hyperglykämie aufweisen. Sie kamen zu dem Schluss, dass ihre Erkenntnisse für die zukünftige Bereitstellung und Behandlung von Brustkrebsmedikamenten von Vorteil sein könnten [13].

Andererseits wird in immer mehr Literatur die Verwendung mathematischer Modelle zur Untersuchung der Auswirkungen von Angst auf die Krankheitsübertragung hervorgehoben [14,15]. Forschungen im medizinischen Bereich haben gezeigt, dass emotionaler Stress die Metastasierung von Krebszellen bei einem Patienten beschleunigen kann. Stress auf psychologischer Ebene erweitert und verdickt die Blutgefäße, was wiederum die Migration von Krebszellen beschleunigt und die Ausbreitung der Neueren Forschungsergebnissen zufolge beschleunigen durch Stress produzierte Hormone das Wachstum von Krebszellen im „Lymphsystem“, was wiederum die Ausbreitung dieser Zellen in andere Teile des Körpers erleichtert, ein Prozess, der als Metastasierung bezeichnet wird [17–19].

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass die meisten bisherigen Untersuchungen gezeigt haben, dass eine Ernährung mit hohem Glukosegehalt und ein hoher Östrogenspiegel das Wachstum und die Vermehrung von Brustkrebszellen fördern und damit ein rasches Fortschreiten der Krankheit wahrscheinlicher machen können. Die Auswirkungen hoher Östrogen- und Glukosespiegel auf das menschliche Immunsystem waren dagegen Gegenstand sehr weniger Untersuchungen. Experimentelle Beweise deuten darauf hin, dass Immunzellen anfällig für die schädlichen Auswirkungen hoher oder niedriger Blutzuckerspiegel sowie hoher Östrogenspiegel sind [8,20]. Darüber hinaus mangelt es an Forschung über die Auswirkungen von Angst auf das Brustkrebsmodell von Immunzellen. Daher müssen wir dieses Phänomen untersuchen, da es eine Rolle bei der Minimierung des Auftretens katastrophaler Situationen spielt. Daher konzentriert sich diese Untersuchung auf die Untersuchung des Einflusses von Angst auf immungeschwächte Krebspatienten, die ein wesentlicher Faktor für die Vermehrung von Tumoren und die Beeinträchtigung der Wirksamkeit des Immunsystems sein können.

Ziel dieser Forschung ist es, die Dynamik des Immunzellen-Brustkrebs-Modells als Ergebnis des kombinierten Einflusses des psychologischen Panikfaktors, des erhöhten Glukosekonsums und des hohen Östrogenspiegels und ihrer schädlichen Auswirkungen auf normale, Krebs- und Immunzellen zu untersuchen. Unter Berücksichtigung dieser Auswirkungen schlagen wir ein PPIGCNE-Modell der Interaktion zwischen psychologischer Panik, Immun-Glukose, Krebs und normalem Östrogen vor. Die Ergebnisse dieses Papiers liefern zusätzlichen Kontext für [8] durch

(1) Analyse des Einflusses von Glukose als Risikofaktor auf die Entwicklung von Brustkrebs.

(2) Untersuchung des Einflusses psychologischer Panik auf das Immunsystem von Brustkrebspatientinnen, der eine Schlüsselrolle bei der Entwicklung von Malignomen und der Beeinträchtigung der Immunfunktion spielen könnte.

Machine Translated by Google

Nach einer Beschreibung der Konstruktion des Modells wollen wir feststellen, wie sich die oben genannten Effekte auf die Dynamik eines PPIGCNE-Modells auswirken. Darüber hinaus wird in diesem Artikel das Verständnis der nichtlinearen Dynamik untersucht, die unser Modell aufweist, und zwar durch die Verwendung verschiedener Methoden, darunter Stabilitäts- und Bifurkationsanalysetechniken. Abschließend werden wir die Genauigkeit unserer analytischen Ergebnisse durch eine numerische Simulation des vorgeschlagenen Systems validieren.

2. Annahmen des Modells

In diesem Teil werden wir durch die Integration vieler experimenteller Untersuchungen und mathematischer Modelle [21–23] ein Modell konstruieren, das die Dynamik der Tumorprogression aufklärt. Das Interaktionsmodell für psychische Panik, erhöhten Glukoseverbrauch und hohe Östrogenspiegel wird formuliert. Die Dynamik des PPIGCNE-Modells beeinflusst die Entwicklung von Brustkrebs erheblich und macht ihn zu einem wesentlichen Risikofaktor. Darüber hinaus analysieren wir die Wechselwirkungen der oben genannten Faktoren mit Brusttumorzellen. Die Beziehungen zwischen Immunzellen (), Krebszellen (), normalen (Brust-)Zellen () und der Wirkung von Östrogen () sind in Abbildung 1 dargestellt.

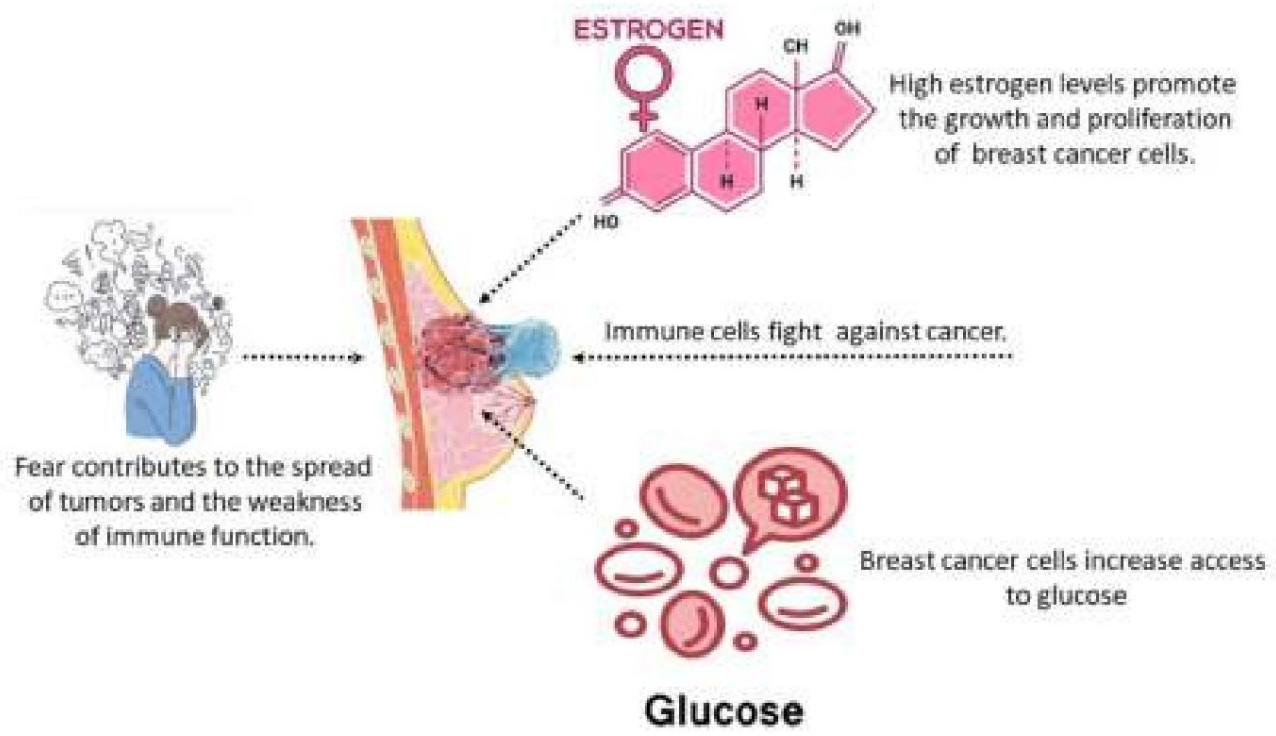


Abbildung 1. Schematische Skizze des PPIGCNE-Modells.

Die Reaktion des Immunsystems ist entscheidend, um das Brustgewebe vor bösartigen Tumoren zu schützen und eine angemessene Reaktion bei Erkennung von Tumorzellen sicherzustellen. Die Anwesenheit von Tumorzellen stimuliert die Aktivierung des Immunsystems. Die dynamische Darstellung von Immunzellen ist

$$\frac{}{} = \frac{\ddot{y}}{1+} + \frac{1}{1+} \quad 2 \quad 3 \quad \ddot{y}\,(+ \quad 1)\,. \tag{1}$$

Der Term ÿ (1 + ÿ) bezeichnet die kontinuierliche Bildung von Immunzellen im Organismus, die durch den psychologischen Angstfaktor bei Krebs negativ beeinflusst wird. Die Angstfunktion wird mithilfe der abnehmenden Funktion integriert), ein Konzept, das Wang et al. [24] erstmals vorgeschlagen haben. Angesichts (,) = 1 (1 + ÿ seiner biologischen Implikationen, (,) wird als geeignet erachtet, da

Machine Translated by Google

$$(0,) = 1, (, 0) = 1, \quad _{ÿÿ} (,) = 0, \quad _{ÿÿ} (,) = 0, \quad \frac{(,)}{} < 0, \quad \frac{(,)}{} < 0.$$

In (1) bezeichnet $1 ÿ(1 +)$, bezeichnet durch den Michaelis–Menten–Term [25], das Maß der von Tumorzellen, die eine Immunantwort auslösen [26]. 2

Einfluss von Tumorzellen auf Immunzellen durch Unterdrückung der Immunantwort mit Krebszellen [26]. bezieht sich auf die Rate der durch Östrogen induzierten Immunsuppression [8]. (+) bezieht sich auf den Rückgang von Immunzellen aufgrund von überschüssiger Glukose und natürlichem Tod [13]

Die Brustkrebszellen T(t) bestehen aus abnormen Zellen, die durch Entzündungen und schnelle Vermehrung von Brustzellen gekennzeichnet sind, was zur Bildung von Tumoren führt. Daher definieren wir die Gleichung, die den Tumor darstellt, wie folgt:

$$\frac{}{} = \quad _1 \quad (1 ÿ \quad _1 \quad)ÿ \quad _4 \quad + \quad _5 \quad \cdot \quad _2 \quad + . \qquad (2)$$

Der Begriff $) \quad _1 \quad (1 ÿ \quad _1$ steht für die logistische Wachstumsfunktion der Tumorzelle, wobei die intrinsische Wachstumsrate von Brustkrebs ist und für die Tragfähigkeit von Brustkrebszellen steht. Der Begriff $_1$ 4 bedeutet die Ausrottung von Krebszellen durch das körpereigene Immunsystem. Das Ergebnis einer durch Östrogen verursachten DNA-Schädigung ist, dass sich geschädigte normale Zellen in Tumorzellen verwandeln, wodurch die Tumorzellpopulation mit einer Rate von 5 zunimmt . Dies führt zu einem Wachstumsfaktor von 5 für die Tumorzellpopulation [8]. 2 bezeichnet die Sterberate von Brustkrebszellen. Zellen aufgrund erhöhter Glukosewerte im Körper der Patientin [13].

weist auf die Bildung von neuem Krebs hin

Gesunde Brustzellen besitzen unveränderte DNA, die die Aktivitäten aller Brustzellen während ihres Wachstums, ihrer Teilung und ihres Untergangs steuert [27]. Gesunde Brustzellen und bösartige Brustzellen konkurrieren um Nahrung und andere Ressourcen. Gesunde Brustzellen werden dargestellt durch

$$\frac{}{} = \quad _2 \quad (1 ÿ \quad _2 \quad)ÿ \quad _6 \quad \cdot \quad _7 \quad . \qquad (3)$$

Der Begriff $_2$ (1 ÿ $_2$) stellt die logistische Wachstumsfunktion gesunder Brustzellen dar. Die Begriff $_6$ stellt die Abbaurate gesunder Brustzellen durch Tumorzellen dar.
Der Rückgang gesunder Brustzellen aufgrund eines höheren Östrogenspiegels führt zur Umwandlung normaler Zellen in Tumorzellen, was mit einer Geschwindigkeit von [8] erfolgt.

Östrogen, ein weibliches Steroidhormon, wird in geringen Mengen von der Plazenta bei Frauen und den Hoden bei Männern produziert. Es erfüllt mehrere wichtige Aufgaben, darunter die Förderung der sexuellen Entwicklung, die Kontrolle des Menstruationszyklus einer Frau und die Bewältigung der körperlichen Veränderungen, die mit der Pubertät einhergehen. Daher gilt es als entscheidendes Hormon für die optimale Umwandlung des Brustgewebes. Östrogen gilt als Risikofaktor, der mit der Entstehung von Brustkrebs in Verbindung steht. Östrogen spielt eine Rolle bei der Aktivierung anderer Hormone wie Relaxin, das wiederum die Vermehrung von Brustzellen stimuliert [28]. Östrogen hat die Vermehrung von Tumorzellen gefördert, wenn Tumorzellen vorhanden sind. Es wirkt als Karzinogen, indem es DNA schädigt und normale Epithelzellen in krebsartige Tumorzellen umwande

$$\frac{}{} = ÿ \quad _3 \quad . \qquad (4)$$

wobei die Rate darstellt, mit der mehr Östrogen produziert wird, und die Rate, mit der $_3$ steht für Östrogen aus dem Körper ausgewaschen wird.

Nach sorgfältiger Bewertung dieser Faktoren schlagen wir den folgenden Satz von Differentialgleichungen vor, um das Verhalten von Brustkrebszellen zu bestimmen:

Machine Translated by Google

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} &= \frac{\ddot{y}}{1+} + \frac{1}{1+} \quad 2 \quad 3 \quad \ddot{y}\,(+ \quad 1), \\ \frac{d}{dt} &= 1 \quad (1\ddot{y} \quad 1)\ddot{y} \quad 4 \quad + \quad 5 \quad 2 \quad + \quad , \\ \frac{d}{dt} &= 2 \quad (1\ddot{y} \quad 2)\ddot{y} \quad 6 \quad 7 \quad , \\ \frac{d}{dt} &= \ddot{y} \quad 3 \quad . \end{aligned} \tag{5}$$

Die Parameter des Modells und ihre Interpretationen werden in Tabelle 1 erläutert.

Tabelle 1. Die Interpretationen der Parameter des PPIGCNE-Modells.

Parameter	Interpretation:	Werte	Einheit	Quelle
ÿ	Die Produktionsrate der Immunzellen des Körpers.	0,5	(Zellen/Tag)	[30]
	Psychische Panikattacken aufgrund von Krebs.	0,1	dimensionslos	Geschätzt
1	Elizitationsrate von Immunzellen durch Krebszellen.	0,1	1/(Zellen·Tag)	[30]
1	Halbwertszeit von Effektorzellen	0,4	(Tag)	[30]
2	Inaktivierungsrate von Immunzellen aufgrund der Einwirkung von Tumorzellen.	0,2	1/(Zellen·Tag)	[30]
3	Hemmung der Immunzellen durch hohen Östrogenspiegel.	0,09	1/(mg/dL·Tag) 1/	[8]
	Unterdrückung der Immunzellrate durch hohen Blutzucker.	0,2	(mg/dL·Tag)	[30]
1	Sterberate von Effektorzellen.	0,2	(Zellen/Tag)	[30]
1	Intrinsische Wachstumsrate von Brustkrebs.	0,4	(Zelle) 1/	[8]
1	Tragfähigkeit von Brustkrebszellen.	1.5		[8]
4	Die Geschwindigkeit, mit der Effektorzellen Tumorzellen eliminieren.	0,2	(Zellen·Tag) 1/	[30]
5	Die durch Östrogen verursachte Umwandlungsrate geschädigter normaler Zellen in Tumorzellen.	0,2	(ng/mL·Tag)	[8]
2	Sterberate von Brustkrebszellen.	0,05	(Zellen/Tag)	[8]
2	Intrinsische Wachstumsrate gesunder Brustzellen.	0,35	(Zelle/Tag)	[8]
2	Tragfähigkeit gesunder Brustzellen.	1	(Zelle)	[8]
6	Die Abbaurate gesunder Brustzellen durch Tumorzellen.	0,25	1/(Zellen·Tag)	[30]
7	Der Rückgang gesunder Brustzellen wird durch einen höheren Östrogenspiegel verursacht.	0,1	1/(ng/mL·Tag) ng/	[29]
	Die Rate der höheren Östrogenproduktion.	0,19	mL/Tag ng/	[8]
3	Die Auswaschrate von Östrogen aus dem Körper.	0,05	mL/Tag	[8]

3. Ergebnisse der dynamischen

Auswertung *3.1. Positivität und Beschränktheit der Lösung*

In den folgenden Theoremen werden die Positivität und die gleichmäßige Beschränkung aller Lösungen des PPIGCNE-Modells in sind bestätigt.

Satz 1. ***Alle Lösungen des PPIGCNE-Modells*** **( ), ( ), ( )** ***und*** **( )** ***mit den Anfangsbedingungen*** **((0), (0), (0), (0)) ÿ** ***sind positiv invariant.*** $^4_+$

Beweis von Theorem 1. Sei = (, , ,) ÿ und ( ) = [, ( ), ( ), 4( )] , wobei ( ): und ÿ + ÿ(+ 1 ( ), 2 3 4 + ÿ 4 4), = 1,2,3,4. Dann wird das PPIGCNE-System:

$$= ( ),$$

mit (0) = ((0), (0), (0), (0)) = 0 . Es ist klar, dass für jedes (0) ÿ dann [( )] ÿ 0 (für = $^4_+$, so dass = 0, 1,2,3,4). Nun gilt für jede Lösung von mit 0 ÿ $^4_+$, sagen wir ( ) = (; 0) ist so, dass ( ) ÿ Variante $^4_+$, für alle > 0. Somit ist das PPIGCNE-System positiv [31]. ÿ

Satz 2. *Alle Lösungen des PPIGCNE-Modells sind gleichmäßig beschränkt.*

Beweis von Theorem 2. Sei ((0), (0), (0), (0)) ÿ PPIGCNE, dann $^4_+$ eine Anfangsbedingung für die erhalten wir mit dem Bernoulli-Verfahren

$$\frac{d}{dt} = 2 \quad (1\ddot{y} \quad 2)\ddot{y} \quad 6 \quad 7 \quad \ddot{y} \quad 2 \quad (1\ddot{y} \quad 2) \ddot{y} ( ) \ddot{y} \quad \frac{1}{2 + (0)\ddot{y} \quad 2}$$

Daher,

$$\lim_{\ddot{y}\ddot{y}} \quad [( )] \ddot{y} \quad \frac{1}{2}.$$

Machine Translated by Google

Unter Anwendung der Standardvergleichstheorie [32] auf die letzte Gleichung des PPIGCNE erhalten wir

$$\lim_{ÿ ÿ} [\ (\ )]\ ÿ \quad \frac{}{3}$$

Aus der zweiten Gleichung des PPIGCNE erhalten wir

$$\frac{}{} = {}_{1}\ (1\ ÿ\ {}_{1}\ )ÿ\ {}_{4} + {}_{5}\ {}_{2} + ÿ\ {}_{1}\ {}_{11}\ {}^{2} + .$$

Mit dem Bernoulli-Verfahren erhalten wir

$$(\ )\ ÿ \quad \frac{{}_{1} +}{{}_{11}\ +\ )\ (0)\ ÿ(\ 1+\ ) + (\ 1}$$

Daher,

$$\lim_{ÿ ÿ} [\ (\ )]\ ÿ \quad \frac{1 +}{{}_{11}}.$$

Nun erhalten wir mit Hilfe der Standardvergleichstheorie [32]

$$\frac{}{} = \frac{ÿ}{1 +} + \frac{1}{{}_{1} +}\ \ {}_{2}\ \ {}_{3}\ \ ÿ\ (\ +\ \ {}_{1})\ ÿ\ ÿ\ ÿ\ (\ +\ \ \ {}_{1})$$

$$\lim_{ÿ ÿ} [\ (\ )]\ ÿ \quad \frac{ÿ}{(\ +\ \ {}_{1})}.$$

Daher ist der entsprechende Domänenbereich für das PPIGCNE-Modell

$$= \{(\ ,\ \ ,\ )\ ÿ \quad {}^{4}_{+} : (\ )\ ÿ \quad \frac{ÿ}{(\ +\ \ {}_{1})}, (\ )\ ÿ \quad \frac{1 +}{{}_{11}}, (\ )\ ÿ \quad \frac{1}{2}, (\ )\ ÿ \quad \frac{}{3}\}.$$

ÿ

3.2. Existenz von Gleichgewichten

Durch das Zurücksetzen der linken Seite des PPIGCNE-Modells auf Null werden die Lösungen der Modellgleichungen ins Gleichgewicht gebracht:

1. Tumor- und brustzellenfreier Gleichgewichtspunkt 1 . Es ist $= (\ ÿ, 0{,}0, ÿ\ )$**, wobei** $ÿ = \frac{ÿ\ \ {}_{3}}{{}_{3} +(\ +1\ )\ {}_{3}}$

und $ÿ = \frac{}{3}$ **wichtig zu erwähnen, dass der Ausdruck alle** $ÿ$ **bleibt konstant für**

Gleichgewichtspunkte, die $ÿ$ **in ihrer Zusammensetzung.**

Tumorfreier Gleichgewichtspunkt 2 $= (\ ÿ, 0, ÿ, ÿ\ )$**,** 2. **Wo** $= \frac{ÿs}{e3ÿ3+(g+ÿ1\ )s}$**, Und** $=$

$\frac{2\ \ 73}{22}$**. Für** > 0**, dann gilt**

$$_{2} > \frac{73} \tag{6}$$

Biologisch gesehen handelt es sich hierbei um einen gesunden Fall, da der Tumor verschwindet, während das Immunsystem und die normalen Zellen erhalten bleiben. Dieser Punkt wird durch Folgendes begründet: Der niedrige Östrogenspiegel führt dazu, dass die Tumorumgebung für Wachstum ungeeignet ist, was die Ausrottung der Krebszellen durch Immunzellen förd

3. Der brustzellenfreie Gleichgewichtspunkt $= (\ ÿ, ÿ, 0, ÿ\ )$**, wobei** $= \frac{1ÿ\ 11\ \ \ ÿÿ\ \ 2+}{4}$ **Und**

3 ist die Wurzel der folgenden Gleichung:

$$(\ ) = {}_{1}\ {}^{4} + {}_{2}\ {}^{3} + {}_{3}\ {}^{2} + {}_{4} + {}_{5},$$

Wo

$$_{1} = {}_{112},$$

$$_{2} = {}_{12} + {}_{112} + {}_{1121} + {}_{1133} + {}_{22} \quad {}_{2},$$

$$_{3} = {}_{11} \quad {}_{12} \quad {}_{121} \quad {}_{133} \quad {}_{111} + {}_{1211} \quad {}_{1133} + {}_{1131} \quad {}_{21} + {}_{22} + {}_{221} + {}_{233} + {}_{1} \quad {}_{2} \quad {}_{21} \quad {}_{33},$$

$$= ÿ\ {}_{4} \quad {}_{4} + {}_{11} \quad {}_{121} + \quad {}_{133} \quad {}_{1331} + {}_{11313} \quad {}_{21} + {}_{221} + {}_{33} + {}_{2} \quad {}_{2331} \quad {}_{1} \quad {}_{21} \quad {}_{33} \quad {}_{331},$$

$_{5} = [ÿ\ 4 \quad {}_{33}(1 \quad {}_{2} +)]\ 1$ **. Offensichtlich**

Machine Translated by Google

$(0) = (\quad)\quad 5,$

$= \ddot{y}_1(\quad) = \quad 1\ 1\quad 4 + \quad 2\ 1\quad 3 + \quad 3\ 1\quad 2 + \quad 4\ 1\quad + \quad 5,$

$4 \qquad\quad 1\quad\ ^3 + 3\quad 2\quad 2 + 2\quad 3\quad + \quad 4.$

Wenn also eines der folgenden Kriterien zutrifft, dann hat ( ) eine eindeutige positive Nullstelle, sagen wir = ÿ, im Intervall (0, 1) gemäß dem Zwischenwertsatz

$$(0) > 0, (\quad 1) < 0 \text{ und } \quad \ddot{y}(\quad) < 0, \tag{7}$$

$$(0) < 0, (\quad 1) > 0 \text{ und } \quad \ddot{y}(\quad) > 0 \tag{8}$$

Für $'$ **> 0, dann gilt**

$$> \quad 1, \tag{9}$$

Wo $\quad 1 = 1(1 \quad \ddot{y}\ 1) +$ **2. Biologisch gesehen wird dieser Punkt bei Zustand (9) als Glukoserisiko eingestuft. Dies liegt daran, dass der Glukosespiegel (g) höher ist als die Tumorwachstumsrate, was zu einem deutlich schnelleren Wachstum von Krebszellen als bei normalen Zellen führt. Durch die Ausbreitung des Tumors gerät die Patientin in eine ernste Situation, die letztlich entweder zu einer Mastektomie oder zum Tod der Patientin führt.**

4. Der koexistierende Punkt $4 = (\ddot{y} \quad , \ ^{\dot{y}}, \ ^{\dot{y}}, \ \ddot{y}),$ **wobei** $\ddot{y} \quad = \frac{23\dot{y}63 \qquad \ddot{y}\ddot{y}\quad 7}{22},$ $^{\dot{y}} =$

$\frac{1\quad \ddot{y}2 + 2\quad \ddot{y} + \quad 3}{4\quad ^{\dot{y}}},$ **Und**

$1\ ^{=\ddot{y}} \quad 1\,2\,1\,2,$

$2\ = \quad 2\,2(1 + \ddot{y}\,2)\,\ddot{y} + 7),$ **und** $\ddot{y} \quad 5\,6,$

$3\ ^{=\ddot{y}} \quad 5\,3(6$ **ist eine Wurzel der folgenden Gleichung**

$$(\quad) = \quad 1\ ^5 + (\quad 1 + \quad 2\ )\ ^4 + (\quad 2 + \quad 3\ )\ ^3 + (\quad 3 + \quad 5\ )\ ^2 + (\ddot{y}\quad 4 + \quad 4 + \quad 5) + \quad 4$$

Wo

$1\ ^{=\ddot{y}} \quad 2\,1,$

$2\ = \ddot{y}(1\,2 +)\,1 \qquad \frac{3}{3}\,\ddot{y}\,(1 + 2)\,2,$

$3\ = 1(1 = \ddot{y} \quad 1\,3\ \frac{}{3} \quad 1 \quad 1\,1) + 2(1\,1\,1), \quad 1\,2 \quad 3\ \frac{}{3}\,\ddot{y}\,\ddot{y}\,1)\,\ddot{y} \quad 2\,3,$

$4\ 3(1\,3 \quad \frac{}{3} + \quad 1 +$

$5\ = \ddot{y}\,2(1\,3 \quad \frac{}{3} + \quad 1 + \quad 1\,1) + 3(1 \quad 1\,2 \quad 3\ \frac{}{3}\,\ddot{y}\,\ddot{y}\,1).$

Deutlich,

$(0) = (\quad)\quad 4 > 0$

$= \ddot{y}_1(\quad) = \quad 5\,1\,1 + (\quad + 1\,4(\quad 2 \quad 4\,1 + (\quad + 2 + \quad 3\ )\ 3\,1 + (\quad)\ _{3\,2} + \quad 5\ )\ 2\,1 + (\ddot{y}) \quad 4 + \quad 4 + \quad 5) \quad 1 \quad 4$

$5 \qquad\quad 1 \quad\ ^4 \quad 1\ ) + 2\quad 3(\quad\ ^3 \quad +2\quad 3 \quad + 2(\quad 3 + \quad 5 + (\ddot{y} \quad 4 + \quad + 4 \quad 5 +).$

Wenn also die folgenden Kriterien gelten, dann hat ( ) eine eindeutige positive Nullstelle, sagen wir = im Intervall $^{\dot{y}}$**, (0, 1) gemäß dem Zwischenwertsatz**

$$(\quad 1) < 0 \text{ und } \quad \ddot{y}(\quad) < 0, \tag{10}$$

Für $^{\dot{y}}$ **> 0 und** $\ddot{y} > 0,$ **dann gilt**

$$2\,3 \quad > \quad 6\,3\ ^{\dot{y}} + \quad 7, \tag{11}$$

$$1\ ^{\ddot{y}2} + \quad 2\ ^{\dot{y}} + \quad 3 > 0. \tag{12}$$

Der Koexistenzpunkt bezeichnet das Stadium der Interaktion zwischen Immunzellen, bösartigen, normalen und Östrogenzellen. Jede Zelle befindet sich in dieser Phase in einem erbitterten Überlebenskampf. Das Auftreten eines Tumors löst die Aktivierung von Immunzellen aus.

Machine Translated by Google

3.3. Stabilitätsanalyse

Das lokale Stabilitätsverhalten um die vorherigen Gleichgewichtspunkte wird untersucht in dieser Abschnitt. Die Jacobi-Matrix des PPIGCNE-Modells kann wie folgt ausgedrückt werden:

$$= \begin{bmatrix} \frac{1}{} & \frac{1}{} & \frac{1}{} & \frac{1}{} \\ \frac{2}{} & \frac{2}{} & \frac{2}{} & \frac{2}{} \\ \frac{3}{} & \frac{3}{} & \frac{3}{} & \frac{3}{} \\ \frac{4}{} & \frac{4}{} & \frac{4}{} & \frac{4}{} \end{bmatrix} = ( )_{4\times4},$$

Wo $_{11} = \frac{1}{(1+)}$ $_{2}$ $_{3}$ $ÿ (+ 1),$ $_{12} = \frac{ÿÿ}{(1+)^{2}} + \frac{1\,1}{(1+)}$ $_{2},$ $_{13} = 0,$ $_{14} = ÿ_{3,21}$ $_{4,22} = 1 ÿ 2$ $_{11}$ $_{4}$ $_{2} +$, $_{23} = _{5,24} = _{5,31} = 0,$ $_{32} = _{6,33} = ÿ_{22}$ $_{22}$ $_{6}$ $_{7},$ $_{34} = ÿ_{7,41} = _{42} = _{43}$ *0,* $_{44} = ÿ_{3}.$

Die lokale Analyse des PPIGCNE-Systems an den drei oben genannten Gleichgewichtspunkten wird wie folgt berechnet:

(1) Die Jacobi-Matrix bei $_{1}$ **= (ÿ, 0,0,** $ÿ$ **) ist gegeben als:**

$$(_{1}) = \begin{bmatrix} _{3}^{ÿ} ÿ (+ 1) & \frac{1}{} \; _{2} & 0 & _{3} \\ 0 & _{1} & 0 & 0 \\ 0 & _{1}\,_{4}\,_{2} + & _{5}^{ÿ} & 0 \\ 0 & 0 & _{2}\,_{7}^{ÿ} & 0 \\ [\,0 & 0 & 0 & ÿ\,3ÿ\,] \end{bmatrix}$$

Die Eigenwerte von ($_{1}$ **) sind** $_{11} < 0.$ $_{13} = _{2}\,_{7}^{ÿ},$ $_{14} = ÿ_{3}$ **Dann,** $_{12} = _{1}\,_{4}\,_{2} +$, $_{3}^{ÿ} ÿ (+ 1) < 0,$ **ist lokal asymptotisch stabil, wenn**

$$_{2} < _{7}^{ÿ}, \quad (13)$$

$$< _{2} \quad (14)$$

Wo $_{2} = _{4} ÿ +$ $_{2} +$ **1. Bedingung (13) zeigt, dass eine Mastektomie durchgeführt werden kann, wenn die durch einen höheren Östrogenspiegel verursachte Abnahmerate gesunder Brustzellen höher ist als die intrinsische Wachstumsrate gesunder Brustzellen. Aus biologischer Sicht bedeutet Bedingung (14) außerdem, dass Krebszellen von ihrer Fähigkeit abhängig sind, Glukose aufzunehmen und sich zu reproduzieren. Folglich hemmt ein niedrigerer Glukosespiegel Krebszellen erheblich und verringert dadurch ihre Stärke und Fähigkeit zur** $_{2,1}$ **Ist Reproduktion und** $_{2},$ **Dann (** $_{1}$ **) hat den Eigenwert Null, was 1** zu **einer nichthyperbolischen Ausbreitung. Umgekehrt gilt für > einen Sattelpunkt. Für = Punkt.**

(2) Die Jacobi-Matrix bei $_{2}$ **= (ÿ, 0, ÿ, ÿ) ist gegeben als:**

$$(_{2}) = \begin{bmatrix} _{3}^{ÿ} ÿ (+ 1) ÿÿ + & \frac{1}{} \; _{2} & 0 & _{3} \\ 0 & _{1} & 0 & 0 \\ 0 & _{1}\,_{4}\,ÿÿ\,_{6}\,_{2} + & _{5}^{ÿ} & _{5} \\ [\,0 & 0 & _{2}\,ÿ\,_{22}\,_{7}^{ÿ} & _{7}\,_{3}\,] \end{bmatrix}$$

Die Eigenwerte von ($ÿ (+ 1) <$ $_{2}$ **) Sind**

$$_{21} = _{3}^{ÿ} 0,$$

$$_{22} + _{23} = (1 _{4} ÿÿ _{2} + + _{2} ÿ 2 _{22} _{7} ÿ),$$

$$_{22}\,_{23} = _{2} + ÿ_{21} _{122} _{27}^{ÿ} _{24} _{ÿ2} _{24}'' + _{47}^{ÿ} _{2} + _{22} _{222}$$

$$_{72}^{ÿ} + _{2} ÿ 2 _{22} _{7} _{56}^{ÿ},$$

$$_{24} = _{3}^{ÿ} < 0.$$

Machine Translated by Google

Das bedeutet 2 **ist ein lokal asymptotischer stabiler Punkt genau dann, wenn die folgenden Bedingungen erfüllt sind:**

$$< 3 \quad 22.23 > 0\}, \tag{15}$$

Wo $_3 = 2\ _{22}\ ' + 7\ ^{ÿ} + 4\ ÿ + 2\ ÿ\ (1 + 2).$

(3) Die Jacobi-Matrix bei $_3 = (ÿ, ÿ, 0, ÿ)$ **ist gegeben als:**

$$(\ _3) = \begin{bmatrix} \frac{1}{1+} & 2 & 3\ ÿ\ (+1) & \frac{ÿ}{(1+ÿ)^2} + \frac{1\ 1}{(1+ÿ)} & 2 & 0 & 3 \\ 4 & ÿ\ 2\ 1 & 1\ 1 & ÿÿ\ 4 & 2 + & 3 & 0 \\ 0 & 0 & & & 2 & 7 & 0 \\ 0 & 0 & & & 6\ 0 & & 3 \end{bmatrix}$$

Dann, $(\ _3)$ **hat die folgenden Eigenwerte**

$$_{31} + \ _{32} = (1\ _1 + \sqrt{\ \ } + 2\ _2 + 1\ 1)\ ÿ\ ÿ + 2 + 1 + \ _1\ ÿ\ (3\ ^{ÿ} + 4\ ÿ + 2),$$

$$_{31}.\ _{32} = (1\ _1 + \sqrt{\ \ }\ ' 2\ ' 3\ ^{ÿ}\ ÿ\ 1)\ (1 + \frac{1\ 1\ 4}{(1+ÿ)^2} + 2\ 4\ ÿ\ ÿ + ÿ\ 2\ 1\ 1\ ' 4\ ÿÿ\ ^{ÿÿ}\ 2 +)\ ÿ\ (1 + \frac{ÿ\ 4\ '}{ÿ})^2$$

$$_{33} = 2\ ' 6\ ' 7\ ^{ÿ},$$

$$_{43} = ÿ\ _3 < 0.$$

Das bedeutet 3 **ist ein lokal asymptotischer stabiler Punkt genau dann, wenn die folgenden Bedingungen gelten:**

$$_{31} + \ _{32} < 0 \text{ und } _{31}.\ _{32} > 0, \tag{16}$$

$$_2 > 6\ ' + 7\ ^{ÿ}. \tag{17}$$

(4) Die Jacobi-Matrix bei $_4 = (ÿ, ÿ, ÿ, ÿ)$ **kann wie folgt geschrieben werden:**

$$(\ _4) = \begin{bmatrix} & 12 & 0 & 14 \\ 21 & 22 & 23 & 24 \\ 0 & 32 & 33 & 34 \\ 11\ 0\ 0 & & 0\ ÿ & 3 \end{bmatrix},$$

Wo

$$_{11} = \frac{1\ ÿ}{1+ÿ}\ 2\ ÿ\ 3\ ÿ \quad _{1,12} = \frac{ÿÿ}{(1+ÿ)^2} + \frac{1\ 1\ ÿ}{(1+ÿ)^2}\ 2\ ÿ,$$

$$_{14} = ÿ\ 3\ ÿ, \ _{21} = ÿ\ 4\ ÿ, \ _{22} = 1\ ÿ\ 2\ 1\ 1\ ' 4\ ÿ\ 2 +, \ _{23} = 5\ ÿ,$$

$$_{24} = 5\ ÿ, \ _{32} = ÿ\ 6\ ÿ, \ _{33} = ÿ\ 2\ 2\ 2\ 2\ ' 6\ ÿ\ 7\ ÿ, \ _{34} = ÿ\ 7\ ÿ.$$

Die charakteristische Gleichung von $(\ _4)$ **kann wie folgt geschrieben werden:**

$$(- \ _3\ ÿ)(\ ^3 + \ _1\ ^2 + \ _2 + \ _3) = 0, \tag{18}$$

wobei $= ÿ$

$$_1 = (\ _{11} + \ = \ _{11}(\ = \ _{22} + \ _{33}),$$

$$_2 = \ _{11}(\ _{22}\ _{33} - \ _{23} + \ _{32} - \ _{22} - \ _{11} - \ _{33})ÿ + \ _{22}\ _{33} + \ _{23}\ _{32},$$

$$_3 = - \ _{23}\ _{32}),$$

$$ÿ = \ _{1\ 2} - \ _3 = ÿ(\ _{11} + \ _{23} - \ _{22} + \ _{33})[\ _{11}(\ _{23} + \ _{32} - \ _{22} - \ _{11} - \ _{33})ÿ + \ _{22}\ _{33} + \ _{23}\ _{32}]$$

$$ÿ(\ _{11}(\ _{22}\ _{33} - \ _{32})).$$

Machine Translated by Google

Nach der Routh-Hurwitz-Regel ist 4 also asymptotisch stabil, wenn

$$_1 > 0, \quad _2 > 0 \text{ und } ÿ > 0. \tag{19}$$

Um einen gesunden Zustand zu erreichen, werden wir die globale Stabilität rund um 2 untersuchen **um die Dynamik des PPIGCNE-Systems in Bereichen weit entfernt vom Gleichgewichtspunkt 2** zu erforschen .

Satz 3. $_2$ *ist global asymptotisch stabil, sofern die folgenden Bedingungen erfüllt sind:*

$$_2 \; ÿ \quad \{ \frac{^2_6}{4_{11}}, \frac{4\,^2_7}{3} \} \quad ÿ \; _4 \tag{20}$$

Wo $_4 =$ $\frac{\sqrt{\;}\;\sqrt{ÿ}\;^2}{\{4(\;_1 \quad _{11}\}, ÿ\;1\}.}$ $_3$ $_1, \frac{4\,^2_3}{3}$ $_3$

Beweis von Theorem 3. Betrachten wir die unten angegebene positiv definite Funktion:

$$= \frac{(ÿ\;ÿ)^2}{2} + + (ÿ \quad + ÿ\;ÿ 1 \; ln ÿ) \quad \frac{(ÿ \quad ÿ)^2}{2}.$$

Daher,

$$\sqrt{} = (\frac{ÿÿ}{1+} + \frac{1}{1+} \quad 2)(ÿ\;ÿ)ÿ \quad _3(ÿ \quad ÿ)(ÿ\;ÿ)ÿ(ÿ\;ÿ)_2 \quad (_3 \; ÿ + + \quad _1)$$
$$+ \quad _{11}{}^2 \quad _4 + \quad _5 \; (ÿ\;ÿ) + 6 \quad _5 \; ÿ(ÿ\;ÿ)ÿ \quad _2 +$$
$$2\,2(ÿ\;ÿ)^2 \quad (ÿ\;ÿ)ÿ \quad _7(ÿ \quad ÿ)(ÿ\;ÿ)ÿ \quad _3(ÿ \quad ÿ)^2$$

Daher,

$$\sqrt{} \quad \frac{\sqrt{\quad}}{ÿ + + \quad _1} \quad \sqrt{}(ÿ\;ÿ) + ÿ\,3\,\sqrt{}(ÿ \quad ÿ)]^2$$
$$ÿ\;ÿ\;[ÿ\,3 \quad \quad 2 \quad \quad 2$$
$$\sqrt{\quad} \quad \sqrt{}$$
$$\frac{\sqrt{\quad}}{2} \; \frac{\sqrt{}}{2}(ÿ\;ÿ) + ÿ\,3 \; \frac{\sqrt{}}{2}(ÿ \quad ÿ)]^2$$
$$ÿ\;[ÿ\,2\,2 \quad \quad 2$$
$$\frac{\sqrt{\quad}}{ÿ + + \quad _1} \quad \sqrt{} \quad \sqrt{}$$
$$ÿ\;[ÿ\,3 \quad \quad 2 \quad (ÿ\;ÿ) + ÿ\,1\,1 \quad 2]^2$$
$$\sqrt{\quad} \quad \sqrt{}$$
$$\frac{\sqrt{\quad}}{2} \; \frac{\sqrt{}}{2}(ÿ\;ÿ) + ÿ\,3 \; \frac{\sqrt{}}{2}(ÿ \quad ÿ) + \quad _5 \; (ÿ \quad ÿ)$$
$$ÿ\;[ÿ\,2\,2 \quad \quad 2$$
$$+ \quad _5 \; ÿ(ÿ\;ÿ) + ÿ \quad \quad _4 \quad \quad 2.$$

Dann kann < 0 unter den Bedingungen (20) in eine negativ definite Form umgewandelt werden. Daher ist eine Lyapunov-Funktion und $_1$ **ist ein GAS.** ÿ

Somit erfüllt der krebsfreie Steady State $_2$ **die Voraussetzungen für lokale Stabilität und macht den Punkt global stabil. Aus biologischer Sicht bezeichnet das Immunsystem den Prozess der selektiven Eliminierung von Tumorzellen, wenn die Bedingungen (20) erfüllt sind.**

Machine Translated by Google

3.4. Transkritische Bifurkation

Eine transkritische Bifurkation tritt auf, wenn zwei Gleichgewichtspunkte kollidieren und ihre Stabilität austauschen. In den folgenden Theoremen untersuchen wir die Möglichkeit einer transkritischen Spaltung. Viele Wissenschaftler verwenden Sotomayors Theorem, um die Existenz einer transkritischen Bifurkation TB zu bestimmen, siehe beispielsweise [31–38]. Für diese Bestimmung kann das PPIGCNE-Modell in die folgenden Vektorformen umformuliert werden:

$$\frac{d}{dt} = ( ) \text{ mit } = ( ) \text{ und } = \begin{pmatrix} 1(, , ,) \\ 2(, , ,) \\ 3(, , ,) \\ 4(, , ,)), \end{pmatrix}$$

wobei $= 1,2,3,4$ **die Gleichungen auf der rechten Seite des PPIGCNE-Systems sind. Wir haben die folgenden Ergebnisse bezüglich der lokalen Bifurkation um den brustzellenfreien Gleichgewichtspunkt** $_3$ **. Nun für einen von Null verschiedenen Vektor =** $(_{1,2,3,4})$ **:**

$$^2(,) = \begin{bmatrix} 2\left[\frac{1}{(1+)^2}\right]_{2]12} & _{314} & +\left[\frac{2}{(1+)^2}\right]_{3]2}^2 \\ \ddot{y}2_{12} & \ddot{y}24_{112} & +2_{534}^2 \\ _{623} & \ddot{y}2_{223} & \ddot{y}2_{734}^2 \\ [& 0 &] \end{bmatrix},$$

Der folgende Satz bestimmt die TB des PPIGCNE-Modells in der Nähe von $_3$ **.**

Satz 4. *Für =* $^{\ddot{y}}$*, das PPIGCNE-Modell, bei* $_3$ *hat eine transkritische Bifurkation, wenn folgende Bedingungen sind erfüllt*

$$_4\ddot{y}2 = {}_{11}{}^{'}$$
$$_1^{[1]}\ddot{y}\ \frac{11}{4} \qquad (21)$$
$$( )\,[2\ \ (\ _3,\ \ddot{y})(\ ,\ \ )]\ \ddot{y}\ 0\}.$$

Beweis von Theorem 4. Das PPIGCNE-Modell hat bei einen $_n$**, Eigenwert von Null, sagen wir** $_{31}$ **, bei =** $^{\ddot{y}}$**, wobei** $\ddot{y}$ **kann mit der folgenden Gleichung berechnet werden:**

$$_{31.32} = (1\ _1 + \frac{'}{\ddot{y}\ \ddot{y}\ 1)\ (1} \quad {}_2{}^{'} \quad {}_3{}^{\ddot{y}} \quad \ddot{y}\ 2_{11}{}^{'} \quad {}_{\ddot{y}\ddot{y}4}{}^{'} \quad {}_2 +)$$
$$\frac{\ddot{y}_4{}^{'}}{(1+\ddot{y})^2} + \frac{_{114}{}^{''}}{(1+\ddot{y})^2} + {}_{24}{}^{''} = 0.$$

Hier $_{31.32}$ **ist gegeben in der lokalen Stabilität von** $_3$**. Die Jacobi-Matrix** $\ddot{y}(_3) = (_3, \ddot{y})$**, wird:**

$$\ddot{y}(_3) = \begin{bmatrix} _{11} & \frac{\ddot{y}\ddot{y}}{(1+\ddot{y})\,2\,(1+\ddot{y})\,2} + \frac{11}{2}{}^{'} & 0 & {}_3{}^{'} \\ {}_4{}^{\ddot{y}} & {}_{22} & {}_5{}^{\ddot{y}} & 0 \\ 0 & 0 & 2\ \ddot{y}6_7{}^{\ddot{y}} & 0 \\ [\ 0 & 0 & 0 & {}_3\ ] \end{bmatrix},$$

Wo $_{11} = \frac{1}{1+}{}^{'}{}_2{}^{'}{}_3{}^{\ddot{y}}\ \ddot{y}\ (\ddot{y} + {}_1)$ **Und** $_{22} = \ddot{y}21_{11}{}^{'}{}_4\ddot{y} + {}_2{}^{\ddot{y}}$**. Jetzt, sei =** $(_1^{[1]}, _2^{[1]}, _3^{[1]}, 4\ [1])$ **und =** $(_1^{[1]}, _2^{[1]}, _3^{[1]}, [1])$ **stellen die Eigenvektoren dar entsprechend dem Nulleigenwert von** $\ddot{y}(_3)$ **und** $\ddot{y}(_3)$ **bzw. Direkte Berechnung tation ergibt =** $(1\ddot{y}2\ 1\ 1\ \frac{\ddot{y}\ddot{y}_4\ddot{y}+2\ddot{y}}{4}{}^{\ddot{y}}$**, 1,0,0) und =** $(1,\ 11\ \frac{}{4}{}^{\ddot{y}}{}_{,}\ \frac{\ddot{y}5^{\ddot{y}}11}{(2\ddot{y}\ddot{y}6\ \ddot{y}\ddot{y}\ 7\ \ddot{y})\,4}{}^{\ddot{y}}{}_{,}\ \frac{3}{3}{}^{'})$ **, Wo** $_2\ \ddot{y}\ \ddot{y}6_7{}^{\ddot{y}}\ \ddot{y}\ 0$**. Dann,**

Machine Translated by Google

$$= (,) = (1 \quad , \quad , \quad , \quad 4) = (\ddot{y} , \quad , 0,0) .$$

Also, $(\quad _3 , \quad \ddot{y}) = (\ddot{y}\ \ddot{y}, \ddot{y}, 0,0)$ **und daher**

$$( ) \quad (\quad _3 , \quad \ddot{y}) = (1, 11 \quad \frac{\ddot{y}\ 5 \quad \ddot{y} \quad 11}{(2\ddot{y}\ \ddot{y}6\ \ddot{y}\ddot{y} \quad 7\ \ddot{y}) \ 4} \quad \frac{3}{3}) (\ddot{y}\ \ddot{y}, \ddot{y}, 0,0) = \ddot{y}\ \ddot{y} + 11 \quad \frac{}{4}$$

$$( ) [\quad (\quad _3 , \quad \ddot{y})] = (1, 11 \quad \frac{\ddot{y}\ 5 \quad \ddot{y} \quad 11}{(2\ddot{y}\ \ddot{y}6\ \ddot{y}\ddot{y}\ 7\ \ddot{y}) \ 4} \quad \frac{3}{3}) (- \quad ^{[1]}_1 , 1,0,0) = \ddot{y} \quad _1[1] + \frac{11}{4}$$

$$( ) [2 \quad (\quad _{3,} \quad \ddot{y})(,)] = 2 (1 \quad [3] \ (11 \ \ddot{y}) \ 2 \ \ddot{y} \ 2) \ \ddot{y} \quad ^{[3]}_{(2} \quad 4 + \quad 1\ 1)) + (2\ddot{y} \ \frac{2}{(1+ \ddot{y}) \ 3} \quad \frac{2}{(1+ \ddot{y}) \ 3} \ ).$$

Daher sind die Anforderungen an die transkritische Bifurkation unter Bedingung 21 erfüllt. $\ddot{y}$

3.5. Numerische Simulation und Diskussion

Eine numerische Überprüfung ist für die Durchführung analytischer Studien unerlässlich. In diesem Abschnitt haben wir die Genauigkeit unserer analytischen Ergebnisse für das PPIGCNE-System mithilfe der Software MATLAB [39–44] visuell bestätigt. Die Simulationen wurden mit den in Tabelle 1 angegebenen Parameterwerten durchgeführt. Die Gleichgewichtswerte, die den in Tabelle 1 angegebenen Daten entsprechen, sind = 1,74, = 0,59 und $\ddot{y}$ **= 0,37. Siehe Abbildung 2.** $^{\ddot{y}}$ $^{\ddot{y}}$ **= 0,41,** $^{\ddot{y}}$

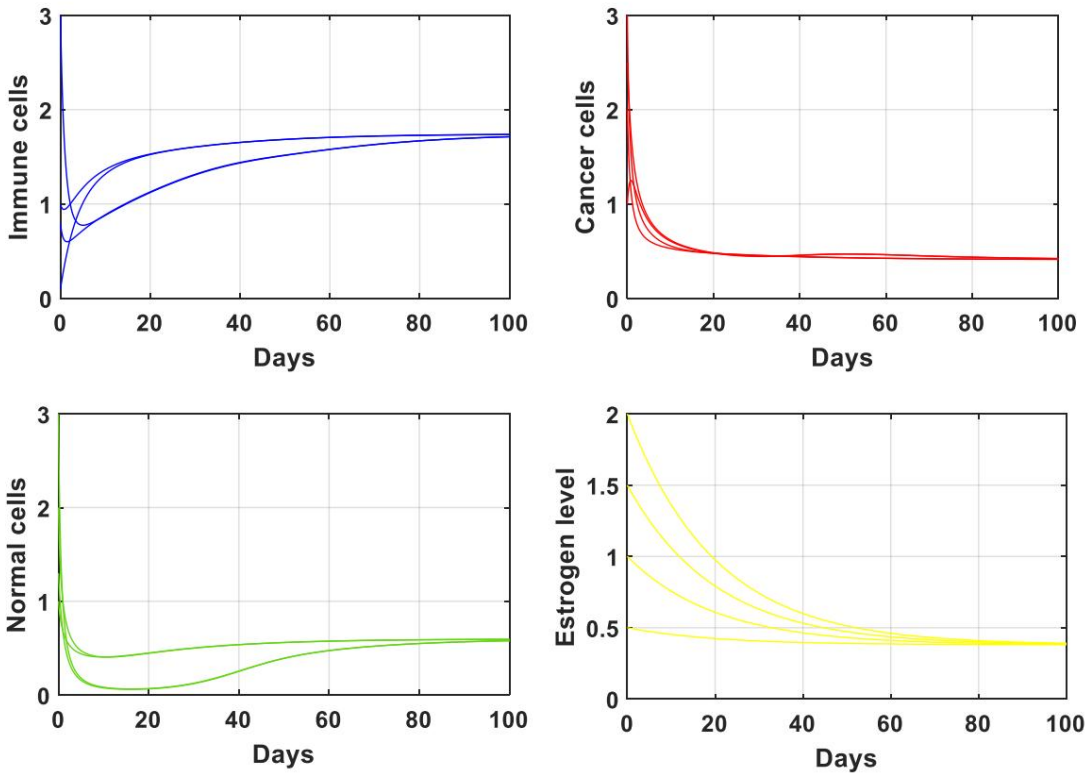


Abbildung 2. Die Lösung des PPIGCNE-Systems mit den Daten ist in Tabelle 1 angegeben. Die Anfangsbedingungen von Immunzellen, Brustkrebszellen, normalen Zellen und Östrogenspiegel sind (0) = 0,25, 0,75,1,3,2,7 (Zellen/ng), (0) = 0,8,1,4,1,6,2,4 (Zellen/ng), (0) = 0,94, 0,84 (Zellen/ng), 0,74,1,4, und (0) = 0,5, 1,1,5, 2 ng/ml.

Wir werden nun drei Szenarien untersuchen, um das dynamische Verhalten des PPIGCNE-Modells zu verstehen und die Auswirkungen des psychologischen Schreckens, hoher Östrogenspiegel und hoher Glukosespiegel auf das Tumorwachstum zu bewerten. Die Ergebnisse der drei Fälle werden dann verglichen. Die folgenden drei Fälle sind:

Machine Translated by Google

a) Die Wirkung einer psychologischen Panik

Das Ziel dieses Falls besteht darin, die Auswirkungen des Ausmaßes psychologischer Angst auf die Interaktion zwischen Immunzellen und Brustkrebszellen zu demonstrieren. Abbildung 3 erläutert die Leistung des PPIGCNE-Modells mit verschiedenen Werten der psychologischen Panikrate bei Krebs, d.ÿh. . Es wurde festgestellt, dass psychologische Panik sich negativ auf die Effizienz des Immunsystems auswirkt. Erhöhter Stress führt zu einem erheblichen Rückgang der Immunzellen. Infolgedessen wachsen die Tumorzellen schneller. Ungeachtet des bemerkenswerten Rückgangs der Wirksamkeit des Immunsystems erreichte das PPIGCNE-Modell trotz des Übermaßes an psychologischen Angstniveaus kein Chaos, näherte sich aber asymptotisch dem Koexistenzpunkt 4 . Darüber hinaus veranschaulicht Abbildung 4 die Auswirkungen psychischer Belastungen auf die Funktionalität der Immunzellen und die Rate des Wachstums und der Teilung bösartiger Zellen mit genauerer Darstellung. Um die Gesundheitsrisiken für Brustkrebspatientinnen zu mildern, ist eine psychiatrische Behandlung erforderlich. Darüber hinaus sind einige externe Strategien erforderlich, um die Leistung de

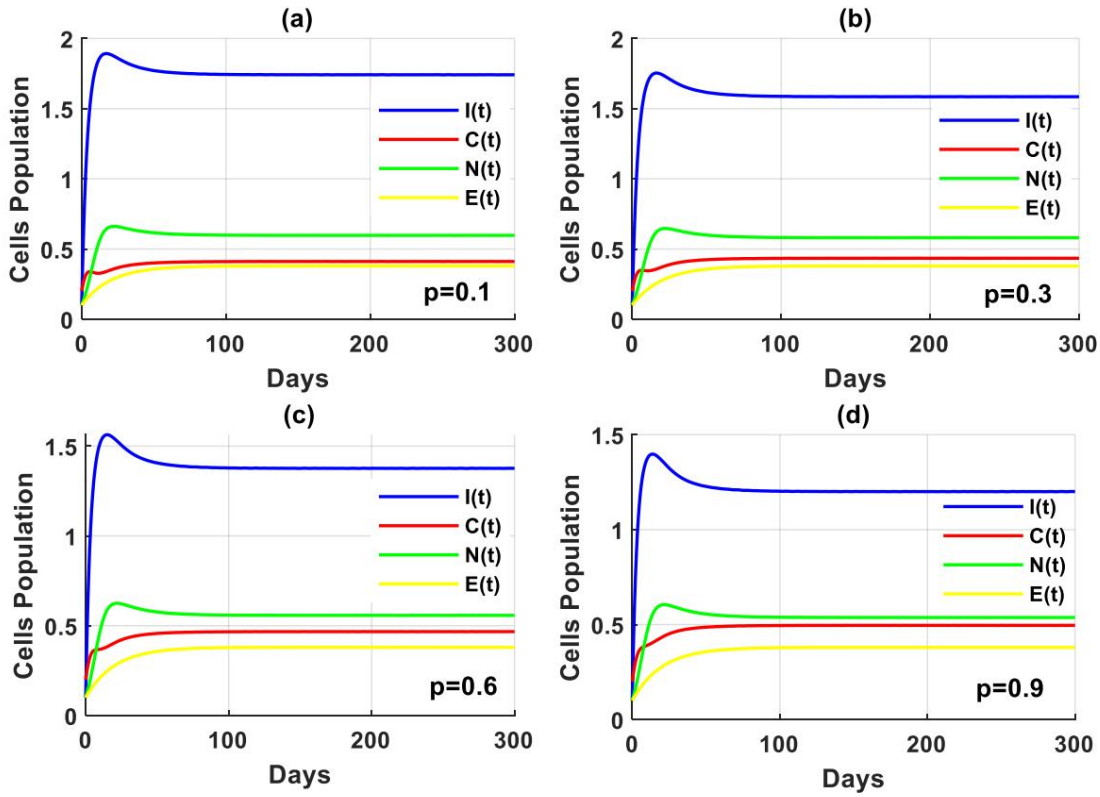


Abbildung *3*. Die Lösung des PPIGCNE-Systems mit verschiedenen Werten der psychologischen Angstrate und den Anfangsbedingungen von Immunzellen, Brustkrebszellen, normalen Zellen und Östrogenspiegel sind (0) = 0,25 (Zellen/ng), (0) = 0,3 (Zellen/ng), (0) = 0,3 (Zellen/ng) und (0) = 0,12 ng/ml.

Machine Translated by Google

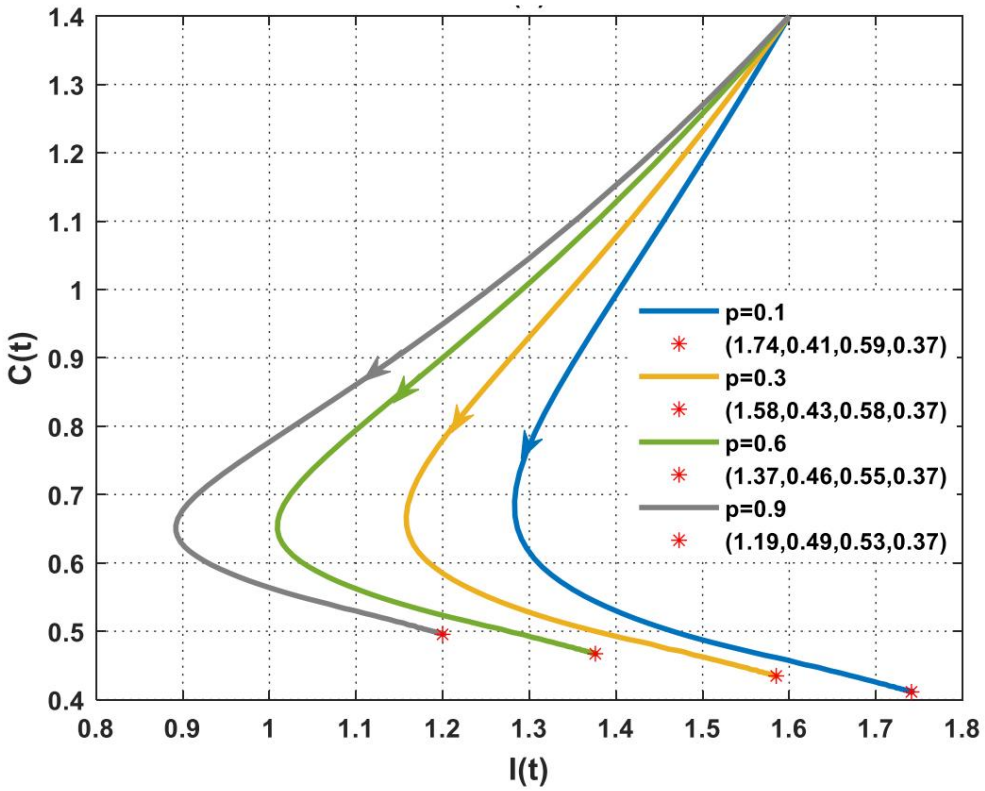


Abbildung 4. Die Dynamik von Immun- und Krebszellen mit verschiedenen Werten und den Anfangsbedingungen von Immunzellen, Brustkrebszellen, normalen Zellen und Östrogenspiegeln ist (0) = 1,6 (Zellen/ng), (0) = 1,4 (Zellen/ng), (0) = 0,8 (Zellen/ng) und (0) = 0,8 ng/ml. (ÿ) stellt den Endzustand der Lösung dar und die Zahl in der Klammer bezeichnet den Gleichgewichtspunkt bei verschiedenen Werten von .

(b) Die Auswirkungen eines

Glukoseüberschusses In Abwesenheit von Tumorzellen wurde beobachtet, dass ein Glukoseüberschuss die Funktionsfähigkeit des Immunsystems beeinträchtigt (Abbildung 5). Außerdem wächst die Lösung des PPIGCNE-Systems bei verschiedenen Werten zunächst, bevor sie asymptotisch zum freien Krebspunkt 2 konvergiert . **Darüber hinaus kam es in Gegenwart von Tumorzellen zu einem signifikanten Rückgang der Immunzellen, wie in Abbildung 6 dargestellt. Zudem fällt die Lösung des PPIGCNE-Systems infolge eines Glukoseüberschusses in Richtung der Brustzellen ab – = (ÿ, ÿ, 0, ÿ) = 3 bestätigt das Ergebnis von (0,51, 1,24, 0, 0,37) für ÿ 046 freier Gleichgewichtspunkt Dieses Ergebnis Theorem 4, der besagt, dass das PPIGCNE-System beim Glukoseparameter = 0,46 eine transkritische Bifurkation erfährt (siehe Abbildung 6). Die oben genannten Ergebnisse führen letztendlich entweder zum Tod der Patientin oder zu einer Mastektomie. Aus den Ergebnissen kann geschlossen werden, dass ein direkter Zusammenhang zwischen erhöhten Glukosewerten und der Verbreitung und Teilungsrate von Krebszellen besteht. Umgekehrt kann eine umgekehrte Beziehung zwischen erhöhten Glukosewerten und der Reaktion des Immunsystems zur Bekämpfung bösartiger Zellen beobachtet werden. Abbildung 7 gibt einen besseren Eindruck davon, was bei hohen Glukosewerten passiert, sowohl wenn keine als auch wenn Krebszellen vorhanden sind.**

Machine Translated by Google

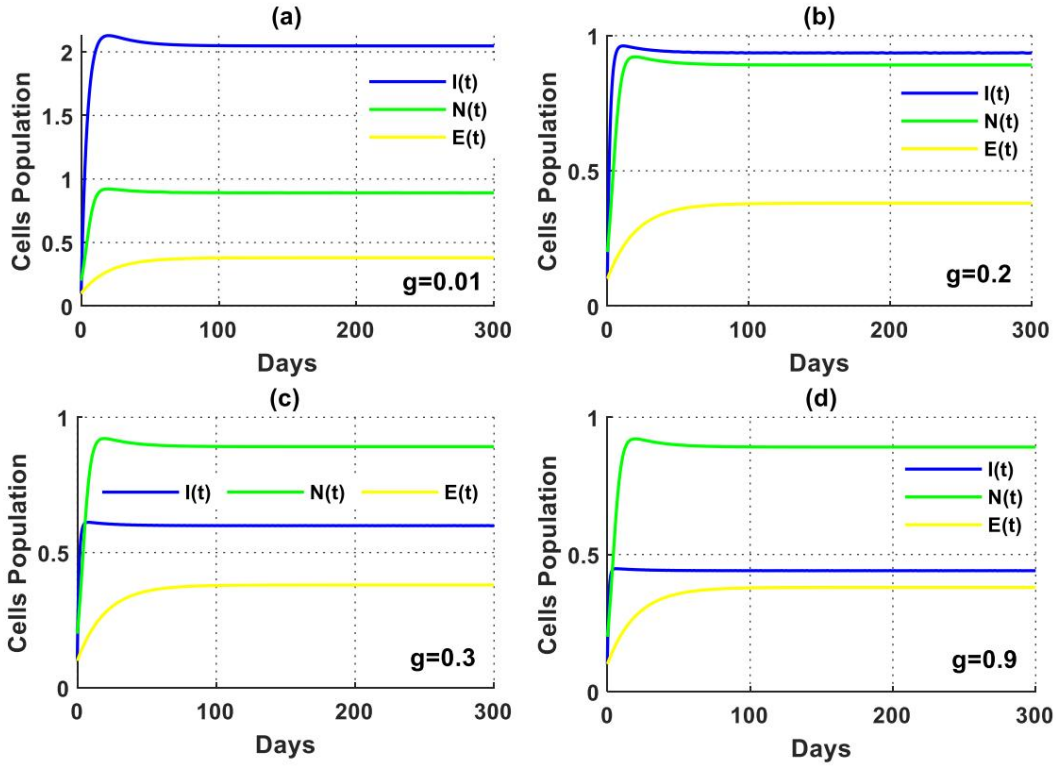


Abbildung 5. Die Lösung des PPIGCNE-Systems in Abwesenheit von Tumorzellen mit verschiedenen Werten und den Anfangsbedingungen von Immunzellen, Brustkrebszellen, normalen Zellen und Östrogenspiegel sind (0) = 0,25 (Zellen/ng), (0) = 0,3 (Zellen/ng) und (0) = 0,12 ng/ml.

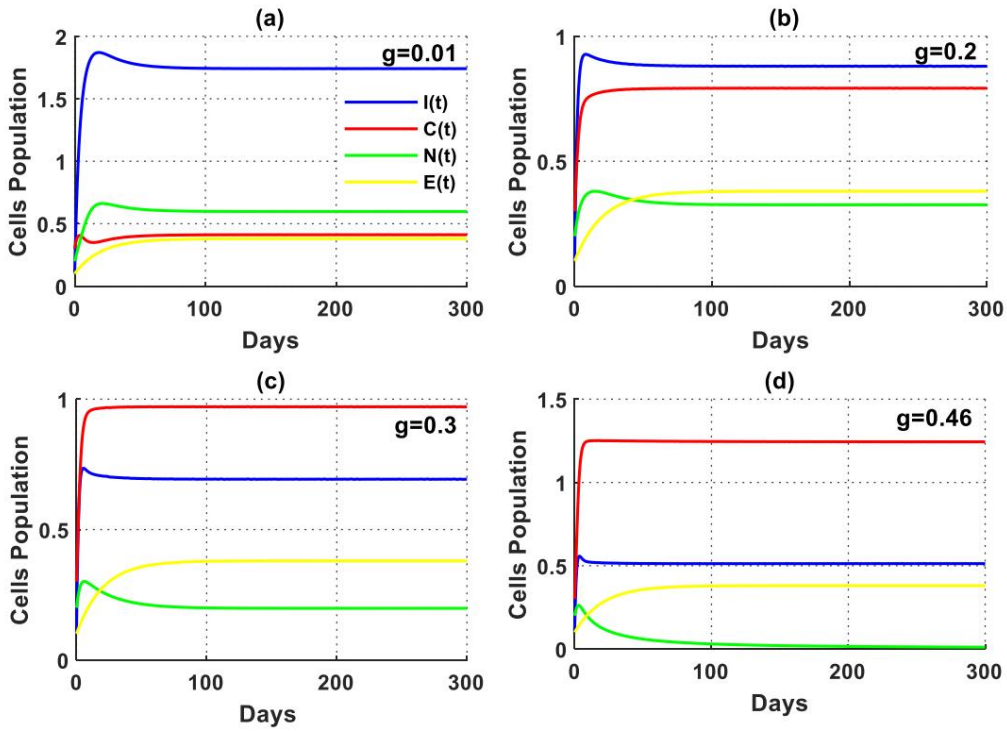
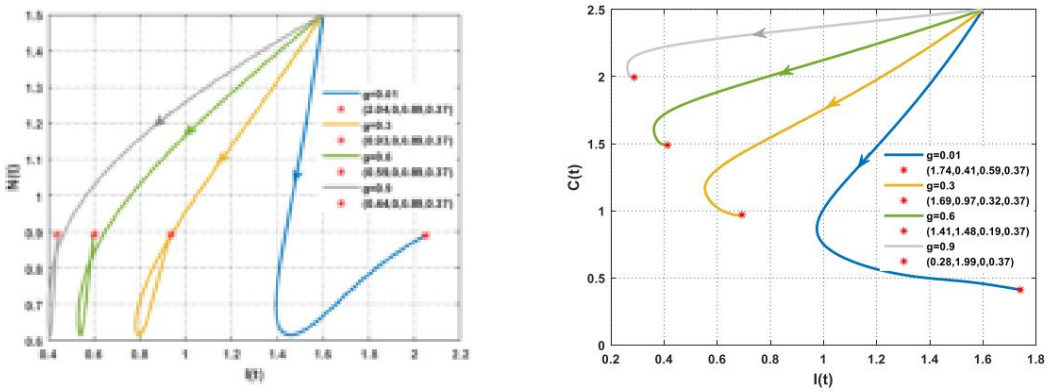


Abbildung 6. Die Lösung des PPIGCNE-Systems mit verschiedenen Werten und den Anfangsbedingungen von Immunzellen, Brustkrebszellen, normalen Zellen und Östrogenspiegel sind (0) = 0,25 (Zellen/ng), (0) = 0,3 (Zellen/ng), (0) = 0,3 (Zellen/ng) und (0) = 0,12 ng/ml.

Machine Translated by Google



(A) **(B)**

Abbildung 7. Die Leistung des PPIGCNE-Systems bei verschiedenen Werten von . (a) Die Dynamik von Immun- und normalen Zellen in Abwesenheit von Tumorzellen bei verschiedenen Werten von und den Anfangsbedingungen sind (0) = 1,6 (Zellen/ng), (0) = 1,4 (Zellen/ng), (0) = 1,5 (Zellen/ng) und (0) = 0,8 ng/ml. (b) Die Dynamik von Immun- und Krebszellen bei verschiedenen Werten von und den Anfangsbedingungen sind (0) = 1,6 (Zellen/ng), (0) = 2,4 (Zellen/ng), (0) = 1,5 (Zellen/ng) und (0) = 0,8 ng/ml.

(c) Die Auswirkungen eines

Östrogenüberschusses In diesem Szenario wird die Simulation durchgeführt, indem die Werte der Rate der höheren Östrogenproduktion sowohl in Abwesenheit als auch in Anwesenheit von Tumorzellen variiert werden. In Abwesenheit von Tumorzellen nähert sich die Lösung des PPIGCNE-Systems asymptotisch dem Gleichgewichtspunkt des freien Tumors (siehe Abbildung 8). In Gegenwart von Tumorzellen konvergiert die Lösung des PPIGCNE-Systems zum koexistierenden Punkt 4 wenn < 0,12. Für ÿ 0,12 stabilisiert sich die Lösung des PPIGCNE-Systems = (ÿ, ÿ, 0, asymptotisch zum brustzellenfreien Gleichgewichtspunkt (1,01, 0,41, 0, $_3$ ÿ) = 2,59). Siehe Abbildung 9. Die numerischen Lösungen zeigten im Allgemeinen, dass bei übermäßigem Östrogenüberschuss sowohl Immunzellen als auch normale Zellen abnehmen, wobei normale Zellen am stärksten betroffen sind (siehe Abbildung 10a), während Tumorzellen wachsen (

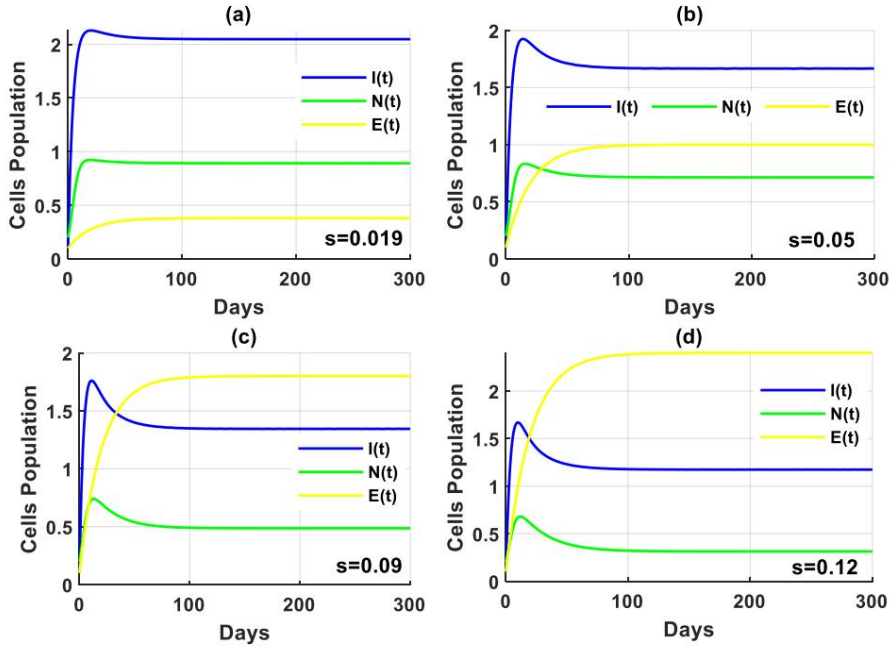


Abbildung 8. Die Lösung des PPIGCNE-Systems in Abwesenheit von Tumorzellen mit verschiedenen Werten und den Anfangsbedingungen von Immunzellen, Brustkrebszellen, normalen Zellen und Östrogenspiegel sind (0) = 0,25 (Zellen/ng), (0) = 0,3 (Zellen/ng) und (0) = 0,12 ng/ml.

Machine Translated by Google

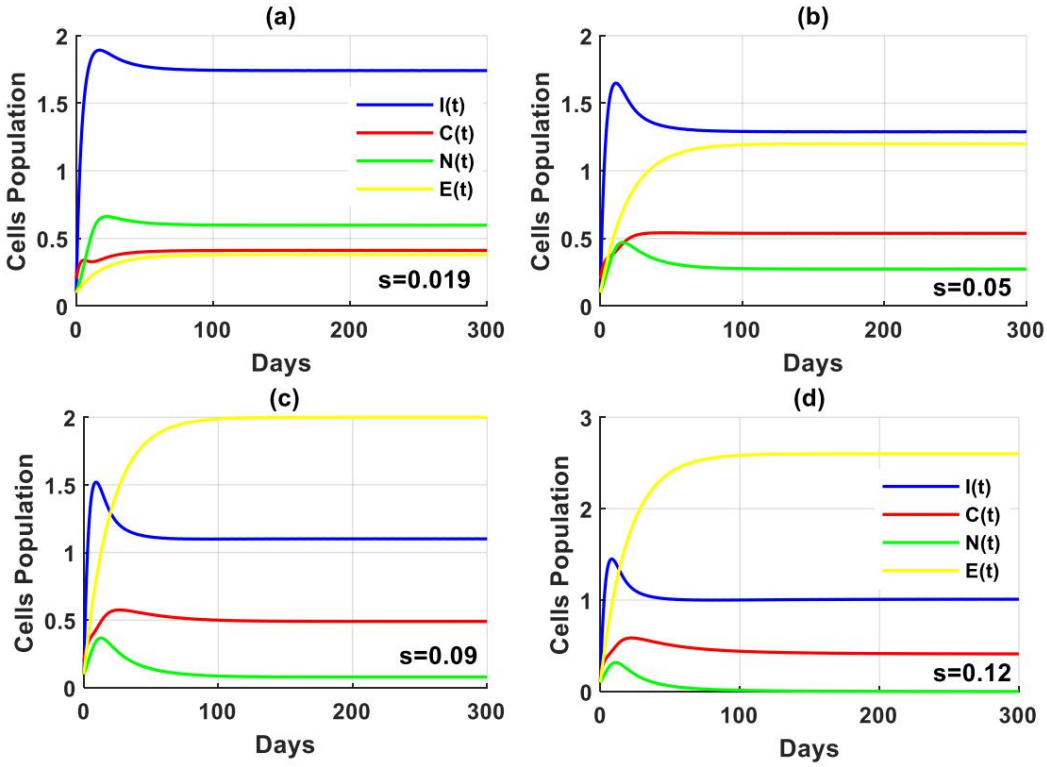
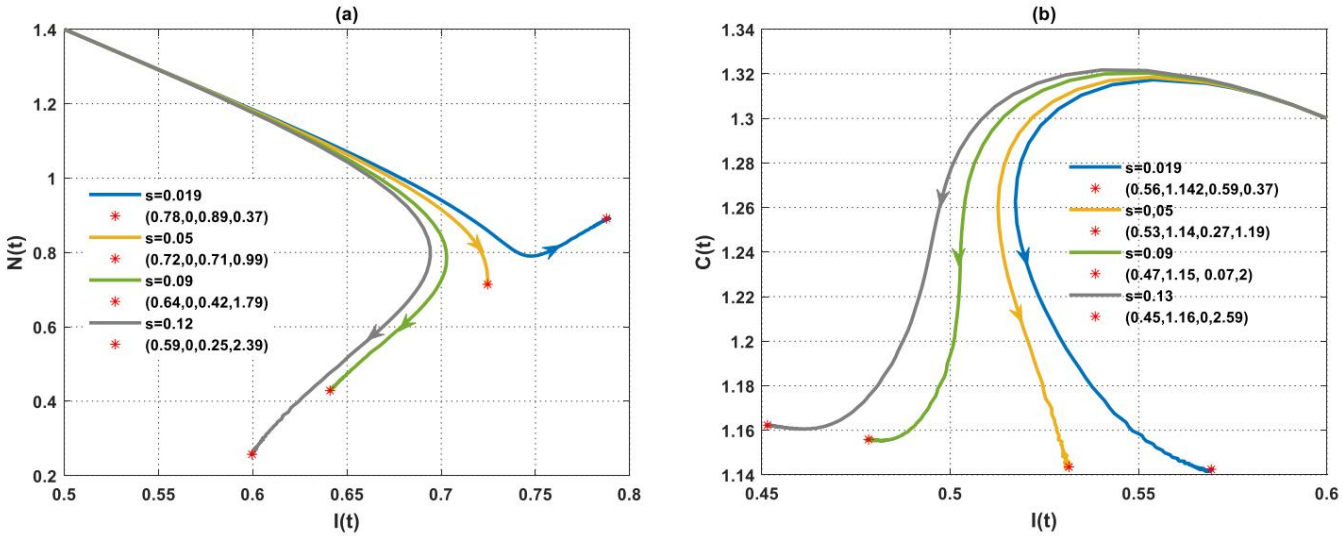


Abbildung 9. Die Lösung des PPIGCNE-Systems mit verschiedenen Werten und den Anfangsbedingungen von Immunzellen, Brustkrebszellen, normalen Zellen und Östrogenspiegel sind (0) = 0,25 (Zellen/ ng), (0) = 0,3 (Zellen/ng), (0) = 0,3 (Zellen/ng) und (0) = 0,12 ng/ml.



(A) **(B)**

Abbildung 10. Die Leistung des PPIGCNE-Systems bei verschiedenen Werten von . (a) Die Dynamik von Immun- und normalen Zellen in Abwesenheit von Tumorzellen bei verschiedenen Werten von und die Anfangsbedingungen sind (0) = 0,5 (Zellen/ng), (0) = 1,4 (Zellen/ng), (0) = 1,4 (Zellen/ng) und (0) = 0,8 ng/mL. (b) Die Dynamik von Immun- und Krebszellen bei verschiedenen Werten und den Anfangsbedingungen beträgt (0) = 0,6 (Zellen/ng), (0) = 1,3 (Zellen/ng), (0) = 1,4 (Zellen/ng) und (0) = 0,8 ng/ml.

Machine Translated by Google

Anmerkung 1. ***Die biologische Interpretation der Anfangswerte, die in einem Krebssystem kleiner als eins sind und die in den Abbildungen 2–10 verwendet wurden, bezieht sich auf einen Parameter, der mit der Entwicklung oder Ausbreitung von Krebszellen in Zusammenhang steht, wie etwa die Proliferationsrate oder den Wachstumsfaktor in einem mathematischen Modell. Wenn dieser Anfangswert kleiner als eins ist, ist die Zellteilung langsamer als der Tod der Krebszellen. Dies kann zunächst auf einen weniger aggressiven Krebs hindeuten (und*** **umgekehrt ,** ***wenn der Anfangswert größer als eins ist). Dieselbe Interpretation gilt für die übrigen Variablen.***

4. Schlussfolgerungen

Die Dynamik von Brustkrebs bei psychischer Angst sowie einem Überschuss an Glukose und Östrogen wurde in Form eines Systems von Differentialgleichungen dargestellt.
Die Positivität und Beschränktheit des vorgeschlagenen Systems wurden festgestellt. Existenzbedingungen und lokale Stabilität der möglichen Gleichgewichte wurden veranschaulicht. Die globale Stabilität um den Gleichgewichtspunkt des freien Brustkrebses wurde untersucht. Der notwendige Schwellenwert des Glukosespiegels zum Erreichen eines Gesundheitszustandes wurde bestimmt. Mathematisch gesehen entspricht dieser Schwellenwert einer transkritischen Bifurkation. Die numerischen Simulationen bestätigten die analytischen Ergebnisse. Genauer gesagt wurde der Schwellenwert für die transkritische Bifurkation berechnet, der den Punkt angibt, an dem normale Zellen (Brustzellen) vom Fortbestehen zum Aussterben übergehen. Die Entwicklung von Brustkrebs bei einem Individuum hängt von der Fähigkeit des Immunsystems ab, Tumorzellen zu bekämpfen. Es wurde festgestellt, dass ein Überfluss an Östrogen und Glukose im Körper zu Instabilität führt. Dies deutet darauf hin, dass ein Anstieg der Östrogen- und Glukosemenge zu einer höheren Tumorwachstumsrate führt und somit zur Entwicklung von Brustkrebs beiträgt. Man kann davon ausgehen, dass unregulierte Östrogen- und Glukosewerte zu einem Immunsystem führen können, das nicht in der Lage ist, Krebszellen wirksam zu bekämpfen, was zu einem Unvermögen führt, die Krankheit unter Kontrolle zu bringen. Die Ergebnisse dieser Forschung könnten möglicherweise zur Entwicklung eines optimalen Protokolls für die Krebstherapie führen, das Onkologen in ihrer Praxis enorm helfen würde.

Im Mittelpunkt unserer künftigen Forschung steht die Stärkung des Immunsystems durch regelmäßige Vitamineinnahme.

Beiträge der Autoren: Konzeptualisierung, ZA; Datenkuratierung, SJ; Formale Analyse, SJ; Mittelbeschaffung, AAL; Untersuchung, ZA und BB; Methodik, ZA und SJ; Projektverwaltung, AHA; Ressourcen, BB und AAL; Software, AHA; Überwachung, FG; Validierung, BB und FG; Visualisierung, AHA; Schreiben – Originalentwurf, ZA und SJ; Schreiben – Überprüfung und Bearbeitung, AHA, FG und AAL. Alle Autoren haben die veröffentlichte Version des Manuskripts gelesen und stimmen ihr zu.

Finanzierung: Die Veröffentlichung dieser Forschung wurde von der Universität Oradea unterstützt.

Erklärung des Institutional Review Board: Nicht zutreffend.

Einverständniserklärung: Nicht zutreffend.

Datenverfügbarkeitserklärung: Die Daten sind im Artikel enthalten.

Interessenkonflikte: Die Autoren erklären, dass keine Interessenkonflikte bestehen.

Verweise

1. **Abernathy, K.; Abernathy, Z.; Baxter, A.; Stevens, M. Globale Dynamik eines Brustkrebs-Wettbewerbsmodells.** *Differ. Gleichung Dyn. Syst.* **2020,** *28,* **791–805.**
2. **Weltgesundheitsorganisation.** *Globaler Aktionsplan zur Prävention und Kontrolle nichtübertragbarer Krankheiten 2013–2020;* **Welt Gesundheitsorganisation: Genf, Schweiz, 2013.**
3. **Tarver, T. Amerikanische Krebsgesellschaft. Fakten und Zahlen zum Thema Krebs 2014.** *J. Consum. Health Internet* **2012,** *16,* **366–367. 4. Patel, M.; Nagl, S.** *Die Rolle der Modellintegration in der Modellierung komplexer Systeme: Ein Beispiel aus der Krebsbiologie;* **Springer: Berlin/Heidelberg, Deutschland, 2010; ISBN 3642156037.**
5. **Dehingia, K.; Yao, S.-W.; Sadri, K.; Das, A.; Sarmah, HK; Zeb, A.; Inc, M. Eine Studie über ein Krebs-Adipositas-Behandlungsmodell mit quadratischer optimaler Kontrollansatz für bessere Ergebnisse.** *Results Phys.* **2022,** *42,* **105963.**
6. **Alnahdi, AS; Idrees, M. Nichtlineare Dynamik von Östrogenrezeptor-positivem Brustkrebs unter Einbeziehung experimenteller Daten: Ein räumlicher Modellierungsansatz.** *Math. Biosci. Eng.* **2023,** *20,* **21163–21186.**
7. **Miziak, P.; Baran, M.; Bÿaszczak, E.; Przybyszewska-Podstawka, A.; Kaÿafut, J.; Smok-Kalwat, J.; Dmoszyÿska-Graniczka, M.; Kielbus, M.; Stepulak, A. Östrogenrezeptor-Signalisierung bei Brustkrebs.** *Krebserkrankungen* **2023,** *15,* **4689.**

Machine Translated by Google

8. Mufudza, C.; Sorofa, W.; Chiyaka, ET Beurteilung der Auswirkungen von Östrogen auf die Dynamik von Brustkrebs. *Computermathematik. Methoden Med.* **2012,** *2012,* **473572.**

9. Almeida, L.; Denis, JA; Ferrand, N.; Lorenzi, T.; Prunet, A.; Sabbah, M.; Villa, C. Evolutionäre Dynamik von Glukose-armen Krebszellen: Erkenntnisse aus experimentell fundierter mathematischer Modellierung. *JR Soc. Interface* **2024,** *21,* **20230587.**

10. Barbosa, AM; Martel, F. Targeting glucose transporters for breast cancer therapy: The effect of natural and synthetic Verbindungen. *Cancers* **2020,** *12,* **154.**

11. Sun, S.; Sun, Y.; Rong, X.; Bai, L. Hoher Blutzucker fördert die Ausbreitung und Metastasierung von Brustkrebs durch Beeinträchtigung der Angiotensinogen Ausdruck. *Biowissenschaften. Rep.* **2019,** *39,* **BSR20190436.**

12. Shomali, N.; Mahmoudi, J.; Mahmoodpoor, A.; Zamiri, RE; Akbari, M.; Xu, H.; Shotorbani, SS Schädliche Auswirkungen hoher Glukosemengen auf das Immunsystem: Eine aktualisierte Übersicht. *Biotechnol. Appl. Biochem.* **2021,** *68,* **404–410.**

13. Alblowy, AH; Maan, N.; Alharbi, SA Rolle von Glukose-Risikofaktoren bei Brustkrebs beim Menschen: Eine nichtlineare dynamische Modellbewertung. *Mathematics* **2022,** *10,* **3640.**

14. Thirthar, AA; Abboubakar, H.; Khan, A.; Abdeljawad, T. Mathematische Modellierung der COVID-19-Epidemie mit Angstauswirkungen. *AIMS Math.* **2023, 8, 6447–6465.**

15. Doshi, D.; Karunakar, P.; Sukhabogi, JR; Prasanna, JS; Mahajan, SV Bewertung der Angst vor Coronaviren in der indischen Bevölkerung anhand von die Angst vor COVID-19-Skala. *Int. J. Ment. Health Addict.* **2021,** *19,* **2383–2391.**

16. Vrinten, C.; McGregor, LM; Heinrich, M.; von Wagner, C.; Waller, J.; Wardle, J.; Black, GB Wovor haben die Menschen Angst vor Krebs? Eine systematische Überprüfung und Metasynthese von Krebsängsten in der Allgemeinbevölkerung. *Psycho-Oncology* **2017,** *26,* **1070–1079.**

17. Niknamian, S. Der Einfluss von Stress, Angst, Furcht und Depression auf die Entstehung von Krebs beim Menschen. *Am. J. Biomed. Sci. Res.* **2019, 3, 363–370.**

18. Gormley, M.; Knobf, MT; Vorderstrasse, A.; Aouizerat, B.; Hammer, M.; Fletcher, J.; D'Eramo Melkus, G. Untersuchung der Auswirkungen genomischer Tests auf die Angst vor einem erneuten Krebs bei Brustkrebsüberlebenden. *Psycho-Oncology* **2021,** *30,* **1322–1331.**

19. Lebel, S.; Tomei, C.; Feldstain, A.; Beattie, S.; McCallum, M. Lässt die Angst vor einem Rückfall einen Rückfall auf die Gesundheitsversorgung von Krebsüberlebenden vermuten? verwenden? *Unterstützung. Care Cancer* **2013,** *21,* **901–906.**

20. Von Ah Morano, AE; Dorneles, GP; Peres, A.; Lira, FS Die Rolle der Glukosehomöostase auf die Immunfunktion als Reaktion auf körperliche Betätigung: Der Einfluss von Bedingungen mit niedriger oder höherer Energie. *J. Cell Physiol.* **2020,** *235,* **3169–3188.**

21. Jawad, S.; Winter, M.; Rahman, Z.-ASA; Al-Yasir, YIA; Zeb, A. Dynamisches Verhalten eines Krebswachstumsmodells mit Chemotherapie und Stärkung des Immunsystems. *Mathematics* **2023,** *11,* **406.**

22. Tang, T.-Q.; Shah, Z.; Bonyah, E.; Jan, R.; Shutaywi, M.; Alreshidi, N. Modellierung und Analyse von Brustkrebs mit Nebenwirkungen einer Chemotherapie durch fraktionale Ableitung. *Comput. Math. Methods Med.* **2022,** *2022,* **5636844.**

23. Alharbi, SA; Rambely, AS Ein neues ODE-basiertes Modell für Tumorzellen und Immunsystemwettbewerb. *Mathematik* **2020, 8, 1285.**

24. Wang, X.; Zanette, L.; Zou, X. Modellierung des Angsteffekts bei Raubtier-Beute-Interaktionen. *J. Math. Biol.* **2016,** *73,* **1179–1204.**

25. Kuznetsov, VA; Makalkin, IA; Taylor, MA; Perelson, AS Nichtlineare Dynamik immunogener Tumoren: Parameter Schätzung und globale Bifurkationsanalyse. *Bull. Math. Biol.* **1994,** *56,* **295–321.**

26. De Pillis, LG; Radunskaya, A. Ein mathematisches Tumormodell mit Immunresistenz und Arzneimitteltherapie: Ein optimaler Kontrollansatz. *Comput. Math. Methods Med.* **2001, 3, 79–100.**

27. Gatenby, RA Die mögliche Rolle von Transformation-induzierten metabolischen Veränderungen in der Tumor-Wirt-Interaktion. *Cancer Res.* **1995,** *55,* **4151–4156.**

28. Abdulkream Alharbi, S.; Dehingia, K.; Jahman Alqarni, A.; Alsulami, M.; Al Qarni, AA; Das, A.; Hinçal, E. Eine Studie über ODE-basiertes Modell des Brustkrebsrisikos in Abhängigkeit von der Körpermasse. *Appl. Math. Sci. Eng.* **2023,** *31,* **2259059.**

29. Ouifki, R.; Oke, SI Mathematisches Modell für das Östrogenparadoxon bei der Behandlung von Brustkrebs. *J. Math. Biol.* **2022,** *84,* **28.**

30. Das, A.; Dehingia, K.; Ray, N.; Sarmah, HK Stabilitätsanalyse eines gezielten Chemotherapie-Krebsmodells. *Mathe. Modell. Kontrolle* **2023, 3, 116–126.**

31. Sahoo, B.; Poria, S. Modell eines kranken Beutetiers mit Interaktionen vom allgemeinen Holling-Typ. *Appl. Math. Comput.* **2014,** *226,* **83–100.**

32. Hubbard, JH; West, BH *Differentialgleichungen: Ein dynamischer Systemansatz: Gewöhnliche Differentialgleichungen;* **Springer: Berlin/Heidelberg, Deutschland, 2013; Band 5.**

33. Alebraheem, J.; Ibrahim, TQ; Arif, GE; Hamdi, AA; Bazighifan, O.; Ali, AH Die stabilisierende Wirkung der Einwanderung kleiner Beutetiere zur kompetitiven Räuber-Beute-Dynamik. *Math. Comput. Model. Dyn. Syst.* **2024,** *30,* **605–625.**

34. Ahmed, M.; Jawad, S. Bifurkationsanalyse der Rolle guter und schlechter Bakterien bei der Zersetzung von Toxinen im Darm unter Berücksichtigung der Auswirkungen von Antibiotika und Probiotika. In *AIP Conference Proceedings;* **AIP Publishing: Melville, NY, USA, 2024; Band 3097.**

35. Bassim, WB; Salem, AJ; Ali, AH Eine neue analytische Studie dynamischer Systeme von Beute und Raubtier unter Einbeziehung der Auswirkungen von Verstecken und - Verbesserung der Flucht- und Raubfähigkeiten. *Ergebnisse Control Optim.* **2024,** *16,* **100449.**

36. Thirthar, AA; Jawad, S.; Majeed, SJ; Nisar, KS Einfluss von Windströmungen und globaler Erwärmung auf die Beute-Raubtier-Dynamik Modell. *Ergebnisse Control Optim.* **2024,** *15,* **100424.**

37. Jawad, SR; Al Nuaimi, M. Persistenz- und Bifurkationsanalyse bei Interaktionen zwischen vier Arten unter dem Einfluss von Konkurrenz, Raub und Ernte. *Iraqi J. Sci.* **2023,** *64,* **1369–1390.**

38. Hassan, SK; Jawad, SR Die Auswirkung gegenseitiger Interaktion und Ernte auf das Nahrungskettenmodell. *Iraqi J. Sci.* **2022,** *63,* **2641–2649.**

Machine Translated by Google

39. Thirthar, AA; Jawad, S.; Shah, K.; Abdeljawad, T. Wie wirkt sich die Medienberichterstattung auf ein COVID-19-Pandemiemodell mit direktem und indirekte Übertragung? *J. Math. Comput. Sci.* **2024,** *35,* **169–181.**

40. Ali, A.; Jawad, S. Stabilitätsanalyse des Abbaus von gelöstem Sauerstoff für das Phytoplankton-Zooplankton-Modell in einem aquatischen Umwelt. *Iraqi J. Sci.* **2024,** *65,* **2736–2748.**

41. Mondal, B.; Thirthar, AA; Sk, N.; Alqudah, MA; Abdeljawad, T. Komplexe Dynamik in einem Zwei-Arten-System mit Crowley–Martin-Antwortfunktion: Rolle von Kooperation, zusätzlicher Nahrung und saisonalen Störungen. *Math. Comput. Simul.* **2024,** *221,* **415–434.**

42. Pakhira, R.; Mondal, B.; Thirthar, AA; Alqudah, MA; Abdeljawad, T. Entwicklung einer auf Fuzzy-Logik basierenden Integriertes Inventarmodell mit Memory-Effekten. *Ain Shams Eng. J.* **2024,** *15,* **102746.**

43. Thirthar, AA Eine mathematische Modellierung einer Pflanzen-Pflanzenfresser-Gemeinschaft mit zusätzlichen Auswirkungen der Nahrung auf die Umwelt. *Iraqi J. Sci.* **2023,** *64,* **3551–3566.**

44. Sk, N.; Mondal, B.; Thirthar, AA; Alqudah, MA; Abdeljawad, T. Bi-Stabilität und Tri-Stabilität in einem deterministischen Beute-Raubtier-Modell: Übergänge und emergente Muster in seinem stochastischen Gegenstück. *Chaos Solitons Fractals* **2023,** *176,* **114073.**

Haftungsausschluss/Anmerkung des Herausgebers: Die in allen Veröffentlichungen enthaltenen Aussagen, Meinungen und Daten sind ausschließlich die der einzelnen Autoren und Mitwirkenden und nicht die von MDPI und/oder den Herausgebern. MDPI und/oder die Herausgeber lehnen jegliche Verantwortung für Personen- oder Sachschäden ab, die aus den im Inhalt erwähnten Ideen, Methoden, Anweisungen oder Produkten resultiere