Machine Translated by Google

Enciclopedia

Autor y editor

Elzein Salah Elzein

Miembro del IEEE

• Artículos en Computación

Editor IEEE, Reino Unido

Este contenido es confidencial

Machine Translated by Google

cálculo

MDPI

Artículo

Cuantificación de las compensaciones entre salud y economía: matemática Modelo de dinámica de la pandemia COVID-19

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

[1] Programa de Posgrado en Matemáticas, Universitas Padjadjaran, Sumedang 45363, Java Occidental, Indonesia; dhika17001@mail.unpad.ac.id
[2] Departamento de Matemáticas, Facultad de Matemáticas y Ciencias Naturales, Universitas Padjadjaran, Sumedang 45363, Java Occidental, Indonesia; nursanti.anggriani@unpad.ac.id
[3] Unidad de Bioestadística y Metodología de la Investigación, Facultad de Ciencias Médicas, Campus de Salud de la Universiti Sains Malaysia, Kubang Kerian 16150, Kelantan, Malasia; najibmy@usm.my * Correspondencia: sukono@unpad.ac.id

Resumen: La pandemia de COVID-19 ha presentado una situación compleja que requiere un equilibrio entre medidas de control como cierres y flexibilización de las restricciones. Las medidas de control pueden limitar la propagación del virus, pero también pueden causar problemas económicos y sociales. La flexibilización de las restricciones puede respaldar la recuperación económica , pero puede aumentar el riesgo de transmisión del virus. Los enfoques matemáticos pueden ayudar a abordar estas compensaciones modelando las interacciones entre factores como las tasas de transmisión de virus, las intervenciones de salud pública y los impactos económicos y sociales. Se realizó un estudio que utilizó un modelo susceptible-infectado-susceptible (SIS) con tiempo discreto modificado para determinar el costo del manejo de COVID-19. Los resultados mostraron que, sin intervención gubernamental, el número de pacientes rechazados por los centros de salud y el costo de manejar una pandemia aumentaron significativamente. La intervención de confinamiento proporcionó el menor número de pacientes rechazados en comparación con el distanciamiento social, pero los costos de manejar la pandemia en el escenario de confinamiento siguieron siendo más altos que los del distanciamiento social. Esta investigación demuestra que los enfoques matemáticos pueden ayudar a identificar coyunturas críticas en una pandemia, como la capacidad limitada del sistema de salud o las altas tasas de transmisión, que requieren una respuesta rápida y una acción adecuada. Al utilizar el análisis matemático, los tomadores de decisiones pueden desarrollar estrategias más efectivas y receptivas, considerando los diversos factores involucrados en la propagación del virus y su impacto en l

Palabras clave: pandemia; costos de tratamiento; modelos epidemiológicos; modelos de compensación

check for updates

Cita: Pangestu, DS; Sukono; Anggriani, N.; Yaacob, Nuevo México Cuantificación de la economía de la salud Compensaciones: modelo matemático de Dinámica de la pandemia de COVID-19. Computación 2024, 12, 139. https:// doi.org/ 10.3390/computation12070139

Editores académicos: Babak Shiri y Zahra Alijani

Recibido: 11 de mayo de 2024
Revisado: 21 de junio de 2024
Aceptado: 28 de junio de 2024
Publicado: 8 de julio de 2024

Copyright: © 2024 por los autores. Licenciatario MDPI, Basilea, Suiza.

Este artículo es un artículo de acceso abierto. distribuido bajo los términos y condiciones de los Creative Commons Licencia de atribución (CC BY) (https:// creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

1. Introducción

La historia de las pandemias ha registrado varias pandemias importantes que afectaron a millones de personas en todo el mundo. Algunas de las pandemias importantes que ocurrieron a lo largo de la historia incluyen la pandemia bubónica de 1331-1353. Esta pandemia se extendió por todo el mundo y mató a más de 75 millones de personas, o alrededor del 30% de la población mundial en ese momento [1]. La pandemia española de 1918-1920, causada por el virus de la gripe, mató a más de 50 millones de personas en todo el mundo [2]. La pandemia del VIH/SIDA desde 1981 hasta la actualidad comenzó en África y ha matado a millones de personas en todo el mundo [3]. La pandemia de SARS comenzó en 2002-2004. El virus del SARS se descubrió por primera vez en China y se propagó por todo el mundo, matando a más de 700 personas [4]. La pandemia de COVID-19 de 2019 hasta ahora fue causada por el virus SARS-CoV-2 y continúa ocurriendo hoy, matando a millones de personas en todo el mundo Estos son sólo algunos ejemplos de grandes pandemias que han ocurrido a lo largo de la historia y muestran lo importante que es comprender y prepararse para futuras pandemias. La respuesta a una pandemia varía según la pandemia que se esté produciendo y los países afectados. En general, hay varias medidas que los gobiernos y las organizaciones de salud toman para hacer frente a una pandemia, como la vacunación, el aislamiento y la cuarentena, las pruebas y el rastreo de contactos, el confinamiento, la educación y la asistencia económica [6]. Las respuestas a las pandemias deben adaptarse a las condiciones y características de la pandemia

Machine Translated by Google

y a menudo requieren adaptación y actualización con el tiempo [7]. Se deben tener en cuenta consideraciones de salud pública, económicas y de derechos humanos al tomar decisiones y acciones para abordar la pandemia.

Los sistemas de financiación durante una pandemia desempeñan un papel importante a la hora de abordar las consecuencias económicas y sociales de la pandemia [8]. Hay varias formas de financiar las acciones y programas necesarios para superar la pandemia, incluido el gobierno: Los gobiernos suelen utilizar fuentes de fondos como impuestos y deuda para financiar programas gubernamentales y asistencia económica para personas y empresas afectadas por la pandemia. Donaciones: Las donaciones de individuos, instituciones y empresas pueden ayudar a financiar los programas sociales y de salud necesarios durante una pandemia. Préstamos: Los préstamos de bancos y otras instituciones financieras pueden ayudar a financiar programas y medidas gubernamentales y privados para abordar la pandemia. Ayuda internacional: La ayuda de otros países e instituciones internacionales puede ayudar a financiar programas y acciones gubernamentales y priva Los sistemas de financiación durante una pandemia deben considerar el equilibrio entre financiar las acciones necesarias para abordar la pandemia y garantizar que la carga financiera no afecte negativamente a la sociedad y la economía a largo plazo [10]. Las políticas y programas de financiación durante una pandemia deben adaptarse a las condiciones y características de la pandemia actual y, a menudo, requieren adaptación y actualización con el tiempo.

Múltiples disciplinas desempeñan un papel importante en la gestión de la pandemia [11]. El papel de los modelos matemáticos de epidemiología en la gestión de pandemias es proporcionar conocimientos y predicciones sobre la propagación y el impacto de una enfermedad [12]. Estos modelos pueden ayudar a los tomadores de decisiones a tomar decisiones informadas sobre cómo asignar recursos e implementar intervenciones para controlar la propagación de la enfermedad. Al simular diferentes escenarios, estos modelos pueden proporcionar una comprensión más precisa del impacto potencial de diferentes estrategias de intervención, incluidas las posibles ventajas y desventajas de cada estrategia. Esta información puede utilizarse luego para orientar las políticas de salud pública y la asignación de recursos, así como para priorizar las intervenciones que tienen más probabilidades de ser efectivas para controlar la propagación de enfermedades [13]. En última instancia, el uso de modelos matemáticos de epidemiología puede desempeñar un papel importante a la hora de reducir el número de infecciones y muertes durante una pandemia y controlar la propagación de enfermedades de la forma más rápida y eficaz posibl

Ha habido varios estudios que han intentado estimar el gasto sanitario necesario para superar la COVID-19. La investigación realizada por Dudine et al. (2020) se centra en el gasto en salud a nivel de país. Este gasto en salud se modela utilizando un enfoque de modelo estocástico discreto susceptible-infectado-recuperado (SIR) [15]. Luego , el gasto en salud de las personas se estima multiplicando el número de personas infectadas que requieren tratamiento en los centros de salud. Otros estudios se han centrado en los gastos sanitarios en países de bajos ingres TorresRueda et al. (2021) estimaron el gasto sanitario en países de bajos ingresos utilizando el modelo susceptible-expuesto-infectado-recuperado (SEIR). El modelo SEIR se construyó utilizando un enfoque discreto y el gasto en salud se estimó mediante los costos necesarios para la respuesta de emergencia, las pruebas y el seguimiento de los casos positivos, así como los costos necesarios para tratar los casos activos y fallecidos de COVID-19 [16]. Otro estudio intentó investigar el impacto potencial de las intervenciones no farmacéuticas, como las restricciones a la actividad social, en la acumulación de capital y el desarrollo económico en diferentes escalas temporales [17]. La investigación realizada por Cook et al. (2020) se centra en el impacto potencial de las intervenciones no farmacéuticas en la acumulación de modelos y el desarrollo económico en diferentes escalas temporales. Este estudio integra el modelo de economía tipo SOLOW con el modelo SIR para modelar el impacto potencial de las intervenciones económicas realizadas [18]. Además, este enfoque de modelo epidemiológico también se utiliza para investigar el impacto de la incapacidad del estado para implementar restricciones a la actividad social en los hogares de bajos ingresos [18]. Otro estudio utilizó un enfoque epidemiológico para estimar la eficacia de la vacunación contra la COVID-19 a la hora de reducir el gasto sanitario [19]. Otro estudio examinó las implicaciones de la muerte prematura y la muerte por infección en la salud y la economía utilizando el modelo SEIR [20].

En estudios anteriores sobre modelos del costo de manejar una pandemia, no se discutió el efecto de la intervención gubernamental en la economía. Además, los modelos que examinan la

Machine Translated by Google

El efecto de la intervención gubernamental sobre la economía nunca discute el financiamiento de la salud que se produce. Si bien estos dos factores pueden afectar el gasto total para el manejo de una pandemia, en este estudio se crea un modelo para estimar los costos de salud necesarios para enfrentar la pandemia de COVID-19 en un país. El modelo creado tiene en cuenta la posibilidad de cambios en la gravedad de los pacientes con COVID-19 que no han sido aplicados por Dudine et al. (2020) [15]. Esto es más realista, considerando que la gravedad de los pacientes con COVID-19 puede, de hecho, cambiar en el campo. Para ello, se utiliza un modelo matemático epidemiológico discreto susceptible-infeccioso-susceptible (SIS) con intervenciones para proyectar el número de personas que necesitan atención hospitalaria a lo largo del tiempo.

En este estudio, se llevan a cabo modelos matemáticos para estimar los costos necesarios para manejar una pandemia, junto con las compensaciones. Este estudio presenta de manera integral cuánto cuesta, estimando los posibles cambios en la mortalidad y también los cambios en los costos económicos para cada política requerida. El modelo SIS se utiliza por su proximidad al fenómeno que ocurre, es decir, la posibilidad de que pacientes que han sido declarados curados de COVID-19 se reinfecten. El modelo también tiene en cuenta la influencia de

Intervenciones realizadas por el gobierno. De modo que cada paso de intervención que se dé pueda tener un efecto diferente, ya sea confinamiento, cuarentena o vacunación. Luego, para cada paso dado, también se consideran su efecto sobre los costos y las posibles compensaciones entre reducir el número de casos y minimizar los costos de manejo. Por lo tanto, el modelo diseñado en este estudio no sólo evalúa el manejo de los casos pandémicos en términos del número de casos y la tasa de propagación, sino también su efecto sobre las condiciones económicas. Luego esto se convierte en costos de salud. El modelo proporciona información sobre el costo de manejar a la población infectada, el costo de la intervención y el equilibrio entre ambos. Por lo tanto, la información generada por este modelo es integral para la formulación de políticas gubernamentales. La información proporcionada por el modelo finalmente asigna fondos para la gestión de la población, así como para intervenciones para contener la propagación de la enfermedad. Dado que este estudio es de naturaleza evaluativa, las asignaciones generadas por esta investigación pueden compararse con los gastos que ha realizado el gobierno y luego evaluarse más a fondo. Se espera que la información brindada pueda ser un insumo para que el gobierno vuelva a tomar una política madura en caso de pandemia, de modo que el enfoque de las intervenciones realizadas no sea solo reducir el número en el corto plazo sino también salvar a los población en su conjunto durante un período más largo.

2. Descripción

general 2.1. Modelo matemático epidemiológico

Los modelos matemáticos de epidemiología son herramientas para predecir y comprender la propagación de enfermedades en las poblaciones [21,22]. Estos modelos incluyen la relación entre personas infectadas, personas susceptibles a la infección y personas que se han recuperado o son inmunes a la enfermedad. Los modelos matemáticos de epidemiología pueden ayudar a los investigadores y responsables de la formulación de políticas a predecir la propagación de enfermedades, evaluar la eficacia de las estrategias de prevención y tratamiento y planificar respuestas apropiadas de salud púb
Los modelos matemáticos de epidemiología suelen basarse en sistemas de ecuaciones diferenciales que describen cambios en el número de personas en diferentes grupos a lo largo del tiempo. Por ejemplo, el modelo SIR (susceptibles-infectados-recuperados) es uno de los modelos matemáticos de epidemiología más utilizados . El modelo SIR supone que la población se divide en tres grupos: personas susceptibles (S), personas infectadas (I) y personas que se han recuperado o son inmunes a la enfermedad (R). La ecuación diferencial utilizada para el modelo SIR es la siguiente,

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

Modelo SIR básico

1. Tasa de cambio de susceptibles a infectados por unidad de tiempo

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

Machine Translated by Google

2. Tasa de cambio de infectados a recuperados por unidad de tiempo

$$\frac{dI}{} = \beta SI - \alpha I \, dt \quad (3)$$

3. Tasa de curación recuperada por unidad de tiempo

$$\frac{dr}{dt} = \alpha I \quad (4)$$

donde β es la tasa de transmisión, α es la tasa de curación o muerte y t es el tiempo. El estudio de Wearing et al. (2005) proporciona una explicación detallada de los modelos matemáticos epidemiológicos, incluido el modelo SIR y otros modelos utilizados en epidemiología [25]. Discuten las aplicaciones de modelos matemáticos epidemiológicos para predecir la propagación de enfermedades infecciosas como la gripe, el sarampión y el VIH, así como para estimar el impacto de las vacunas y otras medidas preventivas. También analizan técnicas numéricas para resolver ecuaciones diferenciales y el uso de datos empíricos para validar el modelo.

Además del modelo SIR, también existe el modelo SIS (susceptible-infectado-susceptible). En el modelo SIS, se supone que la población que ha sido infectada no tiene inmunidad a largo plazo y los individuos vuelven a ser susceptibles, por lo que esto permite la reinfección. La ecuación diferencial utilizada para el modelo SIS es la siguiente,

$$N(t) = S(t) + Yo(t) \quad (5)$$

Además de los modelos SIR y SIS, también existen otros modelos matemáticos epidemiológicos, como el modelo SEIR (susceptibles-expuestos-infectados-recuperados) y el modelo compartimental más complejo. Sin embargo, todos los modelos matemáticos de epidemiología tienen el mismo objetivo: ayudar a comprender y controlar la propagación de enfermedades en la población.

2.2. Modelo matemático epidemiológico discreto Se

utilizan modelos matemáticos epidemiológicos discretos para modelar la propagación de enfermedades en poblaciones discretas. Estos modelos se utilizan a menudo en epidemiología para predecir la propagación de enfermedades entre individuos de poblaciones discretas. Algunos ejemplos de modelos matemáticos epidemiológicos discretos comúnmente utilizados son el modelo SIR (susceptibles-infectados-recuperados) y el modelo SEIR (susceptibles-expuestos-infectados-recuperados). En ambos modelos, los individuos de la población se clasifican en clases según su estado en términos de infección. En la modelización epidemiológica, la mayoría de los modelos desarrollados generalmente utilizan un enfoque continuo [26]; esto se debe a que, matemáticamente, los modelos continuos son más fáciles de resolver.
Sin embargo, en realidad, los datos epidemiológicos existentes generalmente se recopilan en intervalos de tiempo discretos. Por lo tanto, esto hace que los modelos discretos sean más apropiados al considerar la forma en que se recopilan los datos. Además, los modelos epidémicos discretos son mucho más intuitivos y fáciles de implementar por parte de no matemáticos debido a la similitud en la forma en que se registran los datos. Esto hace que los modelos discretos sean más fáciles de aceptar y socializar para los no matemáticos.
Hasta ahora, se han realizado varios estudios que utilizan modelos discretos de transmisión de enfermedades [27-29].
Para los modelos epidémicos discretos más simples, se utilizan las ecuaciones (6) a (8). Entonces, en forma discreta, la ecuación queda como sigue,

$$S_{t+1} = S_t - \beta S_t I_t \quad (6)$$

$$I_{t+1} = I_t + \beta S_t I_t - \alpha I_t \quad (7)$$

$$R_{t+1} = R_t + \alpha I_t \quad (8)$$

donde t es el tiempo, α es la tasa de curación, β es la tasa de infección y N es la población total.

Machine Translated by Google

2.3. Cadena de Markov

Las cadenas de Markov se utilizan ampliamente para estimar desarrollos dinámicos que involucran transiciones entre espacios de estados finitos observables. La metodología es intuitiva y fácil de aplicar, especialmente para situaciones donde diferentes etapas determinan el estado de observación además del desarrollo de la situación. En consecuencia, esta idea es ampliamente reconocida en estudios y aplicaciones en epidemiología [30]. La cadena de Markov discreta afirma que el estado actual de la observación depende totalmente del estado del paso de tiempo anterior en el intervalo de observación discreto. Matemáticamente, esto significa que la probabilidad de que el estado observado i en el momento t pase al estado j en el momento t + 1 se denota de la siguiente manera:

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

donde I(t) es la identificación del estado observado en el tiempo t. La probabilidad de transición de un paso se define como pi,j(t), o también puede denominarse probabilidad de transición diaria.
Para la probabilidad de transición, el paso t hacia adelante a lo largo de las observaciones se denota como pi,j(t).

2.4. Error porcentual absoluto medio (MAPE)

En una predicción, es necesario evaluar los resultados del modelo para garantizar la precisión del modelo al realizar predicciones. Hasta ahora, se han utilizado varias medidas, y las más comunes son el error porcentual absoluto (APE) y el error porcentual absoluto medio (MAPE); las fórmulas para calcular APE y MAPE son las siguientes,

$$MONO = \frac{Xt - X\hat{}\ t}{xt}, \quad (10)$$

$$MAPA = \frac{\sum_{t=1}^{norte} \frac{|Xt - X\hat{}\ t|}{xt}}{norte} \times 100\%, \quad (11)$$

El rendimiento de la previsión cae en la categoría de buena precisión cuando los valores APE y MAPE producidos son inferiores al 20% [31].

3. Materiales y métodos

3.1. Materiales

El objeto del modelo de este estudio es un modelo para determinar el costo de manejar una pandemia. Este modelo involucra de manera única los componentes del costo de manejar a la población infectada, el costo de la intervención y el equilibrio entre ambos. Los costos de manejar las poblaciones infectadas involucradas en este estudio son los costos de tratamiento, el costo de agregar instalaciones de salud, los costos de mortalidad y los costos de seguimiento. Los costos de la intervención gubernamental involucrados en este estudio son los costos de distanciamiento social y los costos de encierro. Por último, hay que hacer concesiones para ofrecer una mejor imagen del gasto total para la gestión de l
El costo de manejar una pandemia se modela utilizando un modelo SIS discreto con intervenciones y datos demográficos, y luego los resultados de la proyección del modelo se combinan con un modelo de costos basado en ingredientes. Se considera el aspecto demográfico porque, en su recorrido por Indonesia, el COVID-19 lleva aproximadamente 3 años funcionando, por lo que para aumentar la precisión del modelo, se considera el aspecto demográfico.

Los datos utilizados en este estudio son el número de casos de COVID-19 en Java Occidental. Los casos utilizados en este estudio son positivos, recuperados, fallecidos y activos. Los datos utilizados corresponden al período marzo de 2020-agosto de 2022 durante la pandemia de COVID-19. El conjunto de datos contiene 3632 entradas, con 908 entradas para cada caso [32]. Luego, para los centros de salud, los datos utilizados son los datos de la tasa de ocupación de camas (BOR) de Indonesia. Los datos se obtuvieron del Grupo de Trabajo COVID-19. Este conjunto de datos corresponde al período comprendido entre marzo de 2020 y agosto de 2022 [33]. Para obtener datos sobre el costo de las intervenciones gubernamentales, este estudio utilizó las directrices oficiales de la OMS para políticas y medidas de respuesta para COVID-19 para determinar el conjunto de intervenciones involucradas en un país.

Antes de su uso, se verificó la calidad de los datos. Para los datos de casos de COVID-19, se verificó la coherencia de los datos comparando el número de casos acumulados entre

Machine Translated by Google

t y t + 1. Se dice que los datos de casos acumulados son consistentes cuando el número de casos en t + 1 ≥ el número de casos en t. Además, para los casos activos, los datos se verifican comparándolos con los datos existentes de la fuente y los datos calculados por los investigadores. Si se encuentra un error o diferencia, se conciliará con la fuente de datos antes de realizar más análisis.

3.2. Métodos

En esta investigación se llevan a cabo dos etapas, a saber, la etapa de desarrollo del modelo y la etapa de análisis de ilustración numérica, que se describen a continuación: Primero, la etapa de desarrollo del modelo se lleva a cabo examinando en profundidad, especialmente la investigación realizada por Dudine et al. . [15], que analiza la formulación de un modelo de costeo de COVID-19 utilizando el modelo SIR. Luego, en este estudio se modificó el modelo existente agregando la posibilidad de una transición en la gravedad de los síntomas en pacientes infectados con COVID-19. La formulación del modelo para determinar el costo de manejar el COVID-19 se lleva a cabo utilizando un enfoque de oportunidad de transición en tiempo discreto. En segundo lugar, se lleva a cabo la etapa de análisis de ilustración numérica para mostrar cómo se ha realizado la aplicación del modelo en la determinación del costo del manejo del COVID-19 y describir cómo se produjo la dinámica poblacional en la pandemia de COVID-19 con base en la modelo creado. Para el análisis de la ilustración numérica aquí, los parámetros utilizados en el modelo se estiman en función de los datos existentes.

El diagrama de flujo de esta investigación se presenta en la Figura 1.

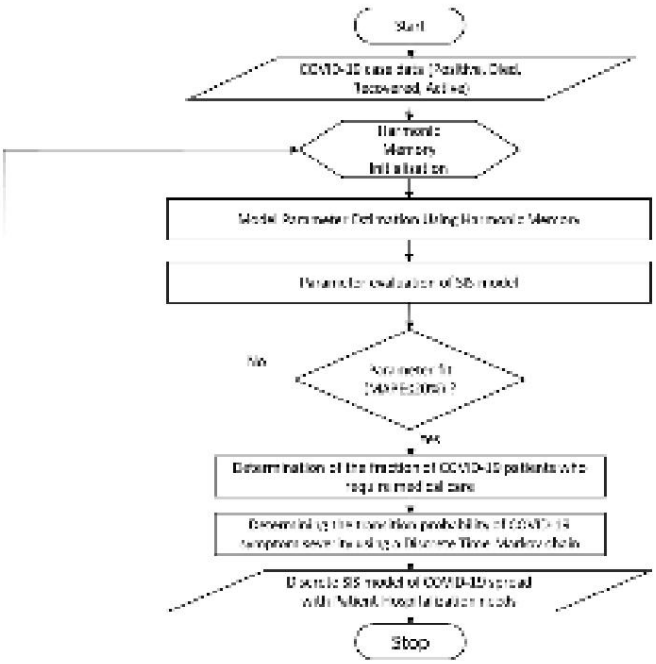


Figura 1. Pasos de modelado.

El modelado de la dinámica poblacional de la propagación de COVID-19 con las necesidades de hospitalización de los pacientes se realiza ingresando primero los datos de casos pandémicos disponibles. En este caso, los datos disponibles son datos de COVID-19. Luego, los datos se utilizan para estimar los parámetros del modelo SIS formado en este estudio. Los parámetros utilizados para este modelado SIS discreto incluyen: El número de personas que se supone que tienen inmunidad en t = 0 es 0. La duración de la infección es k . Debido a que existe una $\frac{1}{1\ \text{variar de modo que, kH}}$ oportunidad de transición, la duración de la infección puede (1-trp) $= \frac{1}{1\ (1-\text{tpr})\ ,\ \text{las}}$. Tratados y no infectables $= \frac{1}{(1-\text{tpr2})\ ,\ \text{kNH}}$ 1 y $= \frac{1}{}$ fracciones kRNH son α. La estimación de parámetros se realizó de forma iterativa y la iteración se detuvo cuando los parámetros se ajustaron. Los parámetros se consideraron aptos cuando el tamaño del error resultante fue mínimo en un número predeterminado de iteraciones. El criterio de error utilizado es el error porcentual absoluto medio (MAPE). Una vez que se ajustan los parámetros, se determina la fracción de pacientes con COVID-19 que necesitan atención médica y la probabilidad de transición.

Machine Translated by Google

Se estima la gravedad de los síntomas en pacientes con COVID-19. El modelo también tiene en cuenta el impacto de diferentes intervenciones y medidas de control sobre la propagación del virus. Al ajustar parámetros, como la tasa de transmisión y la tasa de recuperación, el modelo puede simular varios escenarios para informar la toma de decisiones de salud pública. En general, este enfoque proporciona una herramienta valiosa para predecir la trayectoria de la pandemia y evaluar posibles estrategias para mitigar su impacto.

4. Resultados

En esta sección se describen los resultados obtenidos en este estudio. En este estudio se obtuvieron dos resultados , a saber, resultados de modelado y resultados de simulación numérica.

4.1. Resultado del modelado

En este estudio, se forma un modelo de propagación de COVID-19 que considera la posibilidad de una transición en la gravedad de los síntomas en pacientes infectados, así como la posibilidad de reinfección. El modelo formado tiene tres compartimentos: susceptible (S), infectado (I) y susceptible (S). El modelo matemático epidemiológico creado se utiliza para modelar la pandemia de COVID-19 en varios escenarios.

En la ecuación (5), donde S(t) es el número de poblaciones susceptibles en el momento t e I(t) es el número de poblaciones infectadas en el momento t. El diagrama esquemático de la propagación de COVID-19 al que se refiere este estudio se presenta en la Figura 2.

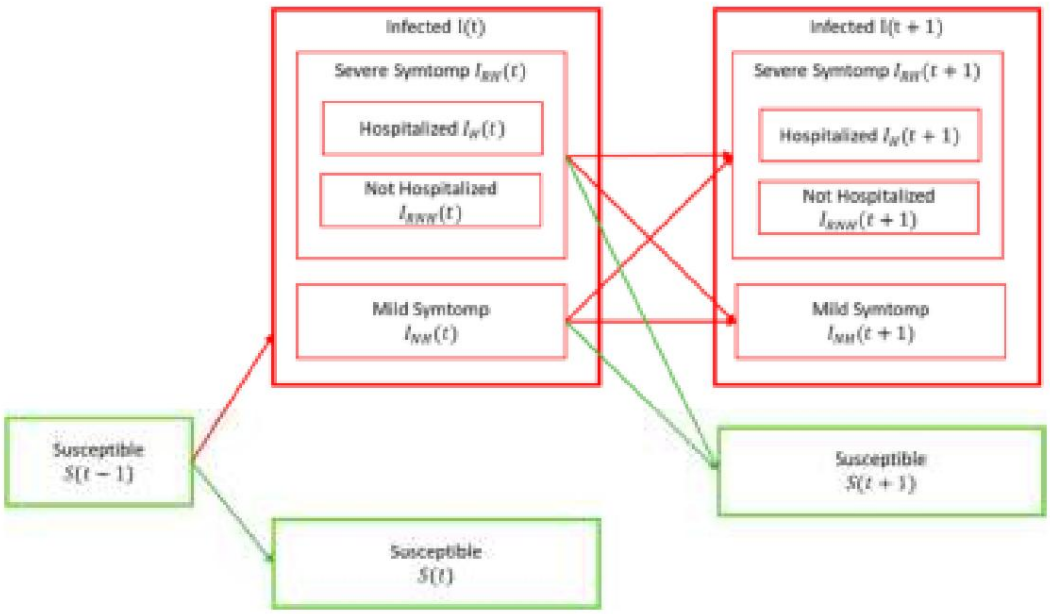


Figura 2. Dinámica de los pacientes con COVID-19.

La explicación de la Figura 2 es la siguiente: −1 (− 1) •

Una persona que es susceptible en el período t − 1; S(t − 1) puede infectarse en el siguiente período ( ) ( ). por COVID-19 en el grupo I(t) infectado e siguen infectada I(t) puede tener síntomas leves INH(t) o síntomas graves IRH(t). siendo susceptibles S(t). ( ) • Una persona ( ).

( ),

( ).

Para INH(t), se supone que el paciente no requiere tratamiento en un centro de salud como un hospital. Mientras que para IRH(t), se supone que el paciente requiere tratamiento médico en un centro de salud.

( )

• Debido a la capacidad limitada de los centros de salud, no todos los pacientes con síntomas graves de IRH(t) pueden recibir tratamiento en los centros de salud. Esto da como resultado un grupo de síntomas graves tratados IH(t) y un grupo de síntomas graves no tratado IRNH(t). ( )

( ), ( ) ( )

( ) ( )

Pueden ocurrir transiciones en la gravedad de los síntomas entre IRH(t) e INH(t). Dado que IRH(t) consta de IH(t) e IRNH(t), las transiciones de gravedad de los síntomas se describen en la Figura 3.

Machine Translated by Google

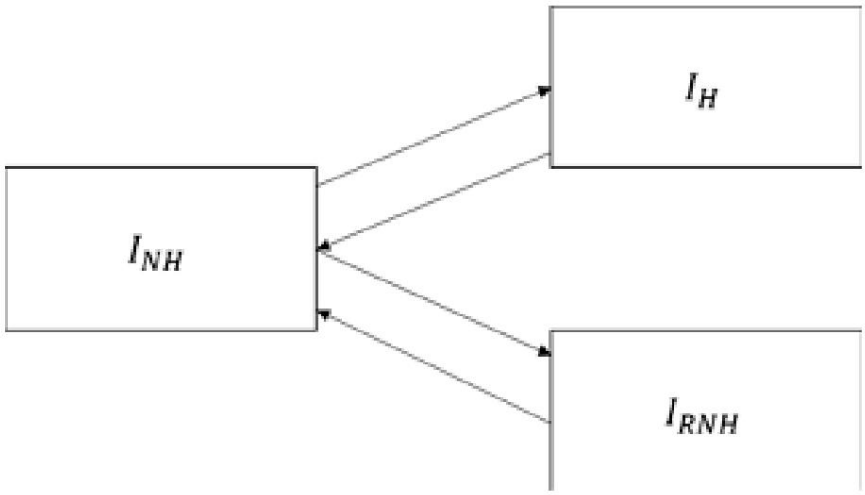


Figura 3. Diagrama de transición de gravedad de los síntomas.

Según esta explicación y la Figura 3, se sabe que el compartimento I está dividido en tres partes, a saber:

- No requiere tratamiento en un establecimiento de salud (INH). Se supone que en cada momento período, sólo una parte de los miembros del compartimento I requieren tratamiento para que El resto puede aislarse sin necesidad de recibir tratamiento en centros de salud como hospitales. Para grupos que son positivos para COVID-19 pero que no requieren cuidados intensivos en un hospital, se utiliza la notación INH .
- Necesitó tratamiento en un establecimiento de salud pero no lo recibió, IRNH. Se supone que hay Existen establecimientos de salud en cada zona, pero su capacidad es limitada, lo que genera la posibilidad de pacientes que necesitan tratamiento pero no pueden ser tratados debido a este problema. Para grupos que son positivos para COVID-19 y requieren cuidados intensivos pero no los reciben, se utiliza la notación IRNH . La ecuación (12) describe el IRNH.

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

- HI hospitalizados . Este es un grupo que necesita atención médica y la recibe. Se muestra IH(t) en la Ecuación (13).

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

y en cualquier momento t, se aplica la ecuación (14).

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

A continuación, se modela la restricción de capacidad en los establecimientos de salud. El número de camas para El tratamiento de pacientes con COVID-19 al inicio de la pandemia B(0) se muestra en la ecuación (15).

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

donde v es la fracción de camas de tratamiento de COVID-19 al inicio de la pandemia, y B0 es el número total de camas de hospital. Con el tiempo, el número de pacientes con COVID-19 aumentará aumento, lo que presenta una situación en la que el número de capacidades hospitalarias existentes necesita para ser incrementado. En cualquier momento t, si el número de camas B(t − 1) es menor que el número de IRH(t − 1), entonces la capacidad de la cama aumentará según IRNH(t − 1). la existencia de las limitaciones de capacidad hacen que la adición de camas sólo sea posible para n fracciones de IRNH(t − 1), por lo tanto , la ecuación (16) muestra el número de capacidades de camas disponibles en el momento t .

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

Machine Translated by Google

para cada cama adicional, se supone que la relación entre el número de camas con enfermeras y los médicos siguen siendo los mismos, como en las ecuaciones (17) y (18).

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

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

donde TP es el número de enfermeras y TD es el número de médicos. TP0 y TD0 son las cifras de enfermeras y médicos en el período 0 o al inicio de la pandemia. Además , la Figura 3 ha mostrado previamente la dinámica de COVID-19 con el número de pacientes que requieren atención médica. Se supone que las posibilidades de recuperación del paciente y La muerte depende de la gravedad de los síntomas y de si el paciente recibe tratamiento. Esto se muestra en las ecuaciones (19) y (20).

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

$$rNH > rH > rRNH, \tag{20}$$

donde d es la probabilidad de muerte y r es la posibilidad de recuperación del paciente con COVID-19. Después de eso, sea k la probabilidad de que el paciente abandone el compartimento I. El La probabilidad de que esto suceda es si el paciente se recupera o muere. Las relaciones k para INH, IH, e IRNH se encuentran en las ecuaciones (21) a (23).

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

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

$$kRNH = dRNH + rRNH. \tag{23}$$

Los pacientes pueden experimentar cambios en la gravedad de los síntomas y esto mantiene la paciente en el compartimento I, pero sólo cambia la gravedad de los síntomas. Si p denota el probabilidad de transición, entonces la probabilidad de que no ocurra ninguna transición o que el paciente se vaya El compartimento I viene dado por la ecuación (24).

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

y esto se aplica a IH, IRNH e INH, si la ecuación (24) se sustituye por las ecuaciones (21) a (23), entonces las ecuaciones (25) a (27) son las siguientes,

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

$$pr = 1 - kH, \tag{26}$$

$$pr2 = 1 - kRNH, \tag{27}$$

La relación entre la probabilidad de transición p y la probabilidad de un paciente El compartimento de salida I se muestra en la Figura 4.

Machine Translated by Google

=1- ,

=1- ,

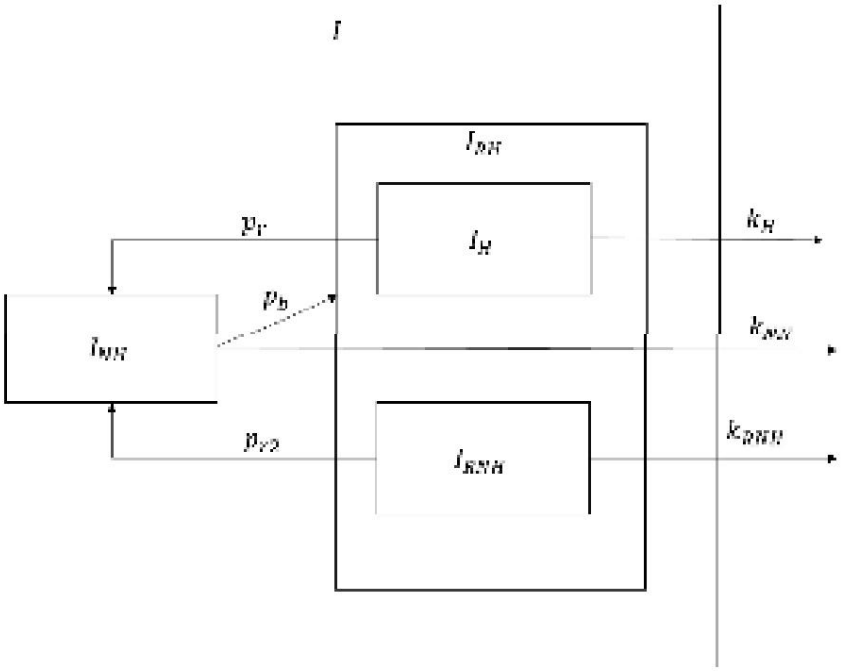


Figura 4. Diagrama p y k en el compartimento I.

Además, debido a posibles transiciones en la gravedad de los síntomas, los pacientes infectados con COVID-19 pueden tenerfdiferentes duraciones de tratamiento. Por lo tanto, es necesario considerar k de vez en cuando, como en la ecuación (28).

$$\begin{aligned} k(t) &= \frac{\Delta(S(t-1))}{I(t-1)\,rH} \\ &= \frac{IH(t-1)+rRNH\ IRNH(t-1)+rNH\ INH(t-1)+dH\ IH(t-1)+dRNH\ IRNH(t-1)+dNHINH\ (t-1)}{yo(t-1)} \\ &= kH + kRNH + kNH\ I(t-1)\ \frac{HI(t-1)}{yo(t-1)}\ \frac{IRNH(t-1)}{yo(t-1)}\ \frac{INH(t-1)}{yo(t-1)}. \end{aligned} \tag{28}$$

A continuación, el número de pacientes que ya no pueden infectar a otros corresponde al Número de personas que murieron y se recuperaron de COVID-19. Por eso,

$$\Delta S(t) = rH\ IH(t-1) + rRNH\ IRNH(t-1) + rNH\ INH(t-1) + dH\ IH(t-1) + dRNH\ IRNH(t-1) + dNH\ INH(t-1) \tag{29}$$

$$\Delta S(t) = k(t)I(t-1). \tag{30}$$

Ahora supongamos que β(t) es el número promedio de personas infectadas por una persona por unidad de tiempo t, y R0(t) es el número de personas infectadas por una persona infecciosa durante el curso de su infección. Por tanto, se convierte en la Ecuación (31).

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

Según la explicación que se ha hecho, el número de nuevas infecciones cada vez t se da en la Ecuación (32).

$$\sum \Delta I(t) = (I(t-1) - \alpha IH(t-1)) \cdot \cdot \beta(t) - in(t)\ , \quad \frac{S(t-1)}{\text{Nuevo Testamento)}} \tag{32}$$

Machine Translated by Google

$\Delta I(t)$ es siempre positivo, $\beta(t) - \sum_{1}^{\text{noto}} en(t)$, donde i es el tipo de intervención gubernamental y α es la fracción de la población infectada que está adecuadamente en cuarentena, de modo que para los compartimentos S, I, S formados, las ecuaciones (33)-(37) aplicar.

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

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

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

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

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

Después de modelar la propagación de COVID-19 y el número de pacientes que necesitan tratamiento , se lleva a cabo un modelado con respecto al costo de manejar la pandemia de COVID-19. En este estudio, el costo del manejo de la pandemia de COVID-19 considera tres tipos de financiamiento. El primer tipo es el costo de la atención de los pacientes que experimentan síntomas graves de HI(t). Mientras tanto, el segundo tipo es el costo de las instalaciones de salud adicionales para pacientes con síntomas graves que son rechazados por el hecho de que las instalaciones de salud existentes están llenas del IRNH(t). Luego, el último es el costo de las intervenciones realizadas durante el lapso t. En este estudio, el costo de tratar al paciente con COVID-19 Cp se formula en la ecuación (38),

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

donde cp es el costo de pagar a las enfermeras, cd es el costo de pagar a los médicos y cm es el costo de la administración y los medicamentos necesarios para tratar a los pacientes con COVID-19 en 1 semana. Mientras tanto, el costo de agregar establecimientos de salud Cb se formula en la ecuación (39),

$$Cb = cb \cdot \text{máx } 0, \text{máx}_{t} \{B(t) - B0\} + c \left. \frac{\text{máx } 0, \text{máx}_{t} \{B(t) - B0\}}{100} \right., \tag{39}$$

dónde . es la función del piso, c es el costo de construir un centro de salud, cb es el costo de agregar una cama nueva y B(t) es el número de camas de tratamiento de COVID-19 disponibles en el momento t. Además, el costo de la intervención se calcula utilizando la Ecuación (40).

$$CI = C1t1 + C2t2 + C3t3 + \ldots + Cntn$$
$$CI = \sum_{yo=1}^{\text{noto}} Ci\, ti \tag{40}$$

Hay varias intervenciones que se pueden realizar en un intervalo de tiempo. Enterrar-
Las intervenciones también se pueden llevar a cabo simultáneamente entre la intervención 1, la intervención 2, la intervención 3, etc. Por tanto, el costo de la intervención se calcula utilizando la Ecuación (40). Con base en las ecuaciones (38) a (40), el costo total de manejar la TC del paciente con COVID-19 debe prepararse en la ecuación (41),

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

4.2. Resultados de la estimación de parámetros

En este estudio, los parámetros utilizados se estimaron utilizando datos reales para proporcionar resultados de simulación más cercanos a los fenómenos reales en el campo. Hay 11 parámetros utilizados en este estudio. Diez son parámetros estimados y uno se supone porque no hay datos disponibles. En este estudio, el parámetro asumido es el parámetro n, que es la fracción de lecho que se puede agregar durante la próxima semana. En este estudio, utilizamos el valor de n = 0,05. Usamos este valor considerando el intervalo de tiempo utilizado; una semana es poco tiempo, lo que significa que aunque el gobierno tiene fondos, todavía hay un límite de tiempo que puede limitar el número de camas que se pueden agregar. Además, para otros parámetros estimados utilizamos datos reales.

Machine Translated by Google

relacionados con la definición de estos parámetros. Todos los resultados de la estimación de parámetros en este estudio. se resumen en la Tabla 1.

- El parámetro v se estima utilizando datos sobre el número de camas de hospital de Java Occidental en 2019.
- El parámetro dNH se estimó utilizando datos diarios de mortalidad por COVID-19. el dH, Los parámetros dRNH se calibran a partir de los parámetros dNH utilizando muertes que ocurrieron durante la cuarentena.
- El parámetro rNH se estimó utilizando datos diarios de recuperación de COVID-19. Para parámetros rH, rRNH se calibró a partir del parámetro rNH utilizando curas que ocurrieron durante la cuarentena.
- El parámetro k se estima usando los parámetros d y r usando las Ecuaciones (21)–(23).
- El parámetro p se estima utilizando el parámetro k y las ecuaciones (25)–(27).

Tabla 1. Resultados de la estimación de parámetros.

Parámetro	Definición	Valor	Detalles
norte	Fracción de lecho expandible	0,05	Ficticio
v	Fracción de camas disponibles al inicio de la pandemia	0.1481	Estimado
dH	Probabilidad de muerte de pacientes con síntomas graves que son atendidos en establecimientos de salud	0.0011	Estimado
dRNH	Probabilidad de muerte de pacientes con síntomas graves que no son tratados en un centro de salud	0.0017	Estimado
dNH	Probabilidad de muerte de un paciente que no requiere tratamiento en un centro de salud	0.0006	Estimado
Rh	Probabilidad de recuperación para pacientes con síntomas graves. que son atendidos en establecimientos de salud	0.0654	Estimado
RNH	Probabilidad de recuperación para pacientes con síntomas graves. que no son atendidos en establecimientos de salud	0.0327	Estimado
rNH	Probabilidad de recuperación para pacientes que no necesitan tratamiento en un centro de salud	0.0981	Estimado
k	Probabilidad de que el paciente abandone el compartimento I	0,0665	Estimado
	Probabilidad de transición de síntomas leves a graves	0,0095	Estimado
pbpr	Probabilidad de transición de síntomas graves a leves	0,0221	Estimado

Los parámetros informados en la Tabla 1 se emplean luego en este trabajo para simulaciones numéricas del modelo de propagación de COVID-19. Se validan los resultados de la estimación de parámetros. antes de ser utilizado en simulaciones numéricas, evaluando la corrección del modelo frente a los datos utilizados. El proceso de validación garantiza que el modelo refleje con precisión las condiciones del mundo real. escenarios y puede proporcionar predicciones confiables para la propagación de COVID-19. este riguroso Este enfoque mejora la credibilidad y utilidad de los resultados de la simulación para guiar al público. intervenciones en salud y toma de decisiones. Esto se logra gráficamente mostrando una simulación del modelo creado utilizando los parámetros enumerados en la Tabla 1. Figuras 5 y 6 Representa un gráfico de predicciones de modelos versus datos de casos de COVID-19 en Java Occidental.

La Figura 5 compara las predicciones del modelo y los datos reales sobre vulnerables o susceptibles (S) poblaciones. Con base en el gráfico, se sabe que los parámetros utilizados en este estudio son Adecuado para su uso en simulaciones numéricas, como lo demuestran las formas idénticas del modelo. gráficos de predicción y datos reales. El gráfico indica que las predicciones del modelo son precisas. en comparación con los datos originales, y los parámetros son aptos para simulaciones numéricas. el cierre La alineación entre las predicciones del modelo y los datos reales sugiere que el modelo es efectivo. para capturar la dinámica de los casos de COVID-19 en Java Occidental. Esta validación de los parámetros utilizado mejora la confiabilidad de las simulaciones numéricas realizadas en este estudio. Figura 6 compara las predicciones del modelo con los datos reales sobre la población infectada (I).

Machine Translated by Google

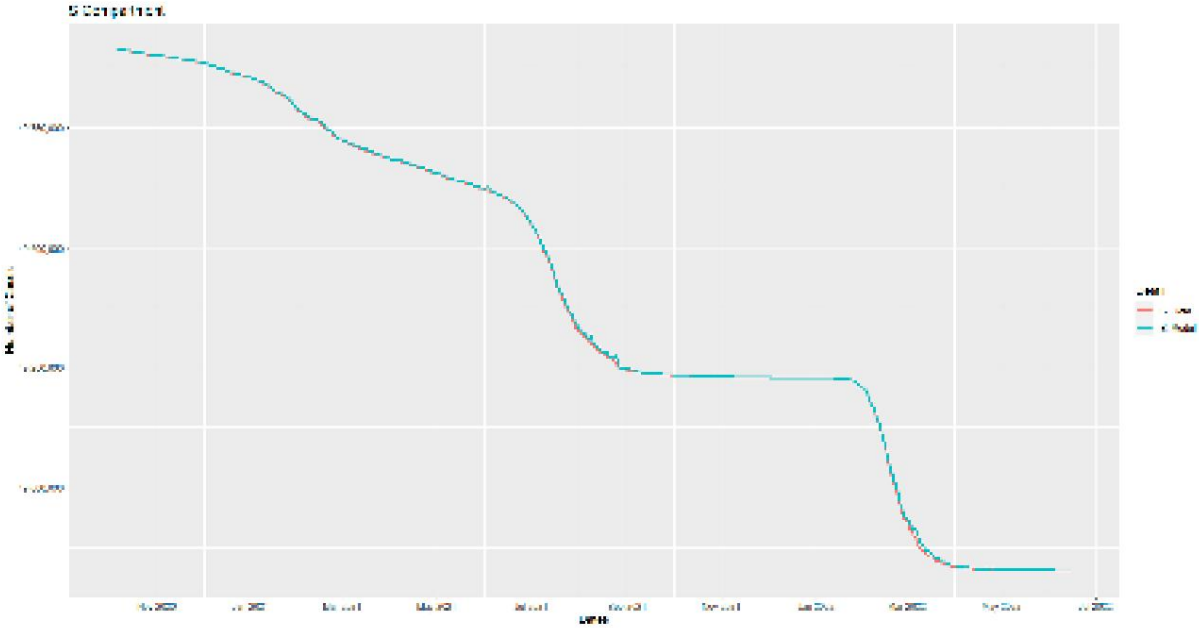


Figura 5. Comparación entre las predicciones del modelo y los datos del compartimento S.

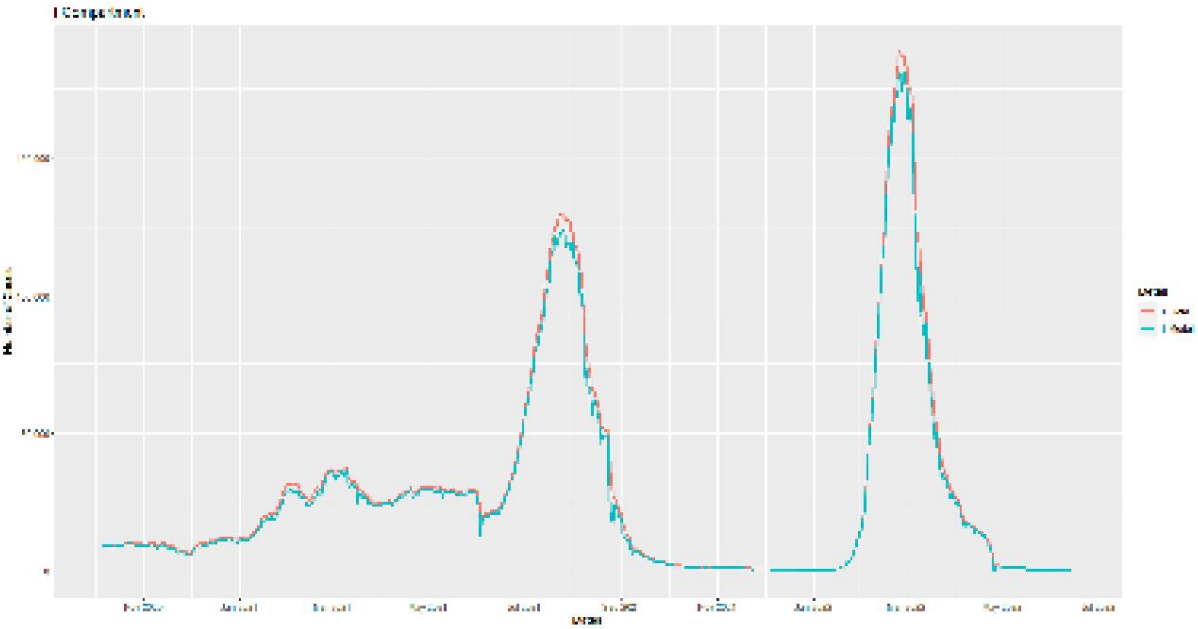


Figura 6. Comparación entre las predicciones del modelo y los datos del compartimento I.

Para obtener la gráfica de predicción del modelo en I, se utiliza la Ecuación (34). Según el gráfico, se sabe que los resultados de predicción del modelo están de acuerdo con los datos reales. Esto se desprende del gráfico de simulación, que es idéntico a los datos originales. Esta alineación entre las predicciones del modelo y los datos reales valida la precisión de los parámetros utilizados en el estudio. La coherencia entre el gráfico de simulación y los datos reales respalda aún más la confiabilidad de las simulaciones numéricas realizadas. Esto significa que las predicciones del modelo son precisas en comparación con los datos originales y que los parámetros son aptos para simulaciones numéricas. En general, la estrecha coincidencia entre los resultados de la simulación y los datos reales indica que el modelo es una herramienta confiable para predecir resultados en escenarios similares. La validación exitosa de los parámetros utilizados en el estudio mejora la credibilidad de las simulaciones numéricas realizadas.

Machine Translated by Google

4.3. Análisis de

sensibilidad Antes de utilizar los parámetros estimados en la simulación numérica, se realiza un análisis de sensibilidad para cada parámetro. Este procedimiento ayuda a comprender cómo las variaciones en cada parámetro influyen en el resultado general del modelo, facilitando así los ajustes necesarios. Al calcular el MAPE en el compartimento I, los investigadores pueden evaluar la precisión del modelo e implementar mejoras adicionales para mejorar la confiabilidad. El análisis de sensibilidad se realizó utilizando el método uno a la vez (OAT), en el que cada parámetro se varió sistemáticamente de forma individual mientras se mantenían los demás constantes. Este método permite una evaluación clara y aislada del impacto de cada parámetro en el resultado del modelo. Al ajustar un parámetro a la vez y observar los cambios correspondientes en las métricas de rendimiento del modelo, como el error porcentual absoluto medio (MAPE), es posible identificar los parámetros con la influencia más significativa en el modelo. Este enfoque integral facilita una comprensión profunda de la sensibilidad del modelo a diferentes parámetros, lo que ayuda a su refinamiento para mejorar la precisión y la solidez. Además, el método OAT ayuda a identificar posibles interacciones entre parámetros, asegurando que el modelo permanezca estable y confiable en diferentes condiciones.

Este análisis implica variar los parámetros estimados en ±10%. Posteriormente, se realiza la simulación y se calcula el error porcentual absoluto medio (MAPE) para el compartimento I. Los resultados del análisis de sensibilidad, representados en la Figura 7, ilustran el impacto de las variaciones de los parámetros en la línea base del MAPE.

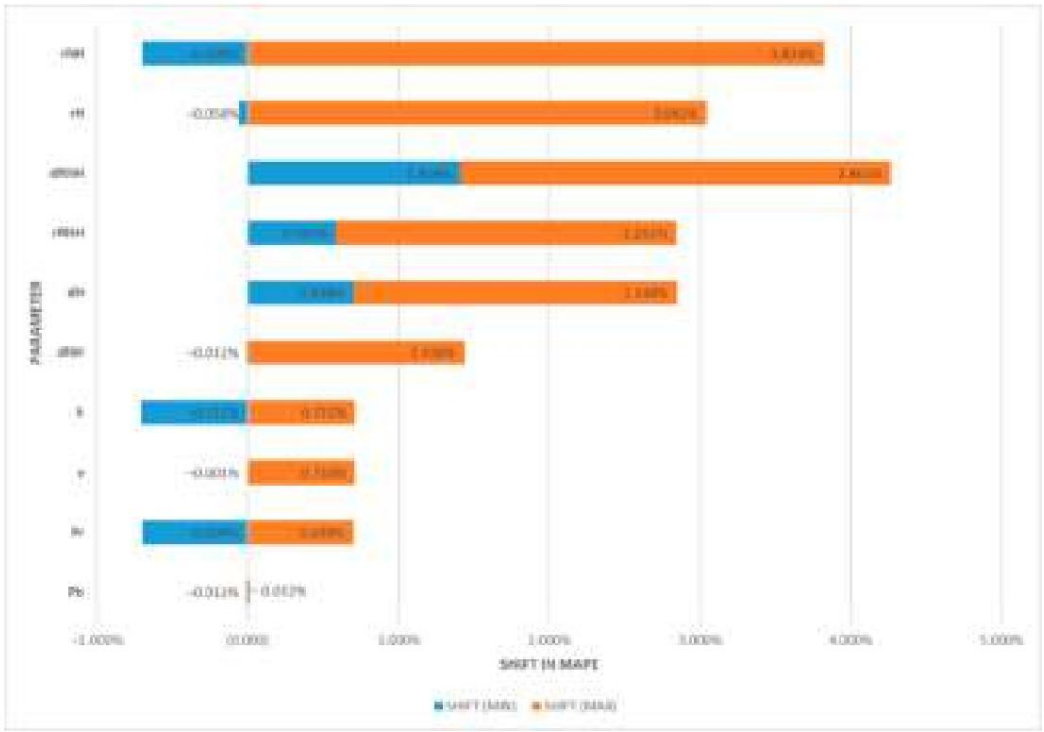


Figura 7. Cambio en MAPE.

Según la Figura 7, el parámetro induce el cambio más significativo en MAPE, que asciende a 3,824%. A esto le sigue el parámetro rH , que da como resultado un cambio de MAPE del 3,042%. En particular, los parámetros de transición exhiben un impacto mínimo en MAPE; por ejemplo, el parámetro altera MAPE en −0,012%, mientras que el parámetro provoca un cambio del 0,699%. La Figura 7 ilustra además que los cambios generales en MAPE son relativamente modestos.
Con un MAPE base del 7,12%, la mayor variación aún mantiene el valor del MAPE dentro del rango del 10%. Esto indica que, a pesar de las variaciones en los parámetros, el valor de MAPE se mantiene dentro del umbral aceptable, ya que el criterio de MAPE máximo para este estudio se establece en 20%. En general, los hallazgos demuestran que los parámetros de transición tienen un efecto relativamente menor sobre los valores de MAPE, manteniendo los cambios dentro de los límites permisi

Machine Translated by Google

Esto sugiere que el modelo es robusto y puede adaptarse eficazmente a variaciones en estos parámetros sin comprometer significativamente la precisión.

4.4. Resultados de simulación numérica

El objetivo de esta simulación numérica es representar la dinámica poblacional en la pandemia de COVID-19. Para obtener un gráfico de simulación de cada compartimento de población, aplique las ecuaciones (33) a (37). El gráfico de simulación proporcionará una representación visual de cómo cambia cada compartimento de población con el tiempo según las ecuaciones proporcionadas. Esto permitirá comprender mejor la dinámica de la pandemia de COVID-19 y ayudará a tomar decisiones informadas sobre las medidas de salud pública. La simulación numérica en este trabajo utiliza los parámetros presentados en la Tabla 1. Las Figuras 8 a 10 representan los patrones de población de COVID-19 en Java Occidental con varios escenarios.

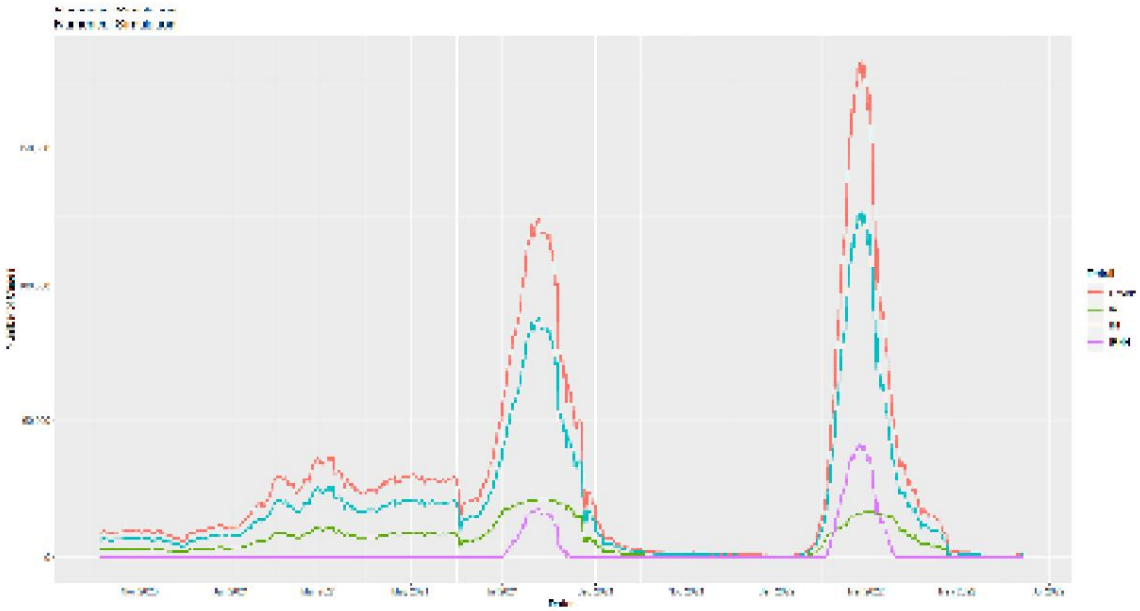


Figura 8. Resultados de la simulación numérica sin escenario de intervención.

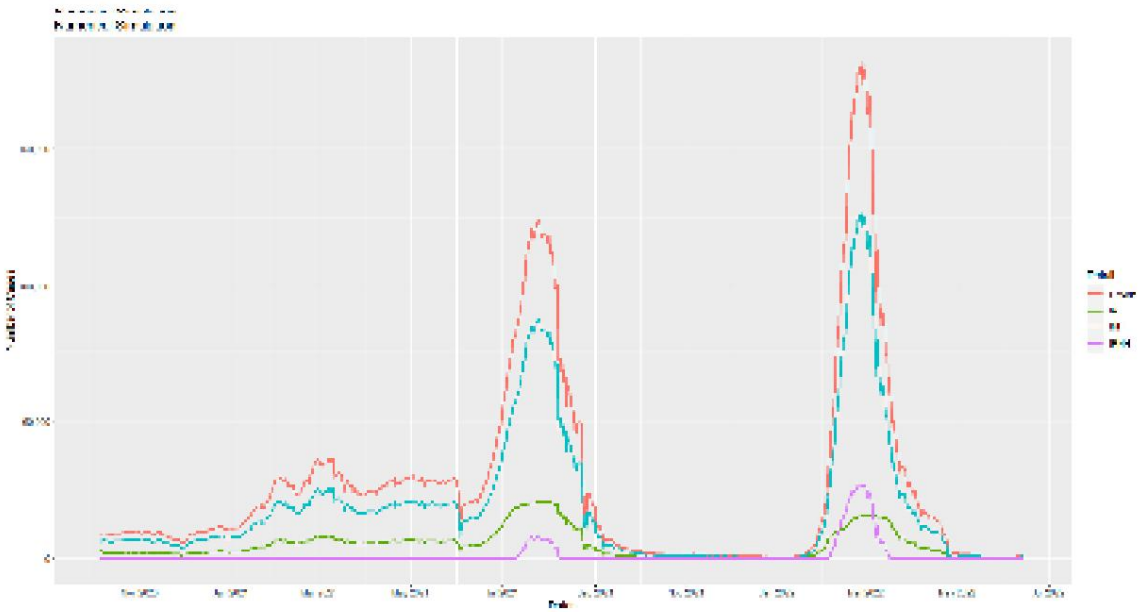


Figura 9. Resultados de la simulación numérica del escenario de distanciamiento social.

Machine Translated by Google

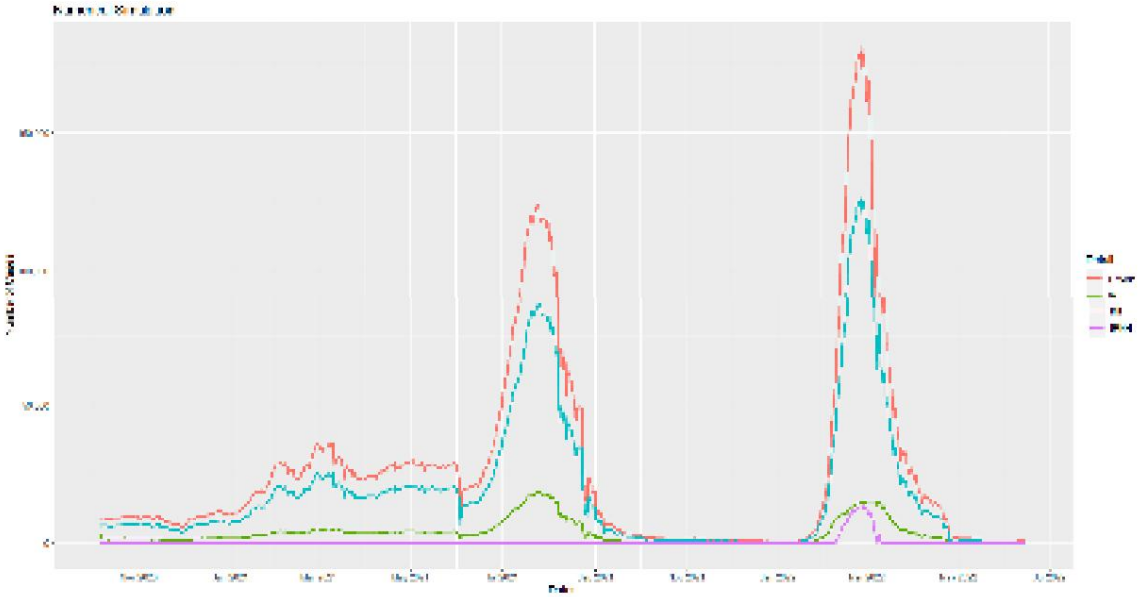


Figura 10. Resultados de la simulación numérica del escenario de bloqueo.

La Figura 8 muestra los resultados de simulaciones numéricas de la propagación de la población infectada con COVID-19 utilizando el modelo que se ha formado. En la Figura 8, el escenario utilizado es el escenario sin intervención. La simulación ilustra un rápido aumento en el número de personas infectadas a lo largo del tiempo, destacando la importancia de implementar intervenciones para controlar la propagación del virus. Estos hallazgos enfatizan el impacto potencial de las medidas preventivas para mitigar los efectos de la pandemia. La Figura 8 muestra que sin intervención, los casos de COVID-19 experimentados son muy altos. Además, en el escenario sin intervención del gobierno, se encontró que el rechazo de los pacientes ocurrió dos veces, concretamente en agosto de 2021 y febrero de 2022. Esto indica que sin intervención, el sistema de salud en Java Occidental puede verse abrumado, lo que lleva al rechazo de los pacientes. Por lo tanto, es crucial que las autoridades apliquen medidas estrictas como cierres, mandatos de uso de mascarillas y distanciamiento social para evitar tal escenario. La implementación de estas intervenciones puede ayudar a reducir la carga sobre los centros de salud y, en última instancia, salvar vidas. Los datos de la Figura 8 resaltan la importancia de implementar medidas efectivas para controlar la propagación de COVID-19 a fin de prevenir un número tan elevado de casos y una posible tensión en el sistema de salud.

La Figura 9 muestra los resultados de simulaciones numéricas de la propagación de la población infectada por COVID-19 utilizando el modelo que se ha formado. En la Figura 9, el escenario utilizado es el escenario con intervención de distanciamiento social. Los resultados de la simulación indican una reducción significativa en el número de personas infectadas en comparación con escenarios sin medidas de distanciamiento social. Esto destaca la eficacia de implementar intervenciones de distanciamiento social para controlar la propagación de COVID-19. La Figura 9 muestra que con la intervención de distanciamiento social, los casos de COVID-19 experimentados han disminuido en comparación con sin intervención. Además, en el escenario con intervención de distanciamiento social, se constató que el rechazo de los pacientes se produjo dos veces, concretamente en agosto de 2021 y febrero de 2022, con un número menor de rechazos en comparación con sin intervención. Estos hallazgos sugieren que las medidas de distanciamiento social han jugado un papel crucial en la reducción de la carga sobre los sistemas de salud al prevenir un aumento de casos. Los datos subrayan la importancia de seguir adhiriéndose a estas intervenciones para mitigar el impacto de la pandemia. Estos hallazgos sugieren que la implementación de medidas de distanciamiento social puede reducir efectivamente la propagación de COVID-19 y disminuir el número de rechazos de pacientes. Los resultados resaltan la importancia de las intervenciones proactivas para controlar la pandemia y minimizar la tensión en el sistema sanitario.

Machine Translated by Google

La Figura 10 muestra los resultados de simulaciones numéricas de la propagación de la población infectada con COVID-19 utilizando el modelo que se ha formado. En la Figura 10, el escenario utilizado es el escenario con intervención de bloqueo. La Figura 10 muestra que con la intervención de bloqueo, los casos de COVID-19 experimentados han disminuido en comparación con la ausencia de intervención y el distanciamiento social. Además, en el escenario con intervención de confinamiento, se encontró que el rechazo de los pacientes solo ocurrió una vez, en febrero de 2022, con un número menor de rechazos en comparación con ninguna intervención y distanciamiento social. En general, los resultados sugieren que implementar una intervención de bloqueo puede reducir efectivamente la propagación de COVID-19 y minimizar el rechazo de los pacientes. Esto pone de relieve la importancia de medidas estrictas para controlar la pandemia y proteger la salud pública.

Con base en las Figuras 8 a 10, se encuentra que, en general, el número de pacientes que tienen síntomas graves y necesitan tratamiento es 0, lo que significa que en la mayoría de los intervalos de tiempo, todos los pacientes de COVID-19 con síntomas graves obtendrán tratamiento a pesar del aumento. en casos infectados. Esto sugiere que el sistema de salud de Java Occidental es capaz de gestionar eficazmente la afluencia de casos graves de COVID-19. Los datos de esta simulación pueden ser valiosos para los responsables de la formulación de políticas a la hora de determinar la eficacia de diferentes medidas de salud pública. Sin embargo, cuando el aumento de casos infectados es demasiado alto, por ejemplo, en junio de 2021 y enero de 2022, el hospital no podrá manejar el aumento de casos y provocará que los pacientes con COVID-19 sean rechazados o no reciban tratamiento. Al revisar con base en el escenario utilizado, se encontró que en el escenario de distanciamiento social, el número de rechazos de pacientes fue menor que sin intervención, mientras que en el escenario de confinamiento solo hubo rechazos en el período de enero de 2022. Esto resalta la importancia de implementar medidas de salud pública oportunas y efectivas para evitar que los sistemas de salud se abrumen durante los picos de casos También subraya la necesidad de un seguimiento y ajuste continuos de las estrategias basadas en los resultados de la simulación para garantizar resultados óptimos. Para determinar cómo se debe preparar el impacto en los costos de salud, se utilizan las ecuaciones (40) y (41). El gráfico de los costos que debe preparar el gobierno se presenta en las Figuras 11 a 13.

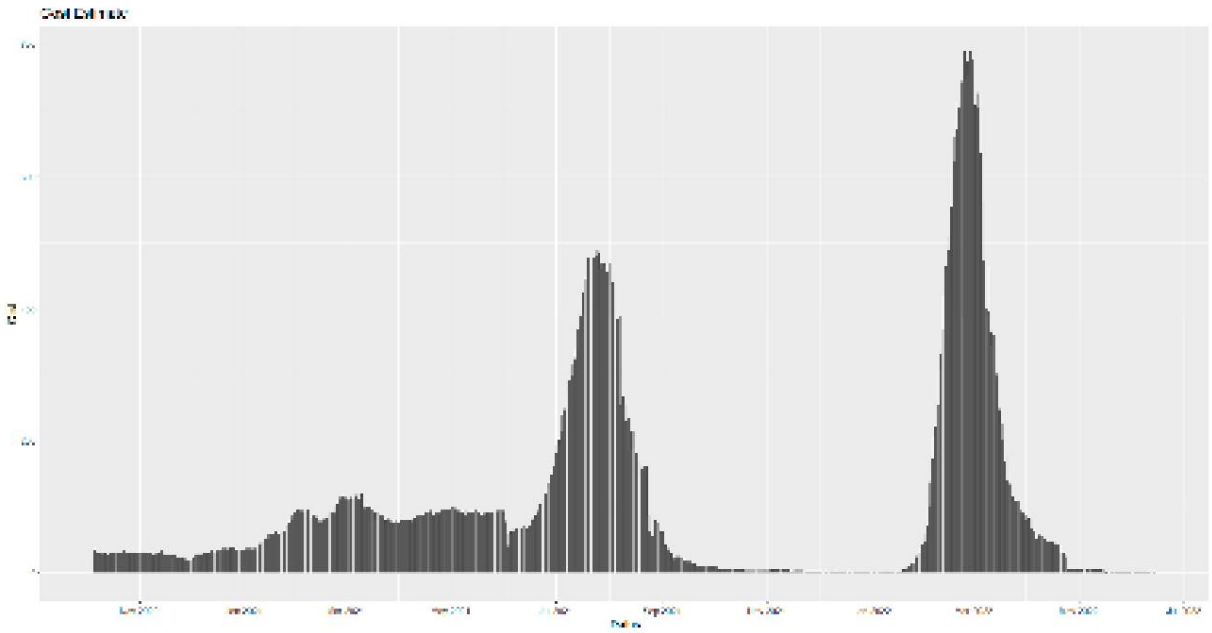


Figura 11. Resultados de la estimación de costos sin escenario de intervención.

Machine Translated by Google

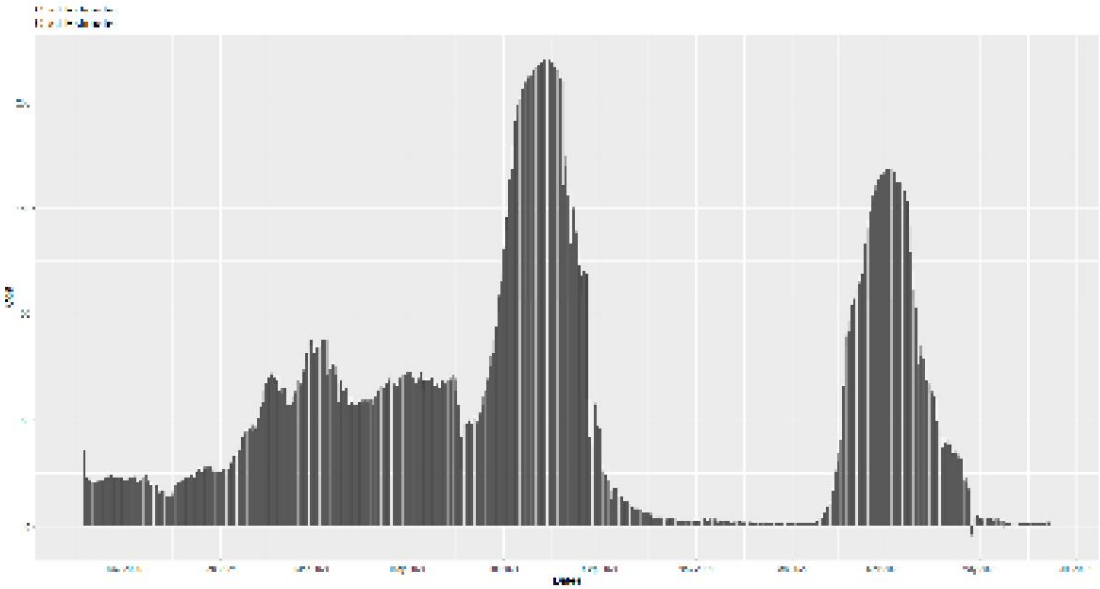


Figura 12. Resultados de la estimación de costos con escenario de distanciamiento social.

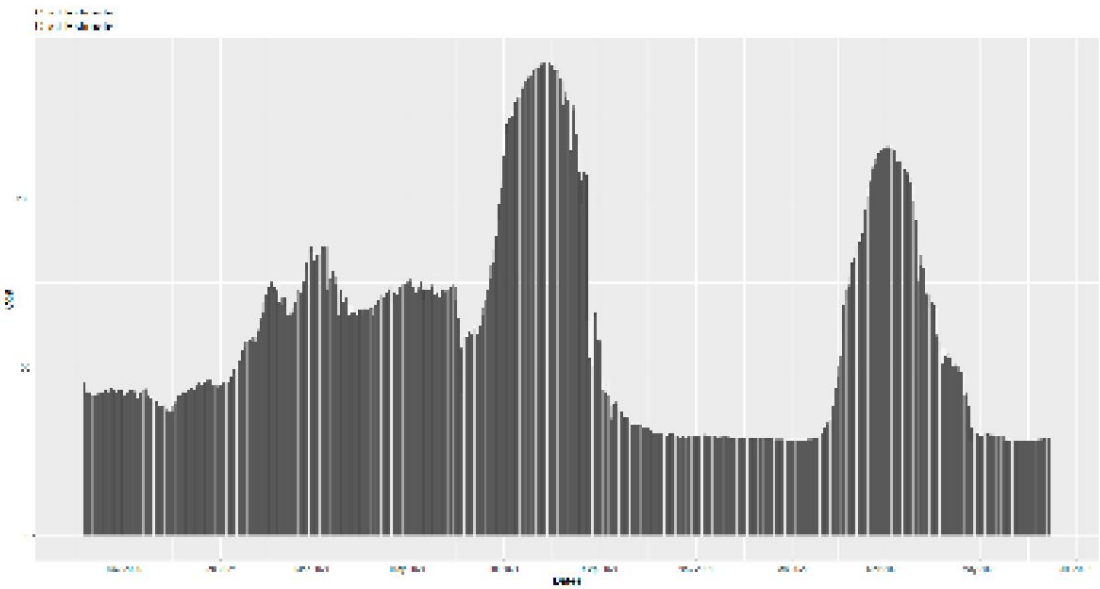


Figura 13. Resultados de la estimación de costes con escenario de confinamiento.

La Figura 11 muestra el costo estimado de manejar la pandemia de COVID-19 según los resultados del modelo. Las proyecciones de costos tienen en cuenta varios factores, como los gastos de atención médica, los impactos económicos y las medidas de respuesta del gobierno. Es importante señalar que estas estimaciones están sujetas a cambios según la naturaleza cambiante de la pandemia y la eficacia de los esfuerzos de contención. La Figura 11 muestra que hay un aumento en los costos de manejo en los períodos de agosto de 2021 y febrero de 2022. La Figura 11 muestra que también hubo un aumento en los casos de COVID-19 y el rechazo de pacientes en el mismo período. Estos aumentos en los costos de manejo coinciden con picos en los casos de COVID-19 y las tasas de rechazo de pacientes, lo que indica una correlación directa entre los dos. Esta información puede ayudar a los responsables de la formulación de políticas tt tt

y los proveedores de atención médica anticipan y asignan mejor los recursos durante futuros aumentos repentinos de la pandemia. Esto muestra que el rechazo de los pacientes con COVID-19 puede aumentar los costos en los que debe incurrir el gobierno. Esto se debe a que el gobierno debe atender a todos los pacientes de COVID-19, y cuando hay casos de rechazo, es necesario aumentar la capacidad de camas, lo que provoca un aumento en el costo del manejo de la pandemia de COVID-19.

Machine Translated by Google

La Figura 12 muestra el costo estimado de manejar la pandemia de COVID-19 según los resultados del modelo. Según la Figura 12, los costos en los que se debe incurrir para manejar una pandemia con un escenario de distanciamiento social son menores que sin ninguna intervención. Esto sugiere que implementar medidas de distanciamiento social puede ayudar a reducir la carga financiera asociada con la gestión de una pandemia. Es crucial que los formuladores de políticas consideren estas estimaciones de costos al tomar decisiones sobre intervenciones de salud pública. Además, la Figura 12 muestra que existe un aumento en los costos de manejo en los períodos de agosto de 2021 y febrero de 2022, con un monto menor en comparación con el escenario sin intervención alguna. La Figura 9 muestra que también hubo un aumento en los casos de COVID-19 y el rechazo de los pacientes durante el mismo período. Esto muestra que el rechazo de los pacientes con COVID-19 puede aumentar los costos en los que debe incurrir el gobierno. Esto se debe a que el gobierno debe atender a todos los pacientes de COVID-19, y cuando hay casos de rechazo, es necesario aumentar la capacidad de camas, lo que provoca un aumento en el costo del manejo de la pandemia de COVID-19. Por lo tanto, reducir el rechazo de los pacientes puede ayudar a mitigar la carga financiera para el gobierno y el sistema de salud. La implementación de estrategias para abordar el rechazo de los pacientes, como mejorar la comunicación y la coordinación entre los centros de atención médica, podría conducir a un uso más eficiente de los recursos y, en última instancia, a reducir los costos en la gestión de la pandemia.

La Figura 13 muestra el costo estimado de manejar la pandemia de COVID-19 según los resultados del modelo con el escenario de bloqueo. El costo estimado incluye gastos de atención médica, pérdidas económicas y paquetes de estímulo gubernamentales. Es fundamental que las autoridades consideren estas proyecciones al tomar decisiones sobre medidas de salud pública y planes de recuperación económica. Según la Figura 13, los costos en los que se debe incurrir para manejar una pandemia con un escenario de bloqueo son menores que sin ninguna intervención. Además , en la Figura 13 se muestra que existe un repunte en los costos de manejo en los periodos de agosto de 2021 y febrero de 2022, con un monto menor en comparación con el escenario sin intervención. Esto sugiere que implementar un bloqueo puede ayudar a mitigar los costos generales asociados con una pandemia. Sin embargo, es importante sopesar cuidadosamente el impacto económico de tales medidas frente a sus beneficios potenciales en términos de salud pública y recuperación a largo plazo. En la Figura 10, se muestra que también hubo un aumento en los casos de COVID-19 y el rechazo de los pacientes durante el mismo período. Esto muestra que el rechazo de los pacientes con COVID-19 puede aumentar los costos incurridos por el gobierno. Esto se debe a que el gobierno debe acomodar a todos los pacientes de COVID-19, y cuando hay casos de rechazo, es necesario aumentar la capacidad de camas; esto provoca un aumento en el costo del manejo de la pandemia de COVID-19. Esto genera una presión sobre los recursos y la financiación de otras importantes iniciativas de salud pública. Es crucial que los gobiernos aborden rápidamente los problemas de rechazo de los pacientes para garantizar una asignación eficiente de los recursos y evitar tensiones innecesarias en el sistema de salud. Al implementar estrategias para reducir las tasas de rechazo de pacientes, los gobiernos pueden gestionar mejor la carga financiera de la pandemia de COVID-19 y priorizar la financiación de diversas iniciativas de salud pública.

Con base en las Figuras 11 a 13, se encontró que el costo de manejar la COVID-19 aumentó cuando también aumentó el número de pacientes existentes con COVID-19. Además, también se encontró que después de que se produjo el pico, el costo de manejar los casos de COVID-19 disminuyó y tendió a permanecer bajo hasta que ocurrió el siguiente pico. Por lo tanto, es crucial que el gobierno vigile de cerca el número de pacientes existentes con COVID-19 para anticipar y prepararse para posibles aumentos en los costos de salud. Al utilizar las ecuaciones (40) y (41) y analizar el gráfico de las figuras 8 a 10, los formuladores de políticas pueden tomar decisiones informadas para gestionar y asignar recursos de manera efectiva para manejar los casos de COVID-19. Esto sugiere que hay una mayor conciencia pública después de un aumento en los casos, lo que lleva a una reducción en el número de casos de COVID-19 para que las personas comiencen a sentirse seguras nuevamente y a relajar los protocolos de salud, lo que hace que el número de casos de COVID-19 aumente. de nuevo. Es crucial que los formuladores de políticas sigan de cerca las tendencias y patrones en los casos de COVID-19 para implementar intervenciones oportunas y evitar que los sistemas de salud se abrumen. Al monitorear y ajustar continuamente las estrategias basadas en el análisis de datos, se puede minimizar el impacto de posibles aumentos en los costos de salud. Con base en las Figuras 11 a 13, se encuentra que el cos

Machine Translated by Google

escenario 3 con intervención de bloqueo, que es de 73 mil millones de IDR; al costo más alto le sigue el escenario 1 sin intervención, que tiene un costo de 67,42 mil millones de IDR; y el coste más pequeño lo experimenta el escenario 2, que cuesta 32.872 millones de IDR. Estos hallazgos sugieren que implementar una intervención de bloqueo puede generar costos totales más altos en comparación con escenarios sin intervención. Es fundamental que las autoridades consideren cuidadosamente las implicaciones económicas de las diferentes estrategias para gestionar los brotes de COVID-19.

5. Discusión

Este estudio tiene como objetivo formular un modelo de costos para pacientes con COVID-19, que incluya (a) pacientes que reciben tratamiento hasta que se recuperen y (b) capacidad adicional de camas hospitalarias cuando sea necesario. Se ha realizado con éxito la formulación del modelo para determinar el costo del manejo de COVID-19, que implica la posibilidad de una transición en la gravedad de los síntomas en este estudio, cuyos resultados se presentan en las Ecuaciones (33)–(37).

El modelo tiene en cuenta varios factores, como la duración de la estancia hospitalaria, la gravedad de los síntomas y las intervenciones médicas necesarias, para proporcionar una estimación de costes integral.

Al incorporar estas variables, los proveedores de atención médica pueden comprender mejor las implicaciones financieras del tratamiento de pacientes con COVID-19 y asignar recursos de manera efectiva. El modelo dado por la ecuación se puede utilizar para determinar la cantidad de costos que debe preparar el gobierno para tratar a los pacientes infectados y aumentar la capacidad. Además, el modelo tiene en cuenta la posible fluctuación en las condiciones del paciente, lo que garantiza una estimación más precisa de los costes. Al utilizar este modelo integral de cálculo de costos, los formuladores de políticas pueden asignar mejor los recursos y planificar posibles aumentos repentinos de casos de COVID-19. En última instancia, esto ayudará a optimizar los recursos sanitarios y garantizará una respuesta oportuna y eficaz a la pandemia. Además, el modelo se puede adaptar a futuros brotes u otras emergencias de salud pública para mejorar las estrategias de preparación y respuesta.

Con base en las simulaciones realizadas, encontramos que con el tiempo, la población susceptible seguirá disminuyendo. La situación surge debido a la aparición continua de infecciones por COVID-19 seguidas de recuperaciones posteriores entre la población durante un período de tiempo. Esto es lo que hace que la población vulnerable siga creciendo con el tiempo.

Lo contrario ocurre con la población recuperada: con el tiempo, esta población seguirá creciendo. Algo interesante sucedió en la población infectada. Se encontró una fluctuación en esta población, incluso en junio de 2021 y enero de 2022. Durante estos meses, hubo un aumento significativo en los casos de COVID-19, lo que provocó un aumento en la población infectada. Sin embargo, con medidas e intervenciones adecuadas, la población infectada volvió a disminuir gradualmente. Hubo un aumento significativo durante ese período, antes de seguir disminuyendo hasta volver a un mínimo estable. Este aumento afecta tanto a los gastos incurridos como a la cantidad de pacientes a los que el hospital niega el ingreso. Es importante que los centros de salud sigan de cerca estas fluctuaciones para poder asignar recursos de manera efectiva y brindar atención oportuna a quienes la necesitan. Al comprender las tendencias de la población infectada, los hospitales pueden prepararse mejor para posibles aumentos repentinos de casos y ajustar su capacidad en consecuencia. Además, el seguimiento de estas tendencias también puede ayudar a los hospitales a identificar posibles brotes en la comunidad e implementar medidas preventivas para contener la propagación del virus. Este enfoque proactivo puede, en última instancia, ayudar a salvar vidas y evitar que los sistemas de salud se abrumen. Es fundamental que los centros de atención sanitaria colaboren con las agencias de salud pública y utilicen análisis de datos para mantenerse a la vanguardia en la gestión de la pandemia. Al aprovechar la tecnología y los modelos predictivos, los hospitales pueden tomar decisiones informadas que prioricen la atención y la seguridad del paciente durante estos tiempos de incertidumbre.

Con base en las simulaciones, encontramos que aunque el número de casos infectados aumentó ocasionalmente, estos casos infectados siempre recibirían tratamiento en establecimientos de salud, como se refleja en la Figura 10. Sin embargo, cuando hay un aumento significativo de casos (por ejemplo, en junio de 2021 y enero de 2022), los centros de salud existentes no pueden manejar el aumento de casos, lo que resulta en la denegación de admisión a pacientes con COVID-19. Se requiere planificación estratégica para abordar este problema. Los hospitales pueden implementar planes de respuesta de emergencia para ampliar la capacidad y los recursos en momentos de alta demanda. Al prepararse proactivamente para posibles aumentos repentin

Machine Translated by Google

En estos casos, los hospitales pueden garantizar que todos los pacientes reciban la atención que necesitan durante la pandemia. Además, los hospitales pueden colaborar con otros centros de atención médica para coordinar los traslados de pacientes y optimizar la disponibilidad de camas. Este esfuerzo coordinado puede ayudar a aliviar la tensión en los hospitales individuales y garantizar que los pacientes puedan recibir atención oportuna y adecuada. Esto aumentó el número de gastos en salud, como se muestra en las Figuras 11 a 13, y el número de muertes. Con base en estos hallazgos, hay dos cosas en las que el gobierno debe centrarse al manejar el COVID-19. La primera es que el gobierno necesita adoptar una política que pueda estabilizar el número de nuevos casos de infección cada semana. Por supuesto, reducir el número de nuevas infecciones diarias a 0 es imposible teniendo en cuenta el estado actual de la COVID-19, que se ha vuelto endémica. El segundo enfoque debería ser fortalecer y ampliar las instalaciones de salud existentes para dar cabida al creciente número de casos. Esto enfatiza que una inversión adecuada en camas adicionales en los centros de atención médica ayudará a reducir la carga de los hospitales y evitará el rechazo de pacientes con COVID-19, lo que en última instancia conducirá a menores costos de atención médica y tasas de mortalidad.

Además, invertir en campañas de sensibilización y educación en salud pública puede ayudar a promover medidas preventivas y comportamientos responsables entre la población. Al enfatizar la importancia de la vacunación, el uso de mascarillas y el distanciamiento social, podemos trabajar colectivamente para gestionar eficazmente la propagación del virus. Sin embargo, es posible suprimir el número de casos nuevos a un ritmo bajo y estable. Si esto se puede hacer, no habrá casos en los que el hospital niegue la admisión a pacientes. El segundo enfoque es la adición de instalaciones de salud; cuanto mayor sea la capacidad del gobierno para agregar camas por período, menos probable será que los proveedores de atención médica no puedan admitir pacientes. En este estudio, utilizamos el parámetro n = 0,05, lo que significa que si la capacidad del gobierno para agregar camas es mayor que eso, el número de pacientes a los que se les niega la admisión disminuirá cuando se produzca un pico, o tal vez pueda ser 0. Sin embargo, si el Si la capacidad del gobierno es menor, el número de casos de admisión denegada será aún mayor. Los pacientes que son rechazados de la atención médica suelen ser aquellos con síntomas graves que requieren un tratamiento adecuado en un centro de atención sanitaria. Estas personas requieren atención urgente para manejar sus condiciones de manera efectiva. Cuando se rechaza a un gran número de estos pacientes, se puede llegar a una situación crítica en la que su salud se deteriora rápidamente. Sin una intervención médica oportuna, sus posibilidades de recuperación disminuyen significativamente. Este aumento de casos graves no tratados puede aumentar sustancialmente las tasas de mortalidad. Por tanto, el sistema sanitario debe garantizar que los pacientes con síntomas graves reciban la atención necesaria. No hacerlo no solo afecta los resultados de salud individuales, sino que también contribuye a una tasa de mortalidad general más alta dentro de la comunidad.

Esto pone de relieve la importancia de la planificación estratégica y la inversión en infraestructura sanitaria para garantizar una capacidad adecuada en momentos de mayor demanda. También subraya las posibles consecuencias de una intervención gubernamental inadecuada en la gestión del sistema de salud.

6. Conclusiones

Este estudio desarrolló un modelo discreto susceptible-infectado-susceptible (SIS) para proyectar el número de pacientes que requieren hospitalización. El modelo considera la posibilidad de hacer una transición de la gravedad de los síntomas del paciente, ya sea de leves a graves o viceversa . Los resultados mostraron que una intervención temprana y medidas de contención eficaces podrían reducir significativamente la carga sobre los sistemas sanitarios. Este enfoque dinámico para modelar los resultados de los pacientes puede ayudar a informar la asignación de recursos y las estrategias de salud pública durante los brotes de enfermedades. Al predecir con precisión las necesidades de hospitalización, los centros de atención médica pueden prepararse mejor para los aumentos repentinos de pacientes y asignar recursos de manera efectiva. Este enfoque proactivo puede, en última instancia, salvar vidas al garantizar que los pacientes reciban el nivel adecuado de atención de manera oportuna. Además, destaca la importancia de implementar medidas preventivas para controlar la propagación de enfermedades infecciosas. Este enfoque proactivo puede, en última instancia, salvar vidas y evitar que el sistema de salud se abrume. Los resultados del número proyectado de pacientes se utilizan luego para determinar el costo del tratamiento y las camas adicionales según las disposiciones establecidas por el Gobie

Machine Translated by Google

para una planificación y elaboración de presupuestos eficientes para garantizar que los hospitales tengan los recursos necesarios para adaptarse a la afluencia prevista de pacientes.

Al utilizar este modelo, los centros de atención médica pueden optimizar su respuesta a posibles aumentos en el volumen de pacientes y brindar una mejor atención a quienes la necesitan. El modelo creado se simula con datos de COVID-19 de la provincia de Java Occidental. Este enfoque basado en datos ayuda a los hospitales a anticipar y prepararse para aumentos repentinos en el número de pacientes y, en última instancia, mejorar la calidad general de la atención brindada. Además, al analizar tendencias y patrones en los datos, los centros de atención médica pueden tomar decisiones informadas para mejorar su capacidad y estrategias de respuesta. Este estudio encontró que el escenario de distanciamiento social dio el mejor resultado en la intervención COVID-19. El distanciamiento social reduce el número de personas hospitalizadas y al mismo tiempo mantiene un costo razonable. El costo estimado resultante del tratamiento de pacientes con COVID-19 se puede utilizar como insumo para políticas y como alerta al gobierno sobre los gastos que pueden ocurrir en diversos escenarios. Esta información puede ayudar a los centros de atención sanitaria y a los responsables de la formulación de políticas a tomar decisiones informadas sobre la asignación de recursos y la planificación para futuros brotes. Al analizar los datos de este estudio, las autoridades pueden implementar medidas efectivas para controlar la propagación del virus y minimizar el impacto económico en el sistema de salud. Además, comprender las implicaciones económicas de las hospitalizaciones puede ayudar a desarrollar estrategias para garantizar una financiación y un apoyo adecuados a los sistemas de atención sanitaria en tiempos de crisis. Estos datos también pueden ser valiosos para predecir posibles cargas financieras para las personas y familias afectadas por el COVID-19.

Esta investigación subraya la importancia crítica de gestionar eficazmente las tasas de infección y prepararse adecuadamente para la atención al paciente en caso de una pandemia. La pandemia de COVID-19 ha impactado profundamente tanto a la población como a la economía, lo que ilustra la necesidad de contar con planes de contingencia sólidos para garantizar una mejor preparación para futuras pandemias. Las respuestas gubernamentales iniciales desempeñaron un papel fundamental a la hora de contener la propagación del virus. Se implementaron intervenciones rápidas, como cierres, restricciones de viaje y mandatos de distanciamiento social, para evitar que el sistema de salud se viera abrumado p
Al mismo tiempo, el gobierno emprendió esfuerzos significativos para aumentar la capacidad de camas en los centros de atención médica, incluida la rápida construcción de hospitales temporales, la conversión de las instalaciones existentes en centros de tratamiento de COVID-19 y la adquisición de equipos y suministros médicos adicionales . Estas medidas fueron diseñadas para abordar los peores escenarios potenciales que involucran aumentos repentinos y sustanciales en las tasas de infección. Las estrategias proactivas son esenciales para minimizar las tasas de mortalidad y preservar vidas humanas. Al ampliar la capacidad sanitaria, los gobiernos pueden garantizar que haya atención médica adecuada disponible para todos los pacientes, reduciendo así la presión sobre los recursos existentes y manteniendo la funcionalidad del sistema sanitario para servicios esenciales más allá del tratamiento de la COVID-19. Este estudio ilustra que un enfoque integral, que abarque tanto el control de infecciones como la expansión de la capacidad de atención médica, es primordial para mitigar los efectos perjudiciales de las pandemias. La gestión eficaz de las tasas de infección mediante intervenciones específicas, combinadas con mejoras estratégicas de la infraestructura sanitaria, puede reducir significativamente el impacto en la salud pública y la economía . Esta investigación aboga por el desarrollo continuo y el perfeccionamiento de los planes de preparación para una pandemia para protegerse contra futuros brotes y garantizar un sistema de salud resiliente capaz de responder a las crisis de manera eficiente y efectiva.

En este estudio, utilizamos el parámetro n = 0,05, lo que significa que si la capacidad del gobierno para agregar camas es mayor que eso, entonces el número de admisiones denegadas disminuirá. La capacidad del gobierno para agregar camas es mayor que eso, entonces el número de pacientes. La admisión denegada disminuirá cuando haya un aumento, o posiblemente podría ser 0. Sin embargo, si la capacidad del gobierno es menor, entonces el número de casos de admisión denegada será aún mayor. Esto resalta la importancia de la planificación estratégica y la inversión en infraestructura de salud para garantizar una capacidad adecuada en tiempos de mayor demanda. También subraya las posibles consecuencias de una intervención gubernamental inadecuada en la gestión del sistema de salud. La limitación de este estudio es que solo examina la dinámica entre los componentes financieros de la intervención pandémica sin prestar atención a su impacto en la macroeconomía en su conjunto. El víncu

Machine Translated by Google

El financiamiento y la macroeconomía también son importantes, considerando que de ambos depende la sostenibilidad de la sociedad en una situación de pandemia.

En investigaciones futuras, estimar con precisión este parámetro arrojará resultados más precisos con respecto a los costos asociados con el manejo de la pandemia de COVID-19. Con un valor bien estimado del parámetro n, los hospitales pueden reducir la cantidad de pacientes que deben rechazar y disminuir los gastos asociados con la ampliación de la capacidad hospitalaria. Esto se debe a que una estimación precisa de n permitirá determinar el número óptimo de camas adicionales requeridas por el gobierno. En consecuencia, esto minimiza la disparidad entre el número actual de camas disponibles y el número de nuevas infecciones, asegurando una asignación más eficiente de recursos y una mejor preparación para futuras olas de la pandemia.

Contribuciones de los autores: Conceptualización, DSP y S.; metodología, NA; software, DSP; validación, DSP, S. y NMY; análisis formal, S.; investigación, NA y NMY; recursos, NA; curación de datos, DSP; redacción: preparación del borrador original, DSP; redacción: revisión y edición, S. y NMY; visualización, DSP; supervisión, NA; administración de proyectos, S.; adquisición de financiación, S. Todos los autores han leído y aceptado la versión publicada del manuscrito.

Financiamiento: Esta investigación fue financiada por la beca de excelencia de posgrado Padjadjaran (BUPP) número 2203/UN6.3.1/PT.00/2022.

Declaración de disponibilidad de datos: Los datos originales presentados en el estudio están disponibles abiertamente en Github en https://github.com/DhikaSuryaP/SIS-DATASET.

Agradecimientos: Los autores desean agradecer al Decano de la Facultad de Matemáticas y Ciencias Naturales, Universitas Padjadjaran, y a la Dirección de Investigación y Servicio Comunitario (DRPM), que ha otorgado una subvención: Pendidikan Magister Menuju Doktor Bagi Sarjana Unggul (PMDSU/BUPP).

Conflictos de intereses: Los autores declaran no tener conflictos de intereses.

Referencias

1. Walløe, L. 3 Peste bubónica medieval y moderna: algunas continuidades clínicas. Medicina. Historia. 2008, 52, 59–73. [Referencia cruzada]
2. Tumpey, TM; Basler, CF; Aguilar, PV; Zeng, H.; Solórzano, A.; Swayne, DE; Cox, Nueva Jersey; Katz, JM; Taubenberger, JK; Palese, P.; et al. Caracterización del virus de la pandemia de gripe española de 1918 reconstruido. Ciencia 2005, 310, 77–80. [Referencia cruzada] [PubMed]
3. Sabin, California; Lundgren, JD La historia natural de la infección por VIH. actual. Opinión. VIH SIDA 2013, 8, 311. [CrossRef]
4. Lam, WK; Zhong, NS; Tan, WC Overview sobre el SARS en Asia y el mundo. Respirología 2003, 8, S2-S5. [Referencia cruzada] [PubMed] 5. Ciotti, M.; Ciccozzi, M.; Terrinoni, A.; Jiang, WC; Wang, CB; Bernardini, S. La pandemia de COVID-19. Crítico. Rev. Clin. Laboratorio. Ciencia. 2020, 57, 365–388. [Referencia cruzada] [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. Una base de datos de panel global de políticas pandémicas (Oxford COVID-19 Government Response Tracker). Nat. Tararear. Comportamiento. 2021, 5, 529–538. [Referencia cruzada] [PubMed]
7. Izumi, T.; Sukhwani, V.; Surjan, A.; Shaw, R. Gestión y respuesta a pandemias en instituciones de educación superior: inicial aprendiendo del COVID-19. Int. J. Resiliencia ante desastres. Entorno construido. 2021, 12, 51–66. [Referencia cruzada]
8. Bai, HM; Zaid, A.; Catrín, S.; Ahmed, K.; Ahmed, A. Las implicaciones socioeconómicas de la pandemia de coronavirus (COVID-19): una revisión. Int. J. Cirugía. 2020, 8, 8-17.
9. Rahim, F.; Allen, R.; Barroy, H.; Gores, L.; Kutzin, J. Fondos COVID-19 en respuesta a la pandemia; Fondo Monetario Internacional: Washington, DC, EE.UU., 2020.
10. Sen-Crowe, B.; McKenney, M.; Elkbuli, A. Financiamiento de la prevención de salud pública y la preparación para emergencias en los Estados Unidos: ¿Estamos preparados para la próxima pandemia? Ana. Medicina. Cirugía. 2020, 59, 242. [Referencia cruzada]
11. Rudolph, CW; Alan, B.; Clark, M.; Hertel, G.; Hirschi, A.; Kunze, F.; Shockley, K.; Shoss, M.; Sonnentag, S.; Zacher, H. Pandemias: implicaciones para la investigación y la práctica en psicología industrial y organizacional. Órgano de Indiana. Psicólogo. 2021, 14, 1–35. [Referencia cruzada]
12. Bakker, A.; Cai, J.; Zenger, L. Temas futuros de la investigación en educación matemática: una encuesta internacional antes y durante el pandemia. Educativo. Semental. Matemáticas. 2021, 107, 1–24. [Referencia cruzada] [PubMed]
13. Adiga, A.; Dubhashi, D.; Lewis, B.; Marathe, M.; Venkatramanan, S.; Vullikanti, A. Modelos matemáticos para la pandemia de covid-19: un análisis comparativo. J. Instituto Indio. Ciencia. 2020, 100, 793–807. [Referencia cruzada] [PubMed]
14. Jewell, NP; Lewnard, JA; Jewell, BL Modelos matemáticos predictivos de la pandemia de COVID-19: principios subyacentes y valor de las proyecciones. JAMA 2020, 323, 1893–1894. [Referencia cruzada] [PubMed]
15. Dudine, P.; Hellwig, KP; Jahan, S. Un marco para estimar el gasto en salud en respuesta a COVID-19; Fondo Monetario Internacional : Washington, DC, EE.UU., 2020.

Machine Translated by Google

16. Torres-Rueda, S.; Sweeney, S.; Bozzani, F.; Naylor, NR; panadero, T.; Pearson, C.; Eggo, R.; Procter, SR; Davies, N.; Quaife, M.; et al.
Opciones difíciles: exploración de los costos del sector de la salud de las respuestas políticas al COVID-19 en países de ingresos bajos y medios.
Globo BMJ. Salud 2021, 6, e005759. [Referencia cruzada] [PubMed]
17. Cocinero, MJ; Dri, GG; Logan, P.; Bronceado, JB; Flahault, A. COVID-19 Down Under: la experiencia pandémica inicial de Australia. Int. J.
Reinar. Res. Salud Pública 2020, 17, 8939. [CrossRef]
18. McQuade, ST; Hombre de peso, R.; Merrill, Nueva Jersey; Yadav, A.; Trélat, E.; Allred, SR; Piccoli, B. Control del brote de COVID-19 mediante un
Modelo SEIR extendido. Matemáticas. Modelos Métodos Aplica. Ciencia. 2021, 31, 2399–2424. [Referencia cruzada]
19. Samuel, J.; Sinha, S. Control óptimo en pandemias. Física. Rev. E 2021, 103, L010301. [Referencia cruzada] [PubMed]
20. De Lara-Tuprio, EP; Estuar, señor; Sescón, JT; Lubangco, CK; Castillo, RC; Teng, TR; Tamayo, LP; Macalalag, JM; Vedeja, GM Pérdidas económicas por casos de COVID-19 en Filipinas:
un modelo dinámico de compensaciones entre políticas económicas y de salud.
Humanidad. Soc. Ciencia. Comunitario. 2022, 9, 111. [Referencia cruzada]
21. Huppert, A.; Katriel, G. Modelado matemático y predicción en epidemiología de enfermedades infecciosas. Clínico. Microbiol. Infectar.
2013, 19, 999–1005. [Referencia cruzada]
22. Álamo, T.; Reina, Director General; Millán, P. Métodos basados en datos para monitorear, modelar, pronosticar y controlar la pandemia de covid-19: Aprovechando
ciencia de datos, epidemiología y teoría del control. arXiv 2020, arXiv:2006.01731.
23. Myall, A.; Precio, J.; Melocotón, R.; Abbas, M.; Mookerjee, S.; Ahmad, I.; Ming, D.; Zhu, Nueva Jersey; Ramzan, F.; Weisse, A.; et al. Predicción de la
aparición de COVID-19 en el hospital mediante redes de contacto con pacientes: un estudio observacional. Int. J. Infectar. Dis. 2022, 116, S109-S110.
[Referencia cruzada]
24. Jordán, E.; Shin, DE; Leekha, S.; Azarm, S. Optimización en el contexto de la predicción y el control de COVID-19: una revisión de la literatura.
Acceso IEEE 2021, 9, 130072–130093. [Referencia cruzada] [PubMed]
25. Vistiendo, HJ; Rohani, P.; Keeling, MJ Modelos apropiados para el manejo de enfermedades infecciosas. PLoS Med. 2005, 2, e174.
[Referencia cruzada] [PubMed]
26. Brauer, F.; Fenga, Z.; Castillo-Chaveza, C. Modelos de epidemias discretas. Matemáticas. Biosci. Ing. 2010, 7, 1-15. [PubMed]
27. Allen, LJ; Burgin, AM Comparación de SIS y SIR deterministas y estocásticos. Matemáticas. Biosci. 2000, 163, 1–33. [Referencia cruzada]
[PubMed]
28. Allen, LJS Algunos modelos epidémicos SI, SIR y SIS en tiempo discreto. Matemáticas. Biosci. 1994, 124, 83–105. [Referencia cruzada] [PubMed]
29. Zhou, Y.; Ma, Z. Un modelo epidémico discreto para la transmisión y el control del SARS en China. Matemáticas. Computadora. Modelo. 2004, 40, 1491–1506.
[Referencia cruzada] [PubMed]
30. Škulj, D. Cadenas de Markov de tiempo discreto con probabilidades de intervalo. Int. J. Aprox. Razón. 2009, 50, 1314-1329. [Referencia cruzada]
31. Goodwin, P.; Lawton, R. Sobre la asimetría del MAPE simétrico. Int. J. Pronóstico. 1999, 15, 405–408. [Referencia cruzada]
32. Jawa Barat, PP Dashboard Statistik Kasus COVID-19 Provinsi Jawa Barat. Pemerintah Daerah Provinsi Jawa Barat; 2024.
Disponible en línea: https://dashboard.jabarprov.go.id/id/dashboard-pikobar/trace/statistik (consultado el 21 de junio de 2024).
33. Jawa Barat, PP Keterisian Tempat Tidur (BOR). Pemerintah Daerah Provinsi Jawa Barat; 2024. Disponible en línea: https://dashboard.jabarprov.go.id/id/dashboard-pikobar/treatment/
fasyankes (consultado el 21 de junio de 2024).

Descargo de responsabilidad/Nota del editor: Las declaraciones, opiniones y datos contenidos en todas las publicaciones son únicamente de los autores y contribuyentes individuales y no de MDPI ni de los editores. MDPI y/o los editores renuncian a toda responsabilidad por cualquier daño a personas o propiedad que resulte de cualquier idea, método, instrucción o producto mencionado en el contenido.

Machine Translated by Google

cálculo

MDPI

Artículo

Diseño y evaluación de un vehículo hipersónico Waverider. Usando DSMC

Angelos Klothakis y Ioannis K. Nikolos *

Laboratorio de Turbomáquinas y Dinámica de Fluidos, Escuela de Ingeniería y Gestión de Producción, Universidad Técnica de Creta, 73100 Chania, Grecia; aklothakis@gmail.com * Correspondencia: inikolos@tuc.gr

Resumen: Este trabajo investiga el rendimiento aerodinámico de un waverider hipersónico diseñado para operar a Mach 7, enfocándose en optimizar su diseño a través de métodos computacionales avanzados. Utilizando el método de simulación directa Monte Carlo (DSMC), se simuló el campo de flujo tridimensional alrededor del waverider diseñado específicamente para comprender las interacciones de las ondas de choque y la dinámica térmica a una altitud de 90 km. El enfoque computacional incluyó un mallado detallado alrededor de los bordes críticos del vehículo y el uso de isosuperficies tridimensionales del criterio Q para mapear con precisión las estructuras de choque y vórtice. Resultados de simulación adicionales demuestran que la waverider logró una relación sustentación-resistencia de 2,18, lo que confirma un rendimiento aerodinámico eficiente en un ángulo de ataque de cero grados. Los hallazgos del estudio contribuyen a una comprensión más amplia de la dinámica de los vuelos hipersónicos, destacando la importancia de un modelado computacional preciso en el desarrollo de vehículos capaces de operar eficazmente en entornos cercanos al

Palabras clave: vehículos hipersónicos; simulación directa Monte Carlo; rendimiento aerodinámico; dinámica de fluidos computacional ; jinete de la onda hipersónico

1. Introducción

El waverider es una configuración distinta de un vehículo hipersónico diseñado para mantener la onda de choque generada por el vehículo unido a su borde de ataque, ofreciendo numerosas ventajas [1]: (a) esta onda de choque separa efectivamente los campos de flujo en la parte superior y superficies inferiores del vehículo, evitando así que el flujo de alta presión se derrame desde la superficie inferior a la superior en el borde de ataque; (b) asegura un flujo uniforme en la superficie inferior, que es óptimo para la admisión de motores scramjet; (c) el diseño del waverider se deriva mediante ingeniería inversa a partir de un campo de flujo conocido alrededor de una forma cónica. Este enfoque de diseño se desarrollará en secciones posteriores de este trabajo.

El concepto de waverider fue propuesto por primera vez por Nonweiler en 1963 [2]. En ese momento, la tecnología disponible no era lo suficientemente avanzada como para producir un vehículo hipersónico que respirara aire. Sandlin y Pessin ofrecieron una explicación detallada de la metodología de diseño de waveriders [1]. En el trabajo de Sziroczak y Smith [3] se analiza un amplio análisis de los importantes desafíos de diseño asociados con los vehículos de vuelo hipersónicos, donde se examinan dos tipos de vehículos, los transportes hipersónicos y los lanzadores espa Aunque se diferencian de los waveriders, comparten muchos desafíos de diseño y construcción. Zhang et al. empleó el método tridimensional de transformación de función de clase-forma (CST) para determinar las formas geométricas de los vehículos deslizantes hipersónicos (HGV) [4].

Para evaluar la aerodinámica de estos vehículos se utilizaron métodos de modelado invisible, basados en la teoría de Newton modificada y la ecuación de Prandtl-Meyer . El uso del algoritmo de optimización multiobjetivo NSGA-II ayudó a lograr diseños con altas relaciones de sustentación-arrastre y una eficiencia volumétrica sustancial. En su doctorado. En su tesis, K. Kontogiannis consideró la parametrización y manipulación de las geometrías del antecuerpo de las waverider, proponiendo un nuevo método de diseño tridimensional de vanguardia, pasando de inverso a directo.

check for updates

Cita: Klothakis, A.; Nikolos, Illinois Diseño y evaluación de un vehículo Waverider hipersónico utilizando DSMC. Computación 2024, 12, 140. https://doi.org/ 10.3390/ computation12070140

Editor académico: Jeffrey S. Marshall

Recibido: 17 de mayo de 2024
Revisado: 24 de junio de 2024
Aceptado: 3 de julio de 2024
Publicado: 9 de julio de 2024

Copyright: © 2024 por los autores. Licenciatario MDPI, Basilea, Suiza. Este artículo es un artículo de acceso abierto. distribuido bajo los términos y condiciones de los Creative Commons Licencia de atribución (CC BY) (https:// creativecommons.org/licenses/by/ 4.0/).

Machine Translated by Google

Metodologías de diseño [5]. Además, Son et al. describió un marco de optimización para el diseño inverso de waveriders hipersónicos [6].

Desde su introducción, la waverider ha sido un punto focal de investigación. Después de conceptualizar el diseño, la siguiente fase implica su evaluación analítica. Se emplean varios métodos , como correlaciones de ingeniería, pruebas de vuelo, pruebas en túnel de viento y simulaciones numéricas, no sólo para el análisis sino también para validar conceptos y acumular conocimientos. Si bien son efectivos en el dominio subsónico, estos métodos han mostrado limitaciones en cuanto a confiabilidad e implementación a velocidades hipersónicas. La investigación en curso tiene como objetivo perfeccionar estos métodos para dominar el dominio hipersónico.

Durante la búsqueda inicial del vuelo hipersónico, la NASA diseñó, construyó y probó un vehículo hipersónico [7]. El vehículo demostró que era capaz de alcanzar velocidades de hasta Mach 8. Sin embargo, una mirada más cercana a los datos del túnel de viento reveló un fenómeno interesante Se observó que la relación elevación-resistencia (L/D) del parámetro de rendimiento aerodinámico del vehículo disminuía a medida que aumentaba el número de Mach. Kuchemann documentó una tendencia decreciente en el L/D máximo con números de Mach crecientes a través de una extensa investigación empírica [8], destacando un desafío significativo en el diseño y la metodología aerodinámicos tradicionales en el régimen hipersónico. Además, Bowcutt introdujo un enfoque multidisciplinario para optimizar las configuraciones de waverider, logrando relaciones L/D relativamente más altas con números de Mach más altos [9], un hallazgo corroborado posteriormente por otros investigadores [10,11]. Nonweiler desarrolló originalmente la técnica de diseño waverider en la década de 1950 para crear un ala hipersónica con fines de reentrada [12]. A pesar de los primeros desafíos debido a la agudeza inherente del borde de ataque del waverider, que condujo a cargas aerotermodinámicas significativas, y las eficiencias volumétricas limitadas de las configuraciones delgadas iniciales [7] que no tenían en cuenta los efectos viscosos, los avances en los métodos numéricos y los recursos computacionales en el La década de 1980 permitió a Bowcutt optimizar los waveriders prediciendo los efectos viscosos en su rendimiento [9]. Esto ha estimulado el interés y la investigación continuos sobre los diseños de waverider , aunque la aplicación práctica en la producción de vehículos hipersónicos operativos sigue siendo un desafío.

Desde que Nonweiler [2] introdujo el concepto de diseño del waverider, aprovechando la dinámica del flujo en cuña para crear el primer waverider en la ciencia aeroespacial, numerosos estudios de diseño han tenido como objetivo refinar y optimizar su concepto inicial. La mayoría de estos estudios modelan el flujo como bidimensional y no viscoso, ya sea plano o axisimétrico [13-22]. Un subconjunto más pequeño ha considerado el flujo no viscoso tridimensional, tanto sin reacciones químicas como con ellas, como en las referencias [23-28] y [29,30], respectivamente. Sólo un número limitado de investigaciones han abordado el flujo viscoso tridimensional, incorporando turbulencia [31]. Este estudio se centra en analizar el campo de flujo viscoso tridimensional completo alrededor del waverider diseñado.

2. Metodología de diseño de Waverider

Los Waveriders se fabrican utilizando una metodología de diseño inverso, un proceso que aprovecha las características de un entorno de flujo hipersónico. Este enfoque utiliza las líneas de corriente del campo de flujo no viscoso después del choque como base para diseñar la superficie de la corriente de compresión, típicamente la superficie inferior de las geometrías waverider. El resultado final es una geometría aerodinámica optimizada para flujos hipersónicos. La geometría de la superficie inferior, definida por un conjunto de líneas de corriente adyacentes, asegura que el borde de ataque permanezca unido a la onda de choque. A continuación se muestra un resumen del algoritmo utilizado para generar geometrías waverider: • Determinación y diseño del campo de flujo inicial en la dirección del flujo. • Resolver el campo de flujo utilizando métodos de dinámica de fluidos computacional, como la ecuación de Taylor-Maccoll [32], o las ecuaciones de Euler o Navier-Stokes. • Mapeo de las líneas de corriente. • Aplicar la teoría del cono osculador en la dirección transversal. • Refinar y finalizar el diseño del modelo.

Para especificar las condiciones de flujo iniciales a partir de las cuales se deriva el waverider, primero se diseña un cono con un ángulo predeterminado δ . Entonces, las condiciones de contorno de entrada como Mach

Machine Translated by Google

f

Se establecen el número, la presión y la temperatura y se calcula el campo de flujo resultante. Después de calcular el campo de flujo, las líneas de corriente se pueden calcular resolviendo numéricamente el siguiente conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO):

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

tt

Utilizando el método de Runge-Kutta, el conjunto de ecuaciones anterior se puede integrar en el tiempo. para obtener cada coordenada aerodinámica.

En la Figura 1 se muestra una descripción esquemática de las líneas de corriente trazadas a partir de un choque cónico. Para establecer una geometría de waverider utilizando el método derivado del cono, primero se debe definir una curva base. Luego, esta curva se proyecta sobre el amortiguador, alineada paralelamente a la corriente libre, para formar el borde de ataque. Posteriormente, las líneas de corriente se trazan hacia atrás desde las posiciones del borde de ataque en el choque hasta el plano base, creando la superficie de compresión (inferior) del waverider. Más allá de la ecuación analítica (1), se puede emplear un método alternativo y más simple para trazar las líneas de corriente siguiendo trayectorias tangenciales a la superficie del cono base, facilitando así la generación de la geometría de la superficie de compresión. La ecuación de la curva base, esencial para diseñar el waverider, se ilustra alrededor del plano de simetría en la Figura 2. El ancho total del waverider se denota por l, donde lu representa la sección plana de la curva. La sección curva de la curva está determinada por la ecuación representada en la Figura 2. El valor de b se puede calcular a partir de l, lu y h, valores que se definen siguiendo la resolución del campo de flujo cónico inicial.

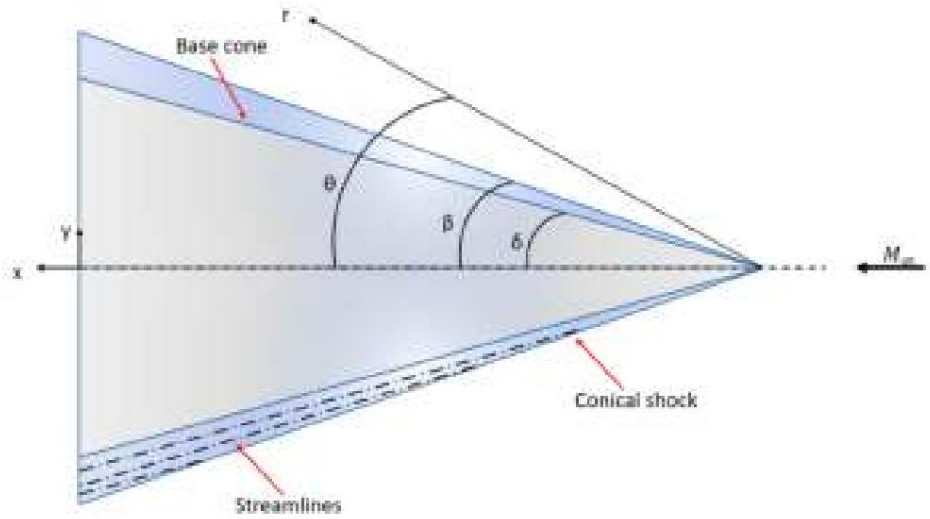


Figura 1. Representación esquemática de la metodología de diseño de waverider.

Para un diseño práctico de waverider, es crucial abordar la nitidez del borde de ataque. Por lo tanto, una estrategia de diseño pragmático incorpora técnicas de atenuación para gestionar esta característica. Despuntar el borde de ataque y las uniones donde convergen dos superficies de corriente mitiga los efectos del calentamiento y da como resultado una geometría más factible para la fabricación . Sin embargo, el embotamiento se desvía del diseño ideal del waverider, permitiendo cierta fuga de presión desde la superficie inferior a la superior, lo que a su vez aumenta la resistencia y disminuye la eficiencia aerodinámica del waverider. Los estudios [33,34] han demostrado que, si bien el embotamiento reduce el flujo de calor experimentado por el vehículo, afecta negativamente a la relación elevación-resistencia (L/D). A pesar de esto, un diseño de waverider embotado aún puede ofrecer un rendimiento aerodinámico superior en comparación con otras alternativas de diseño. El alcance y la naturaleza del embotamiento son cruciales y requieren un equilibrio entre la reducción del estrés térmico y la optimización de la eficiencia aerodinámica. Con varias configuraciones posibles para una waverider, existen numerosos enfoques para diseñar un borde de ataque romo.

fm

Machine Translated by Google

tt

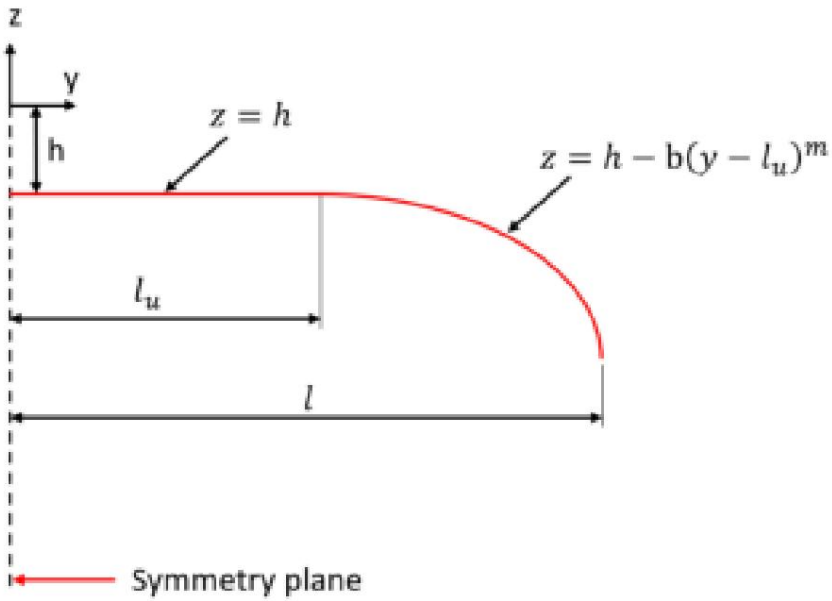


Figura 2. Representación esquemática de la metodología de diseño de waverider.

Hay dos métodos principales para desafilar el borde de ataque de una waverider: uno implica quitar material del borde, mientras que el otro implica agregarle material [35]. Tincher y Burnett han propuesto que la adición de material al borde de ataque genera una penalización aerodinámica menor en comparación con la eliminación de material [35]. Este enfoque se ve favorecido porque permite mantener una mayor parte del perfil aerodinámico original, minimizando potencialmente los impactos negativos en el rendimiento asociados con las modificaciones del borde de ataque.

3. Metodología de simulación directa Monte Carlo (DSMC) tz ffi

El método de simulación directa Monte Carlo (DSMC), desarrollado inicialmente por Graeme Bird a finales de los años 1960 [36], emplea un enfoque estadístico basado en partículas para estudiar los flujos de gas enrarecido. A diferencia de los métodos tradicionales que resuelven ecuaciones para predecir el comportamiento del flujo, DSMC simula el movimiento y las interacciones de una gran cantidad de partículas simuladas, cada una de las cuales representa una fracción de las moléculas reales en el campo de flujo. Este método desacopla el movimiento de las partículas y calcula las colisiones intermoleculares en breves intervalos de tiempo. Se ha demostrado matemáticamente que con un número suficiente de partículas por celda, DSMC converge a la ecuación de Boltzmann [37]. La técnica

DSMC comprende cuatro pasos principales: 1. Avanzar la posición de las partículas.
2. Clasificar las partículas en las respectivas celdas.
3. Cálculo de las colisiones intermoleculares.
4. Recopilación y análisis de las propiedades de las partículas.

En la práctica, el dominio computacional se segmenta en numerosas celdas, potencialmente divididas en subceldas basadas en una cuadrícula predefinida. Inicialmente, las partículas se asignan aleatoriamente dentro de cada celda, con posiciones iniciales, velocidades y estados de energía específicos. Estos pasos se repiten cíclicamente para cada paso de tiempo para modelar la evolución temporal del flujo. Las propiedades macroscópicas del flujo, como la velocidad, la presión, la densidad y la temperatura, se derivan de los promedios ponderados de estas propiedades de las partículas microscópicas. Para todas las simulaciones de flujo discutidas en este estudio, se utilizó el método DSMC detallado por Graeme Bird [36] e implementado en el Analizador estocástico paralelo de gas raro con precisión de tiempo (SPARTA) en Sandia National Laboratories [38] para examinar las características del flujo

Machine Translated by Google

4. Aplicación a un diseño específico de Waverider En

el desarrollo de un waverider diseñado para Mach 7, el paso inicial implicó crear un cono de 7 grados, 2 m de longitud con un borde de ataque romo de 1 cm, como se muestra en la Figura 3. Los tres El campo de flujo multidimensional alrededor de este cono se resolvió utilizando el método de simulación directa Monte Carlo (DSMC). Las condiciones de simulación se derivaron del modelo atmosférico estándar de EE. UU., que representa las características del flujo a una altitud de 90 km. Las condiciones de flujo específicas y los parámetros utilizados en la simulación DSMC se detallan en las Tablas 1 y 2, respectivamente. En las presentes simulaciones, el gas comprende 79% N2 y 21% O2; Los números de relajación rotacional y vibratorio se tratan como constantes. El número de relajación rotacional se estableció en Zrot = 5 tanto para N2 como para O2, mientras que se utilizó un número de relajación vibratoria Zvib = 52,600 para N2 y Zvib = 17,900 para O2 . Las colisiones elásticas se realizan utilizando el modelo de esfera blanda variable (VSS) [39], mientras que las colisiones inelásticas se realizan utilizando el modelo Borgnakke-Larsen [40]. Para la selección de socios de colisión, utilizamos el algoritmo de socios de casi colisión. Este algoritmo selecciona compañeros de colisión dentro de una esfera cuyo radio es la distancia que recorre una partícula en un paso de tiempo. Este enfoque permite el uso de un tamaño de celda de cuadrícula mayor que un camino libre medio mientras se mantiene la precisión de la colisión [41], aunque nuestro tamaño de celda está cerca de 1/3 del camino libre medio. Debido a las bajas temperaturas que se presentan en estas condiciones de vuelo, no se permiten reacciones químicas; por tanto, se supone que el flujo está en equilibrio térmico. Todas las simulaciones se realizaron en las instalaciones de supercomputación ARC

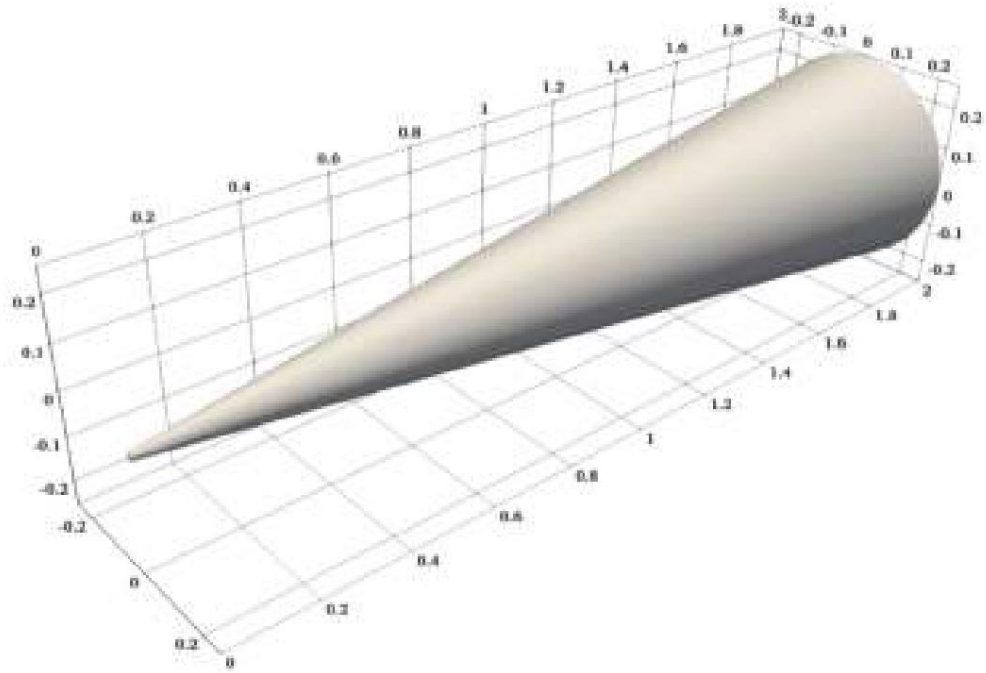


Figura 3. La geometría del medio cono de 7 grados utilizado para el cálculo del campo de flujo inicial.

Como se mencionó anteriormente, todas las simulaciones se llevaron a cabo utilizando el código DSMC paralelo de código abierto SPARTA (Stochastic Parallel Rarefied-gas Time-accurate Analyzer), que fue desarrollado en Sandia National Laboratories [38]. Después de calcular el campo de flujo tridimensional alrededor del cono de 7 grados, se extrajeron las líneas de flujo en planos paralelos específicos para delinear los límites de las ondas de choque. La Figura 4 ofrece una visualización de estas corrientes de campo de flujo calculadas. Los límites del choque son discernibles por la curvatura de las líneas de flujo en los planos lateral y superior, y por un cambio en el color del campo de flujo de velocidad en el sentido de la corriente en el plano posterior detrás del cono.

Machine Translated by Google

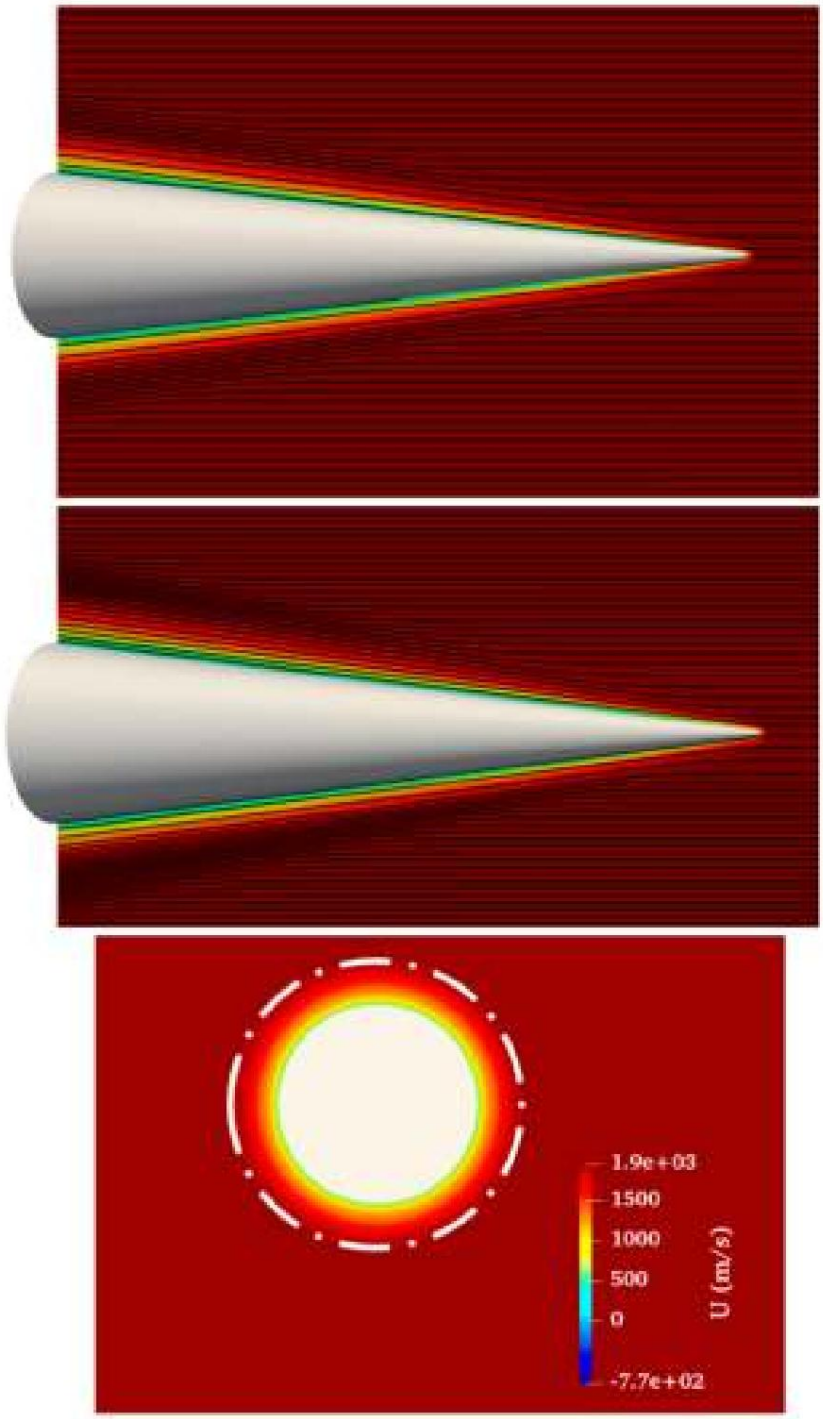


Figura 4. Líneas de corriente del campo de flujo tridimensional alrededor del cono de 7 grados. Vista lateral (arriba), vista superior (centro), vista trasera (abajo).

tt

Después de obtener los planos de flujo de la simulación DSMC, estos se importan a un software de diseño asistido por computadora (CAD) (SolidWorks 2021) para definir con precisión la geometría del waverider. El proceso de diseño comienza en la parte trasera del vehículo, elaborando curvas que son tangentes a la forma de choque circular observada, con la primera sección transversal característica mostrada en la Figura 5 (abajo) y la Figura 6. Como se ve en la Tabla 1, debido a la Con un número de Reynolds bajo, el flujo cae dentro del régimen laminar.

∞

Machine Translated by Google

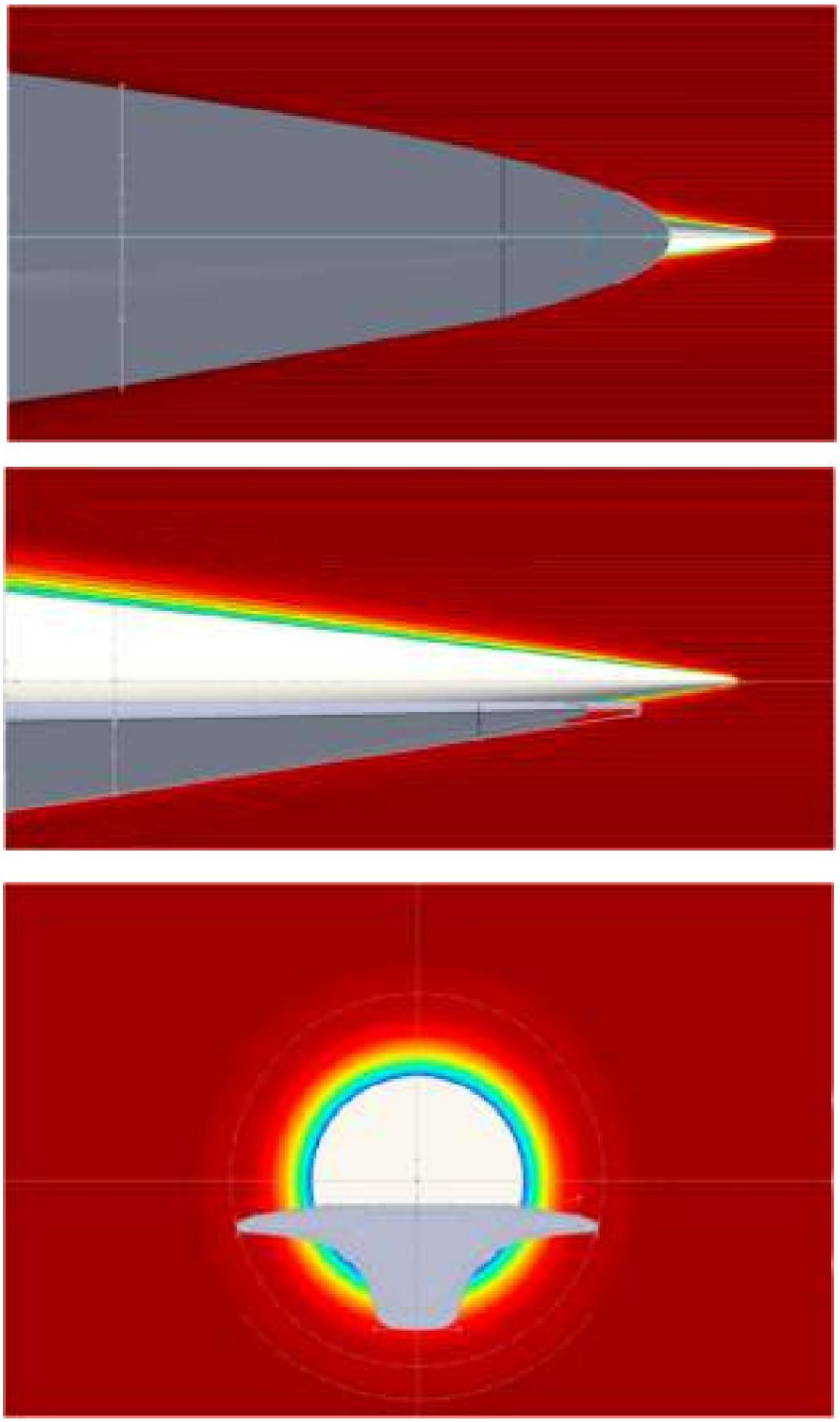


Figura 5. Superficie de Waverider a lo largo de las líneas de flujo, en comparación con el cono inicial. Vista superior (arriba), vista lateral (medio) y vista trasera (abajo). tt

Para garantizar que el diseño siga siendo práctico para aplicaciones del mundo real, los bordes de ataque del waverider están diseñados para ser romos en lugar de afilados. Para controlar con precisión la brusquedad de los bordes de ataque, se utiliza una curva Bézier de cuatro puntos para esculpir el perfil del borde de ataque. Este método proporciona la flexibilidad para ajustar con precisión la curvatura y así adaptar las propiedades aerodinámicas y térmicas del borde. Del mismo modo, se diseñan secciones adicionales a lo largo del eje longitudinal del waverider a intervalos de 30 cm. Tanto la superficie superior como la inferior del waverider están definidas por los límites de las ondas de choque generadas a partir de la geometría del cono de 7 grados inicialmente prescrita. Este enfoque asegur

Machine Translated by Google

que el diseño final del waverider se optimice dentro de las limitaciones establecidas por el flujo inicial condiciones y las necesidades aerodinámicas de los viajes hipersónicos.

Tabla 1. Parámetros para un flujo Mach 7 a 90 km de altitud.

Número de Mach, Ma∞	7
Reynolds, Re∞	2873
Velocidad de flujo libre, U∞ (m/s)	1965
Número de Knudsen, Kn	0,6
Ángulo de ataque, α (grados)	0
Densidad de corriente libre, ρ∞ (kg/m3)	9,62 × 10−6
Presión de flujo libre, p∞ (Pa)	0,55
Temperatura de corriente libre, T∞ (K)	196
Temperatura de la pared, Tw (K)	300
Gas	Aire

Tabla 2. Parámetros computacionales DSMC para flujo Mach 7 a 90 km de altitud.

Densidad numérica, Nd∞ (#/m3)	2,00 × 1020
Pasos de tiempo	3,0 × 10−7
Periodo transitorio	40.000
Período de muestra	100.000
Número de partículas	10,5 × 109
Número de celdas	183.664.000
Tiempo del reloj de pared (horas de CPU)	195.840

tt

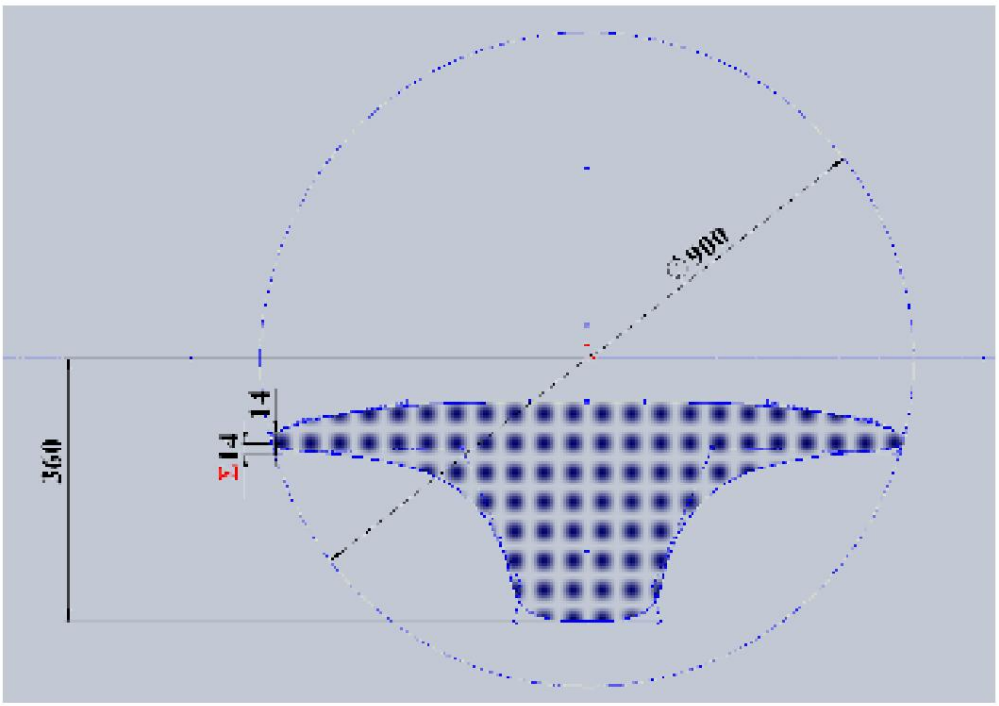


Figura 6. Sección trasera de la waverider (unidades en mm).

La figura 7 proporciona una representación visual de las distintas secciones del waverider. geometría, aunque no se muestran todas las secciones para mantener la claridad. Al completar Para el diseño de todas las secciones, se emplea una operación loft con restricciones de tangencia para generar las superficies del waverider. Para simplificar el proceso de diseño y aprovechar la Simetría del campo de flujo, inicialmente solo se diseña la mitad de la geometría final. Esta mitad es luego se refleja alrededor del plano de simetría para producir la estructura completa del vehículo.

Machine Translated by Google

La metodología de los conos osculadores, como se describió anteriormente, sirve como un marco computacional sólido para diseñar ondas hipersónicas. La aerodinámica hipersónica implica lidiar con temperaturas extremas, altas presiones e interacciones intrincadas de ondas de choque, lo que hace que el proceso de diseño sea inherentemente complejo. Al dividir la metodología en pasos discretos, este enfoque permite un enfoque detallado tanto en los aspectos teóricos como en los prácticos, guiando la creación de estos vehículos hipersónicos avanzados. Este proceso de diseño estructurado garantiza que se considere cada aspecto del rendimiento y la integridad estructural del vehículo , lo que lleva al desarrollo de waveriders hipersónicos eficaces y eficientes.

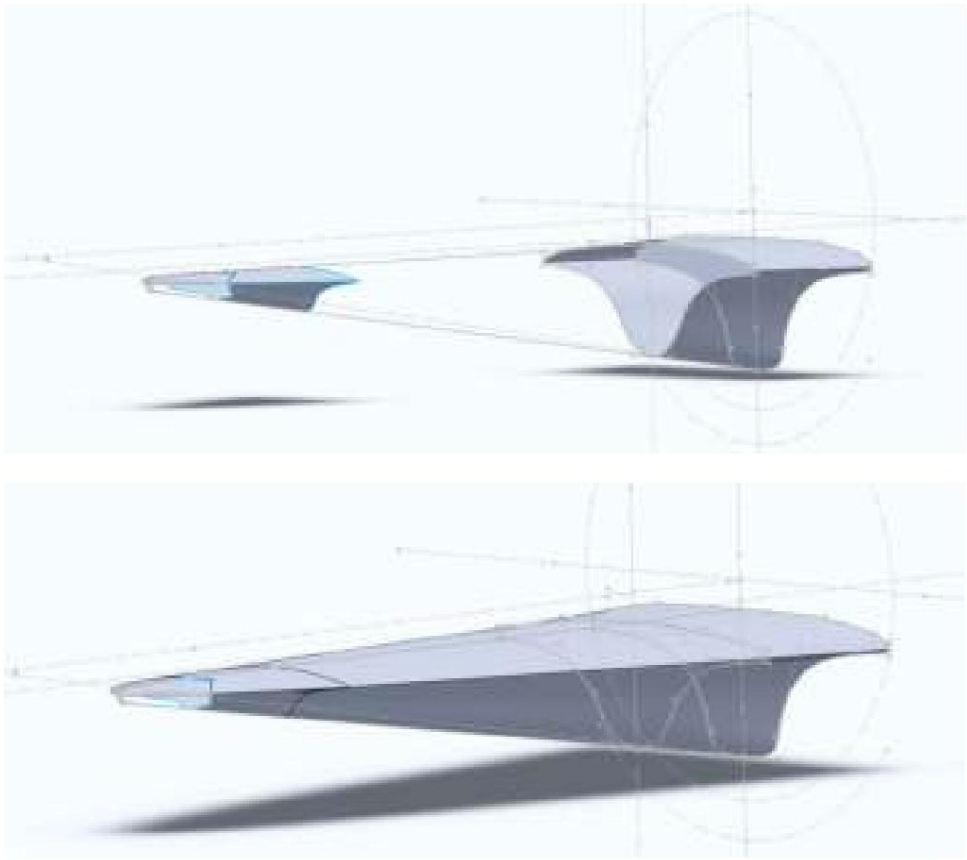


Figura 7. Lofts de superficie a lo largo de los perfiles del vehículo (arriba). Vista general del vehículo sin la sección delantera (abajo). tt

El proceso de diseño de un waverider hipersónico implica un enfoque meticuloso y estructurado, crucial para lograr eficiencia aerodinámica e integridad estructural en condiciones extremas. Aquí hay un desglose detallado de cada paso en el procedimiento de diseño: Paso 1: Iniciar en el extremo trasero del cono

El proceso de diseño comienza en el extremo posterior de un cono, que es fundamental para establecer las condiciones iniciales del campo de flujo. Aquí, los límites de las ondas de choque están meticulosamente definidos, como se muestran como líneas blancas discontinuas en la Figura 4 (abajo). Este paso fundamental es fundamental ya que establece el primer perfil del waverider. El diseño garantiza que tanto el borde de ataque como la superficie inferior de este perfil estén alineados tangencialmente con los límites de las ondas de choque, minimizando la resistencia y mejorando la eficiencia aerodinámica.

Paso 2: Perfilado de secciones transversales secuenciales

Avanzando, los planos de la sección transversal se toman a intervalos de aproximadamente 30 a 40 cm a lo largo de la longitud del cono. Cada plano proporciona una plantilla para dar forma a un segmento de la carrocería del vehículo, adaptado a las condiciones aerodinámicas específicas de ese segmento. este paso

Machine Translated by Google

Es similar a esculpir las partes individuales del vehículo, cada una optimizada para su dinámica de flujo particular.

Paso 3: operación de lofting

Los perfiles individuales generados en el Paso 2 luego se interconectan mediante una operación de lofting. Esta técnica fusiona los perfiles para formar la piel exterior continua del waverider, como se ve en la Figura 7. La operación utiliza métodos de interpolación para garantizar una transición suave del contorno entre las secciones. Sin embargo, los perfiles se estrechan a medida que se acercan al vértice del cono, lo que presenta desafíos para mantener la continuidad estructural y aerodinámica.

Paso 4: abordar la región de la nariz

En la región de la nariz, donde los perfiles se vuelven extremadamente delgados, las técnicas tradicionales de lofting son menos efectivas. Para solucionar esto, se introducen superficies límite que se ajustan a la curvatura del cono original. Como se muestra en la Figura 8, estas superficies forman la piel exterior de la sección de la nariz, integrándose perfectamente con las secciones elevadas para mantener la integridad aerodinámica.

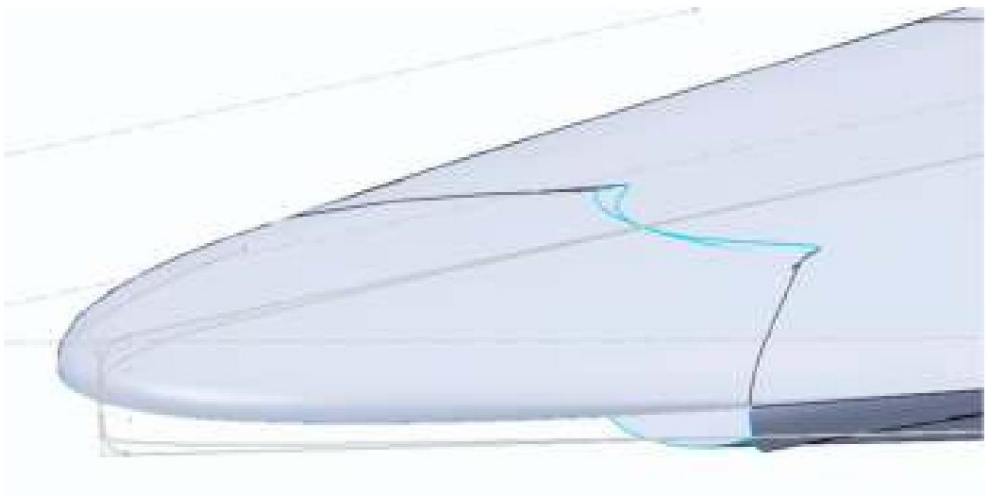


Figura 8. Sección de nariz con superficie límite superior.

Paso 5: Tejer superficies para simulación de fluidos

Siguiendo el diseño de la nariz y las secciones principales del cuerpo, se emplea una operación de tejido para fusionar todos los segmentos de la superficie en una estructura unificada e impermeable. Esta integración es crucial para la precisión de las simulaciones de dinámica de fluidos posteriores, asegurando que no existan brechas o inconsistencias que puedan comprometer la estabilidad o precisión del modelo. La finalización de este paso da como resultado una geometría completa del vehículo, ilustrada en la Figura 9.

Paso 6: Operación de duplicación

Para mejorar la eficiencia del diseño y reducir las demandas computacionales, inicialmente solo se modela la mitad del vehículo. La otra mitad se crea mediante una operación de reflejo a lo largo de un plano de simetría. Esta estrategia no solo simplifica el proceso de construcción sino que también facilita iteraciones y refinamientos más rápidos durante la fase de diseño, reduciendo efectivamente a la mitad los recursos computacionales necesarios.

Machine Translated by Google

Figura 9. (Arriba): Secciones de Waverider y la geometría completa. (Abajo tt): Diagrama de flujo del diseño. metodología.

Machine Translated by Google

Paso 7: Diseño de vanguardia refinado

Este paso en la metodología de diseño del waverider subraya la importancia de optimizar los bordes de ataque, que desempeñan un papel fundamental en el rendimiento general y la capacidad de supervivencia del vehículo en condiciones hipersónicas. A diferencia de los diseños hipersónicos típicos que cuentan con bordes de ataque afilados para minimizar la resistencia y maximizar la velocidad, este enfoque reconoce las ventajas y desventajas que conllevan dichos bordes afilados, incluidas altas concentraciones de tensión y una menor resiliencia térmica. Estos factores pueden provocar fallas estructurales cuando se los somete al intenso calor y presión del vuelo hipersónico.

Para abordar estos desafíos, el diseño incorpora curvas Bézier de tres puntos para embotar los bordes de ataque. Esta técnica permite un control preciso sobre la curvatura y tangencia de los bordes, lo que permite adaptarlos específicamente a las demandas de la aerodinámica de alta velocidad y la gestión del estrés térmico. Las curvas de Bézier no sólo ayudan a suavizar la transición del flujo sobre el vehículo, sino que también mejoran la robustez térmica al distribuir las tensiones y el calor de manera más uniforme por la superficie. El uso de curvas de Bézier en este contexto proporciona un equilibrio entre la eficiencia aerodinámica y la integridad estructural, asegurando que los bordes de ataque no sólo sean eficaces para minimizar la resistencia aerodinámica sino que también sean capaces de soportar las duras condiciones del vuelo hipersónico. Este enfoque matizado da como resultado un diseño de vanguardia que está optimizado geométricamente y termodinámicamente duradero, estableciendo un nuevo estándar para el diseño de vehículos hipersónicos. A través de estos pasos, el diseño del waverider se desarrolla con precisión, abordando tanto las altas demandas de los viajes hipersónicos como los aspectos prácticos de la fabricación y simulación de vehículos.

La metodología de los conos osculadores es un marco sofisticado que se basa en los campos de la aerodinámica, la dinámica de fluidos computacional (CFD) y las matemáticas aplicadas.
Este enfoque constituye un camino holístico y profundo para diseñar waveriders hipersónicos , abordando de manera efectiva los complejos desafíos asociados con los flujos hipersónicos y la dinámica estructural. La integración de estos dominios multidisciplinarios garantiza que el diseño del waverider resultante logre no solo eficiencia aerodinámica sino que también exhiba una mayor robustez térmica y estructural.

En la primera fase de esta exploración computacional, la creación de una malla computacional precisa es crucial. Esta malla es fundamental para capturar con precisión los intrincados detalles geométricos del waverider, particularmente en las áreas de alta sensibilidad, como los bordes de ataque. La precisión en el modelado de estos bordes es primordial porque incluso las más leves imprecisiones pueden tener importantes repercusiones aerodinámicas. Esta meticulosidad en el diseño de la malla es esencial para replicar las características geométricas previstas y garantizar que las simulaciones reflejen el verdadero comportamiento aerodinámico del waverider. La malla de superficie computacional utilizada en el método de Simulación Directa Monte Carlo (DSMC) está diseñada específicamente para acomodar las características únicas del diseño del waverider, como se ilustra en la Figura 10. Esta malla permite la simulación detallada y precisa de la dinámica del flujo alrededor el waverider, capturando las interacciones esenciales entre la superficie del vehículo y el flujo hipersónico. El método DSMC, conocido por su capacidad para modelar eficazmente la dinámica del gas enrarecido, es particularmente adecuado para analizar las propiedades aerodinámicas de los vehículos que operan en los bordes superiores de la atmósfera, donde los métodos CFD convencionales podrían tener dificultades. Para la simulación del diseño final del waverider, utilizamos el código SPARTA DSMC, consistente con la simulación del cono generador de choque inicial.

Esta consistencia se mantuvo porque las condiciones de vuelo no cambiaron. Como se muestra en la Figura 11 (abajo), el número de Knudsen se encuentra dentro del extremo superior del régimen de deslizamiento o dentro del régimen de transición.

Machine Translated by Google

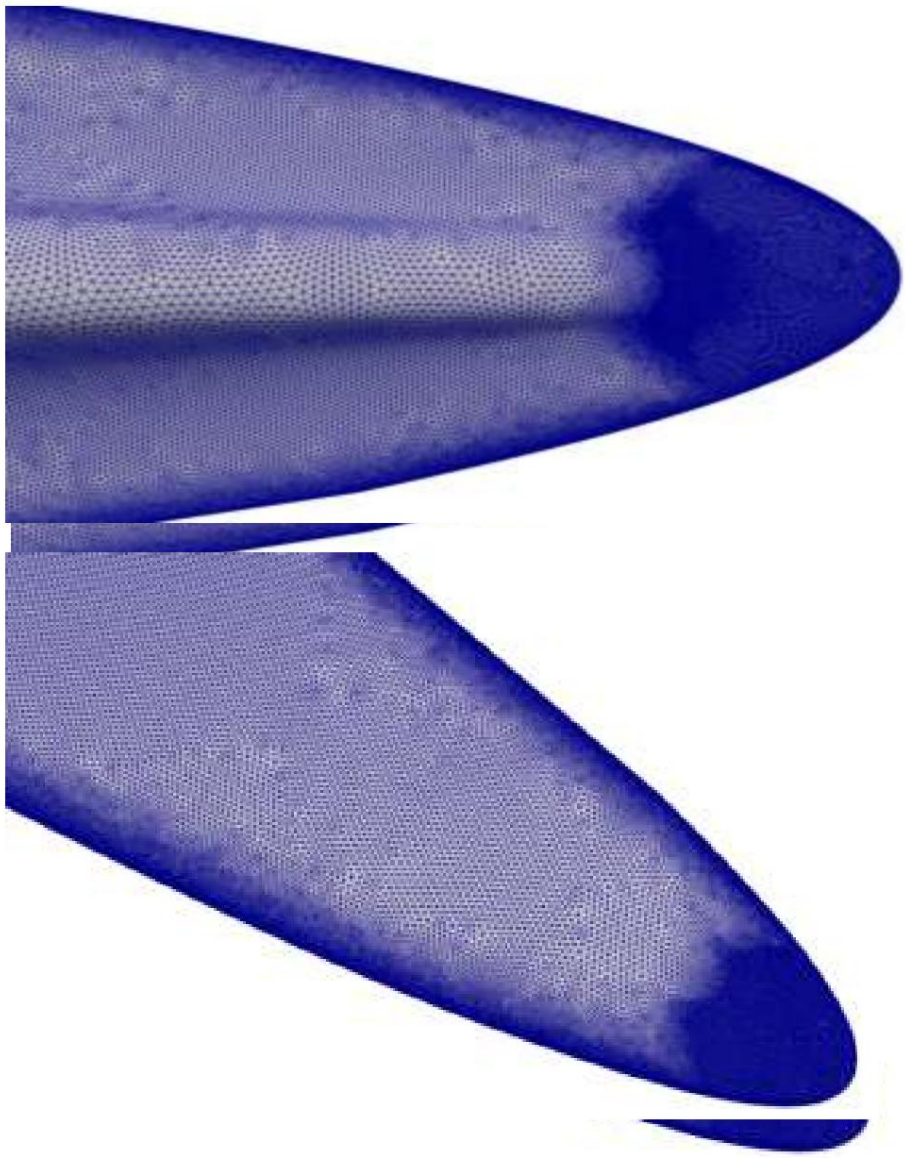


Figura 10. La malla de superficie utilizada. Superficie inferior (arriba) y vista isométrica (abajo).

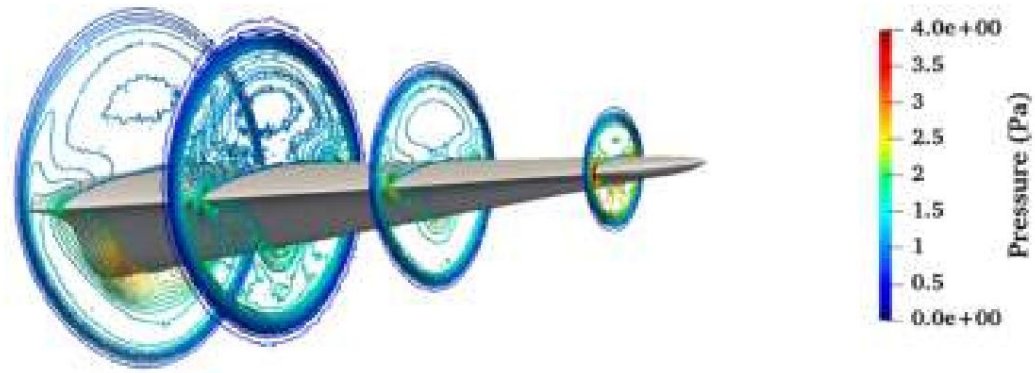


Figura 11. Continuación.

Machine Translated by Google

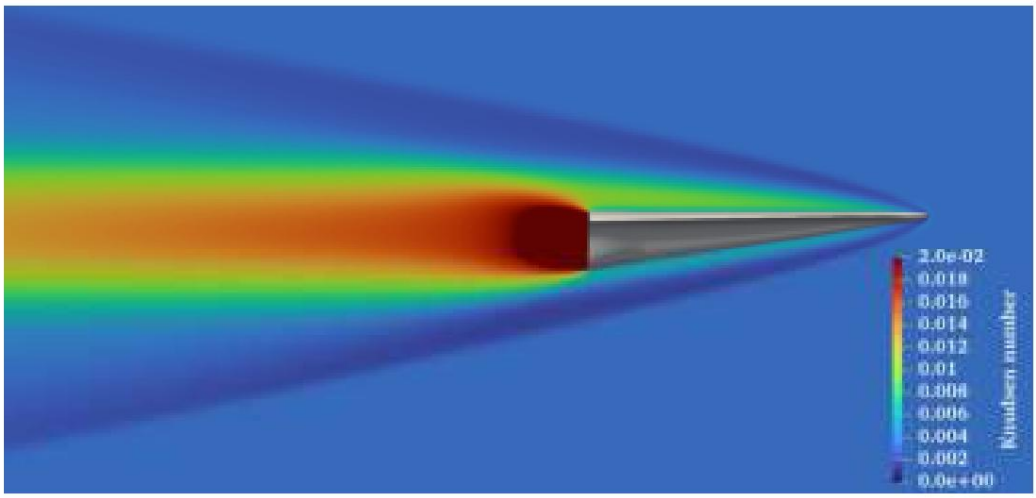


Figura 11. Contornos de presión alrededor del vehículo (arriba), número de Knudsen del campo de flujo basado en la longitud del waverider (abajo).

5. Resultados de la simulación

Debido a las extensas demandas computacionales asociadas con la simulación de flujos hipersónicos, se implementan varias estrategias para optimizar el uso de los recursos computacionales. Una técnica eficaz es la simulación de sólo la mitad de la geometría del waverider, reflejando luego simétricamente el campo de flujo resultante en un plano predefinido. Este enfoque reduce significativamente la carga computacional sin sacrificar la precisión de los resultados. Un objetivo clave de estas simulaciones es confirmar el posicionamiento correcto de la onda de choque en relación con los bordes de ataque del vehículo. Esta verificación se lleva a cabo analizando los contornos de presión y los gráficos de criterio Q, que se muestran en la Figura 11 y la Figura 12, respectivamente.

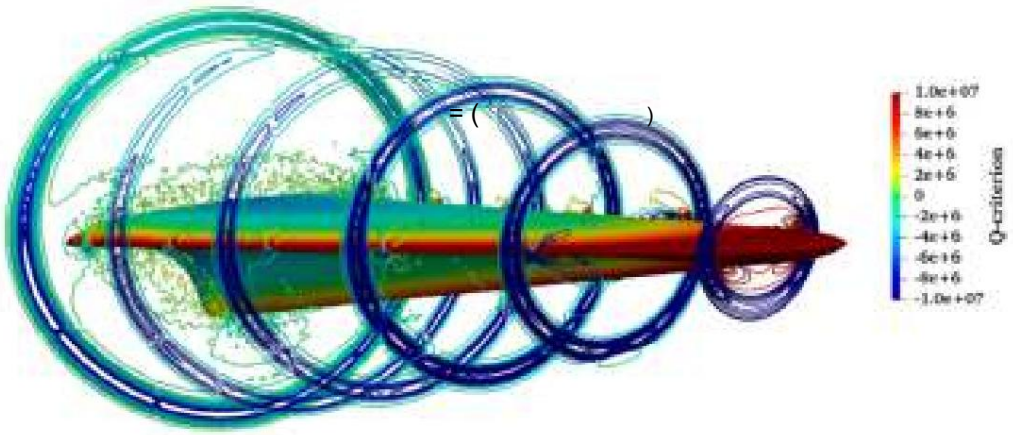


Figura 12. Contornos de criterio Q alrededor del vehículo.

El criterio Q, calculado utilizando la ecuación (2), involucra Ω el componente antisimétrico del gradiente de velocidad que representa la vorticidad, y S, el componente simétrico que representa la tasa de deformación.

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

Según los criterios establecidos, los valores positivos del criterio Q significan regiones dentro del campo de flujo donde predomina la vorticidad, lo que sugiere áreas de flujo rotacional. Por el contrario, los valores negativos indican el predominio de la tasa de deformación o las tensiones viscosas [42,43]. Este criterio es una herramienta de diagnóstico crítica para analizar las características del flujo alrededor

Machine Translated by Google

el jinete de la ola. Por ejemplo, en la Figura 13, los valores negativos del criterio Q observados debajo del borde de ataque señalan la presencia de un shock en esa área. Los gráficos de contorno de presión asociados, ilustrados en la Figura 11, revelan una clara acumulación de presión alrededor de los bordes de ataque del waverider, lo que confirma la unión efectiva de la onda de choque a la geometría del vehículo.

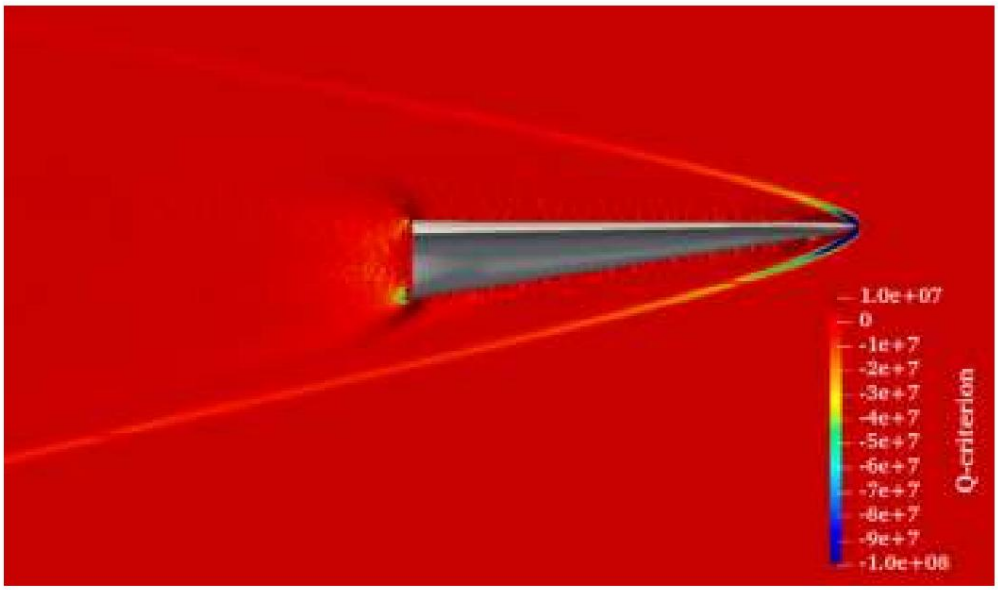


Figura 13. Contornos de criterio Q en el plano de simetría.

Además, la Figura 11 representa gráficamente la distribución de presión en la superficie del waverider. Como se anticipó, el aumento de los niveles de presión es prominente alrededor de los bordes de ataque y la sección de la nariz, lo que valida la presencia de una onda de choque adjunta. Esta integración de varios diagnósticos computacionales, desde la optimización de la malla hasta análisis detallados de presión y criterios Q, ofrece una evaluación exhaustiva del rendimiento aerodinámico del waverider . Estos resultados subrayan el rigor computacional y la validez física del diseño del waverider, particularmente en lo que respecta a la unión de ondas de choque a los bordes de ataque. La Figura 13 muestra los contornos del criterio Q en el plano de simetría, mientras que la Figura 14 muestra los contornos correspondientes en un plano vertical en la parte trasera del vehículo, donde las regiones azules concentradas en las puntas de las alas y debajo del fuselaje indican amortiguadores adjuntos, además demostrando la eficacia aerodinámica del diseño.

Las Figuras 15 y 16 presentan los contornos de velocidad en el sentido de la corriente y el campo de temperatura alrededor del vehículo. Estas cifras son cruciales para comprender cómo interactúa el vehículo con el flujo a altas velocidades. En particular, las simulaciones revelan importantes características de dinámica térmica y flujo de fluidos. Para las condiciones de flujo específicas aplicadas en este estudio, el campo de temperatura alrededor del vehículo muestra variaciones térm Se observa una temperatura máxima de 1400 Kelvin justo delante de la sección de morro del waverider, lo que indica áreas donde el calentamiento aerodinámico es más intenso debido a la rápida desaceleración del flujo. Esta información es vital para evaluar la resistencia térmica y la integridad estructural del waverider en condiciones operativas.

Machine Translated by Google

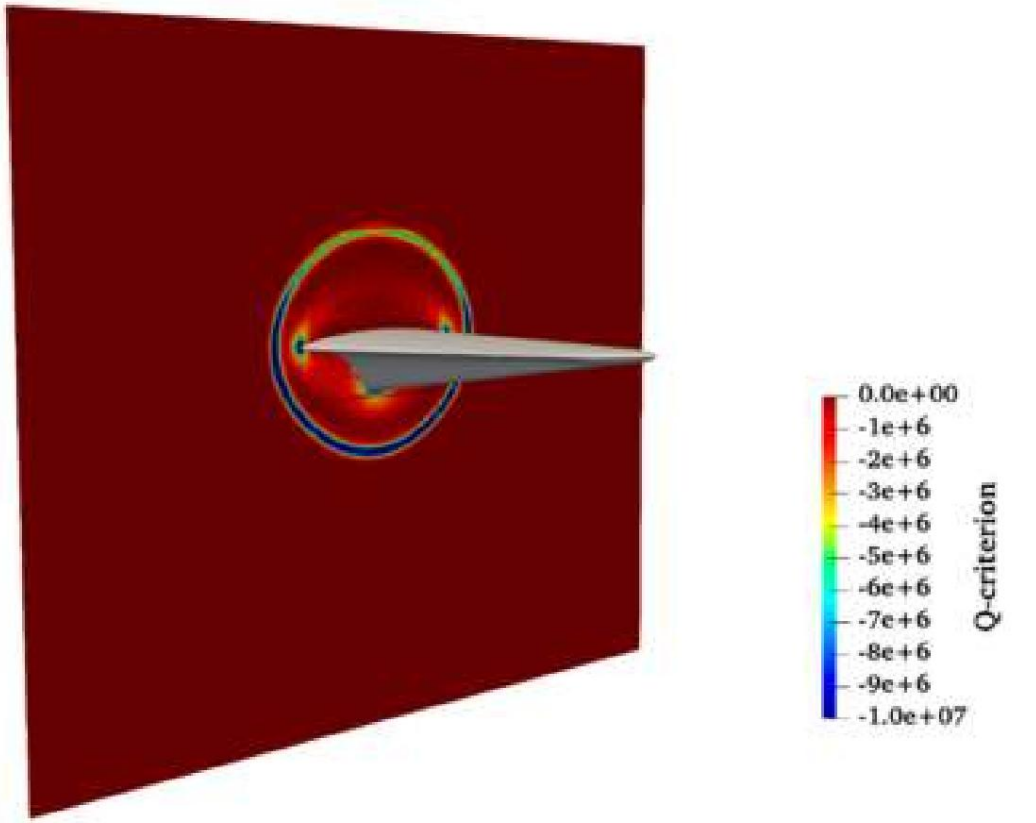


Figura 14. Contornos de criterio Q en un plano vertical.

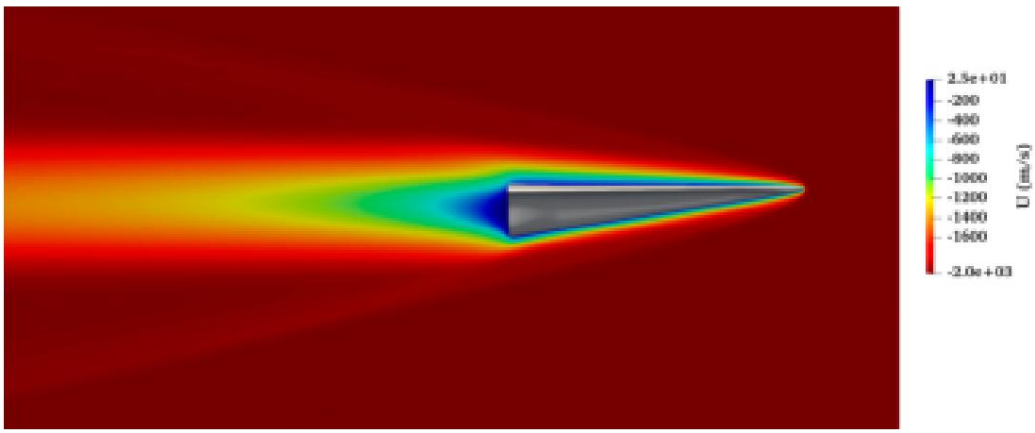


Figura 15. Contornos de velocidad en el sentido de la corriente en el plano de simetría del waverider.

En las Figuras 17 a 20, se ilustran varias propiedades del flujo en un plano paralelo al waverider , con la superficie del vehículo claramente resaltada por las variaciones en la presión superficial. Específicamente, la Figura 17 muestra los contornos de presión en este plano, proporcionando una visualización clara de cómo varía la presión en respuesta a la forma y la aerodinámica del vehículo. En particular, considerando que la presión de corriente libre se establece en 0,55 Pa, se observa un aumento de presión significativo alrededor de la punta del waverider, elevándose a un orden de magnitud superior a las condiciones ambientales. Además, la presión alrededor de los bordes de ataque del waverider es aproximadamente cuatro veces mayor que la presión de corriente libre. Este mapeo detallado de la distribución de presión es fundamental para evaluar el rendimiento aerodinámico y las tensiones estructurales experimentadas por el waverider durante la operación.

Machine Translated by Google

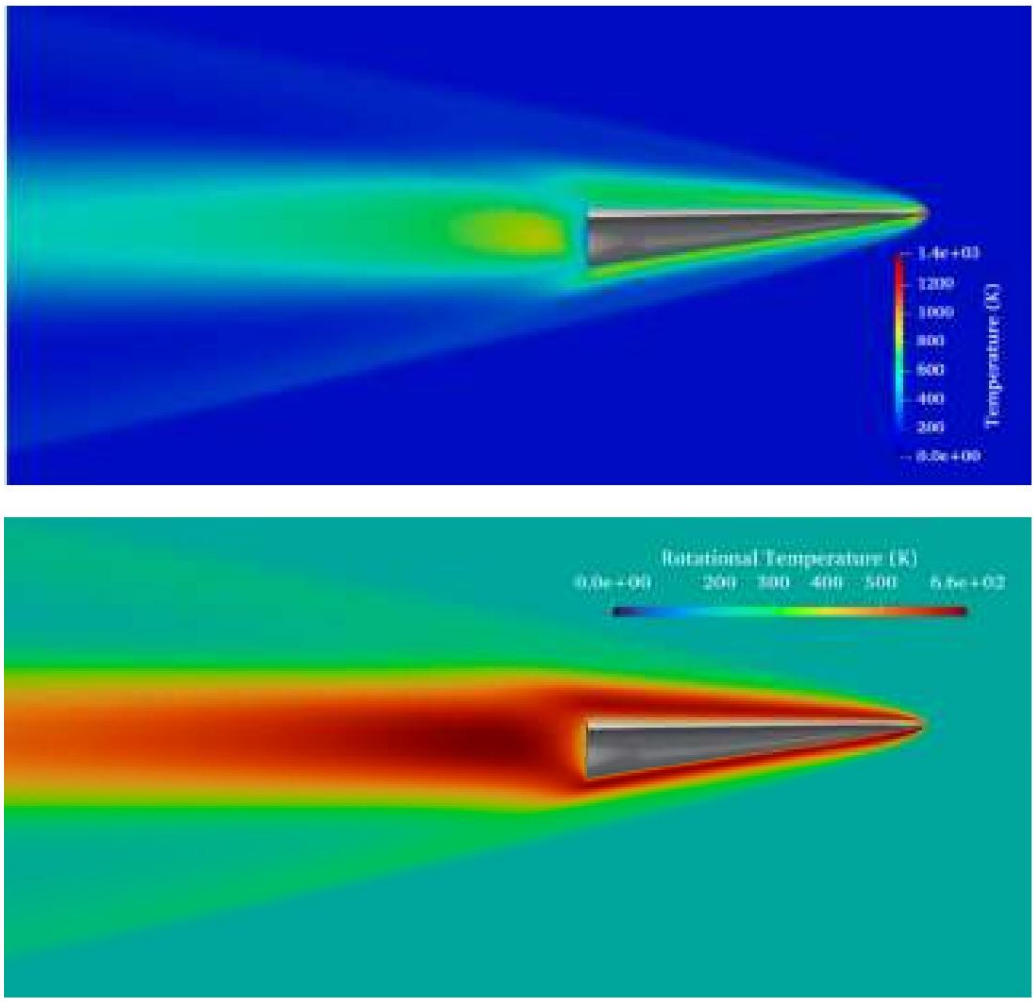


Figura 16. (Arriba): campo de temperatura total alrededor del vehículo. (Abajo): campo de temperatura rotacional (en el plano de simetría del waverider).

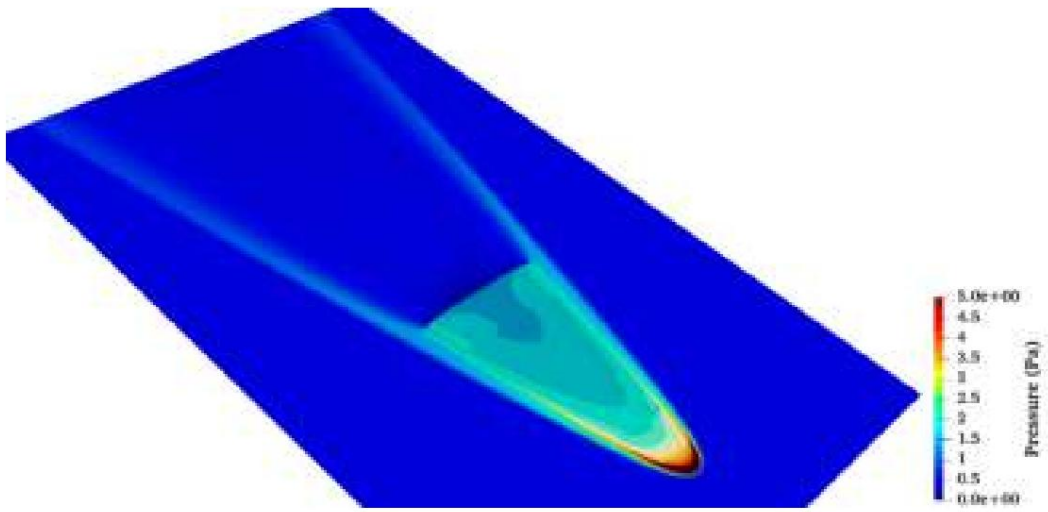


Figura 17. Contornos de presión en un plano horizontal paralelo al vehículo.

Machine Translated by Google

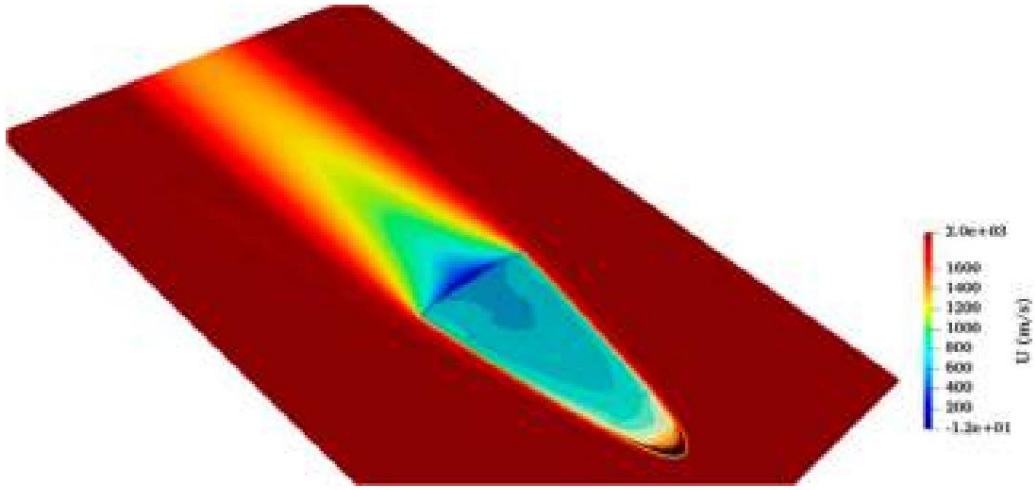


Figura 18. Curvas de velocidad en el sentido de la corriente en un plano horizontal paralelo al vehículo.

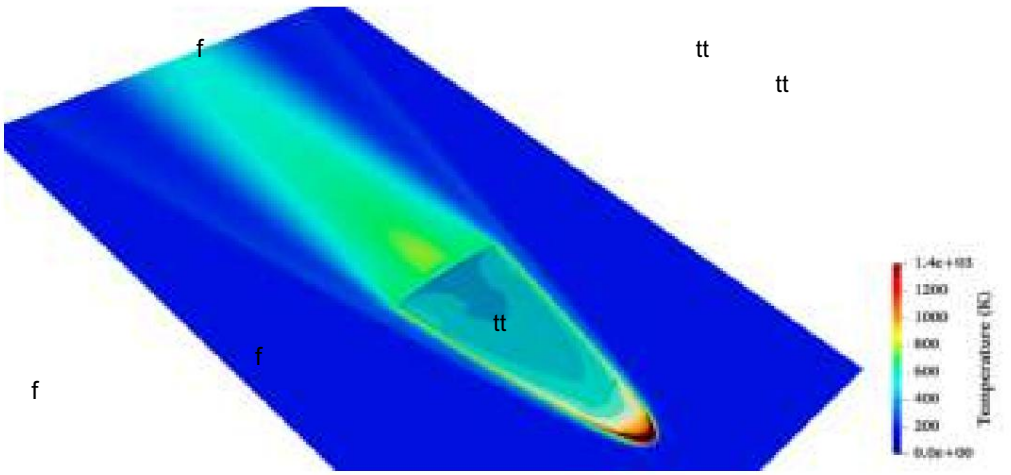


Figura 19. Contornos de temperatura en un plano horizontal paralelo al vehículo.

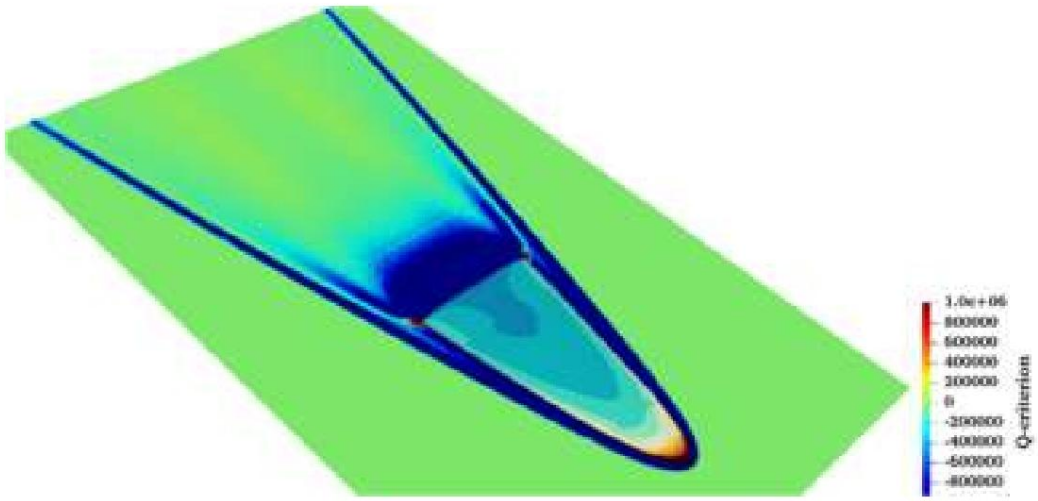


Figura 20. Contornos de criterio Q en un plano horizontal paralelo al vehículo.

Machine Translated by Google

f

ff

La Figura 18 contiene los contornos de velocidad en el mismo plano. En esta figura se puede observar claramente la fijación del amortiguador al borde de ataque y al morro del vehículo.
Como se puede observar en la Figura 19, la temperatura alrededor de los bordes de ataque es de 800 K, que es aproximadamente cuatro veces mayor que la temperatura de flujo libre de 196 K (con un pico de alrededor de 1400 K en la parte delantera del vehículo).

En la Figura 20, el criterio Q se ilustra meticulosamente en el mismo plano paralelo al waverider, capturando efectivamente todo el campo de la onda de choque adjunta. Esta visualización subraya las áreas precisas donde el amortiguador permanece adherido a la superficie del waverider, un aspecto crítico de su diseño aerodinámico. Además, los valores positivos del criterio Q en esta figura indican la formación de dos vórtices distintos, situados simétricamente, uno a cada lado, en la punta de la sección trasera del vehículo. Estos vórtices son fundamentales para comprender la dinámica del flujo en la parte trasera del waverider, particularmente cómo influyen en la estabilidad general y el control del vehículo a altas velocidades. Para una observación más detallada de estos vórtices, la Figura 21 proporciona una vista mejorada donde se traza la vorticidad en la parte trasera del waverider. En esta figura, los dos vórtices están claramente resaltados en rojo, ofreciendo un marcado contraste con el resto del campo de flujo.
Esta diferenciación de color no sólo enfatiza la ubicación y la intensidad de los vórtices sino que también ayuda a analizar su estructura e interacción con el flujo circundante. La representación de estos vórtices con un detalle tan vívido es crucial para que los ingenieros y diseñadores evalúen las interacciones aerodinámicas en juego y perfeccionen el diseño del waverider para un rendimiento optimizado.

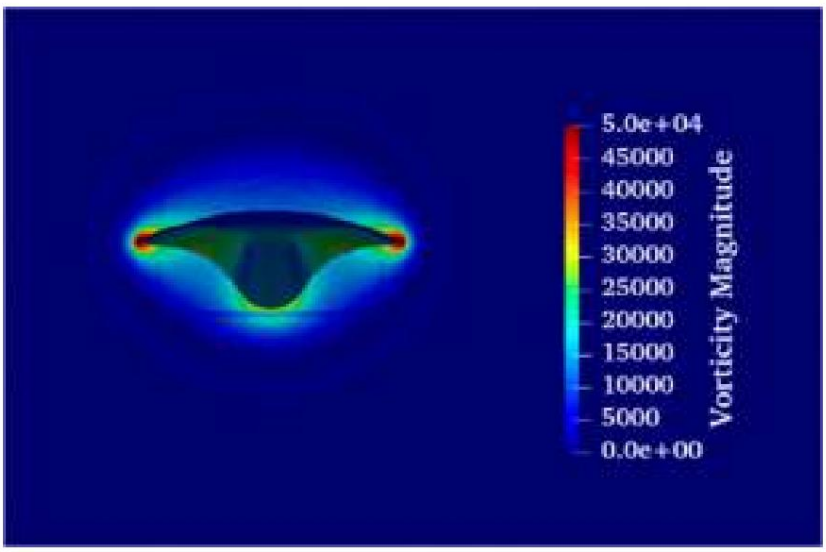


Figura 21. Magnitud de vorticidad en la parte trasera del vehículo.

Dado el intrincado diseño del waverider, se consideró necesario emplear las isosuperficies tridimensionales del criterio Q para capturar completamente las complejas características espaciales de los choques y los vórtices estructurados que rodean el vehículo. La Figura 22 ilustra estos contornos tridimensionales de criterio Q que envuelven el vehículo, con los contornos coloreados según la magnitud de la vorticidad para enfatizar las variaciones en el comportamiento del flujo rotacional. Las isosuperficies grises transparentes delinean claramente la forma externa de las ondas de choque, proporcionando una visión completa de su forma tridimensional. En particular, las partes de la onda de choque cercanas a la superficie de compresión también son visibles en la misma figura, lo que ofrece una visión detallada de cómo el choque interactúa con la estructura del vehículo.

Machine Translated by Google

f

tt

f

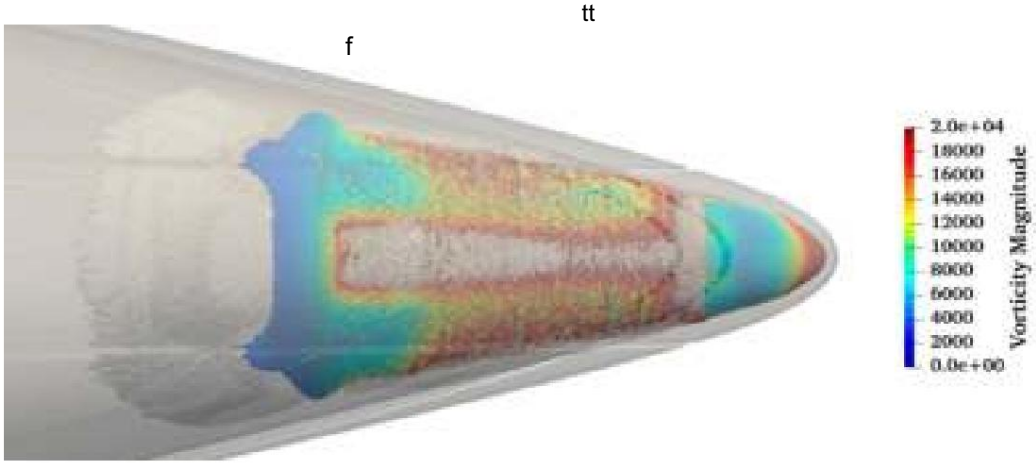


Figura 22. Contornos tridimensionales del criterio Q, coloreados según la magnitud de la vorticidad.

En la Figura 23, estos contornos se trazan de manera similar, pero en cambio están coloreados según la magnitud de la velocidad para resaltar las diferencias en la velocidad del flujo. Como se muestra en esta figura, aproximadamente 30 cm aguas abajo de la nariz del vehículo, donde la superficie de compresión se vuelve más pronunciada, los vórtices se separan del flujo principal y continúan aguas abajo hacia las regiones de mayor presión en la parte trasera del vehículo. Esta separación es fundamental para comprender el comportamiento aerodinámico del waverider. Además, a medida que aumenta el ángulo de la superficie de compresión hacia la parte trasera del vehículo, se produce un aumento notable de presión y la velocidad del flujo se reduce significativamente, ralentizándose aproximadamente 1.000 m/s en tan sólo unos pocos centímetros. Estas visualizaciones y análisis detallados de la dinámica del flujo son esenciales para evaluar las implicaciones de rendimiento del diseño del vehículo en condiciones operativas.

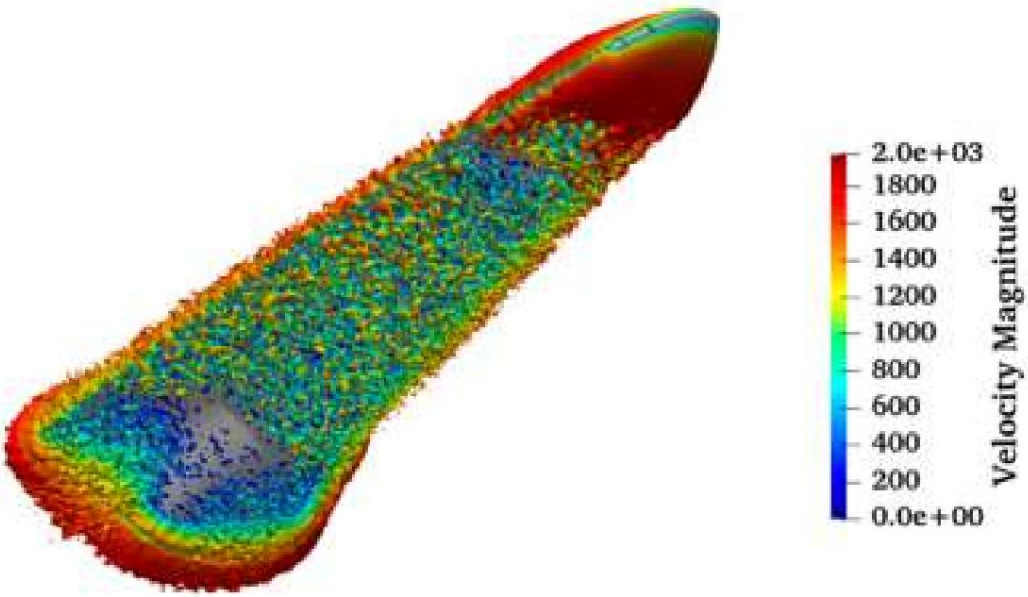


Figura 23. Descripción general de los contornos tridimensionales del criterio Q alrededor del vehículo, coloreados según la magnitud de la velocidad.

Para determinar las fuerzas aerodinámicas que actúan sobre el waverider, se calcularon meticulosamente las tensiones de corte y los componentes de presión a través de su superficie tridimensional.
Estos cálculos facilitan la medición precisa de las fuerzas de sustentación y arrastre por unidad de superficie, y los resultados se muestran en la Figura 24. El análisis de esta figura revela que la resistencia máxima se produce principalmente en la punta de la nariz, mientras que una cantidad significativa de sustentación se produce principalmente en la punta de la nariz. generado en el área justo debajo de la nariz. Al integrar las fuerzas medidas en todos l

Machine Translated by Google

En las celdas de la superficie, se calcularon la sustentación y la resistencia total del waverider, lo que arrojó una relación de sustentación-resistencia (L/D) de 2,18. Según los estudios existentes, esta relación L/D es típica de un waverider que opera en un ángulo de ataque de 0 grados [44], lo que indica que un valor superior a 2,0 es indicativo de un rendimiento aerodinámico efectivo en las condiciones de diseño elegidas.

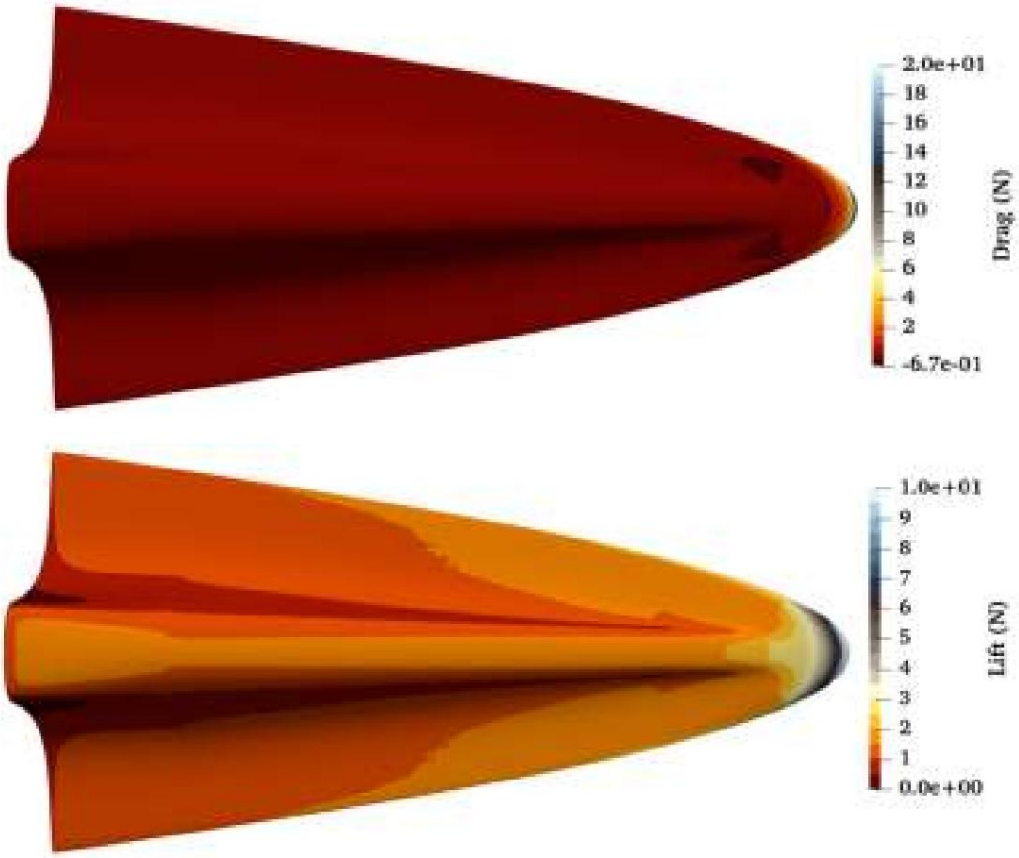


Figura 24. Descripción general de la sustentación (abajo) y el arrastre (arriba) por unidad de superficie, ejercidos sobre la superficie inferior del waverider .

Los contornos del número de Knudsen, basados en la longitud del waverider, se representan en la Figura 11 (abajo), mientras que los contornos del número de Mach en el plano de simetría se muestran en la Figura 25. Como se demostró, el número de Knudsen alrededor del vehículo está dentro del rango de transición. régimen, lo que justifica el uso del método DSMC.

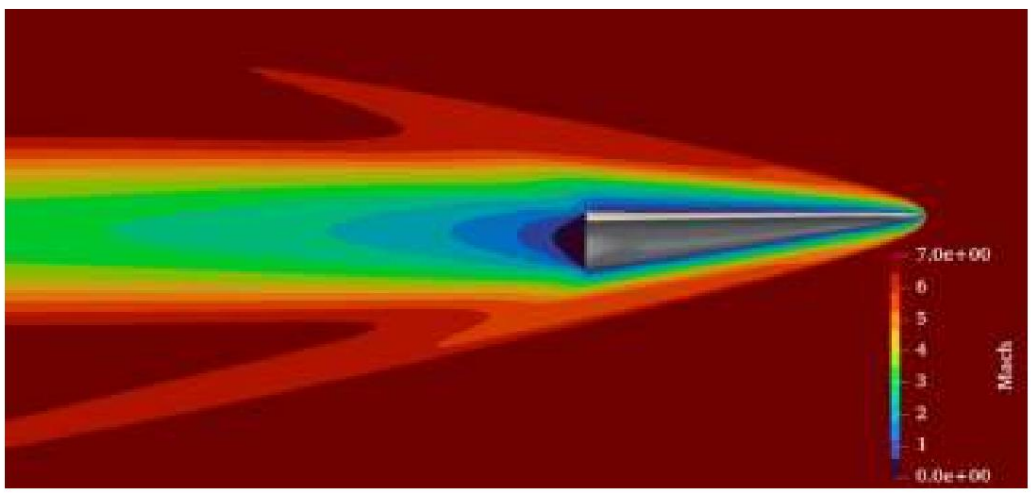


Figura 25. Contornos del número de Mach alrededor del vehículo en el plano de simetría.

Machine Translated by Google

Para este estudio, solo se investigó un ángulo de ataque; sin embargo, los autores en [44] sugieren que un ligero aumento en el ángulo de ataque podría potencialmente mejorar la relación L/D de dos a tres veces, mejorando así significativamente el rendimiento. También es digno de mención que los waveriders se analizan comúnmente en altitudes entre 25 km y 40 km en la literatura abierta, a diferencia de los 90 km de altitud considerados en este estudio. La altitud elevada afecta la generación de sustentación debido a la diferente dinámica de fluidos, lo que requiere una superficie de compresión más grande que la que normalmente se ve en los waveriders que operan a altitudes más bajas. Esta adaptación es una modificación de diseño crítica que mejora el rendimiento del vehículo en las condiciones atmosféricas raras que se encuentran en altitudes elevadas.

6. Conclusiones

En el diseño y análisis integral de un waverider Mach 7, se emplearon complejas metodologías computacionales para simular con precisión las propiedades aerodinámicas del vehículo . Después de aplicar la metodología del cono osculador, para la definición de la geometría del waverider, se construyó una malla computacional precisa para capturar la compleja geometría de la superficie, particularmente alrededor de los bordes críticos del waverider. Se utilizó una técnica de simulación avanzada , el método de simulación directa Monte Carlo (DSMC), para resolver el campo de flujo tridimensional alrededor del vehículo. Esta simulación no solo detalló las condiciones térmicas y de presión que rodean al waverider, sino que también destacó las interacciones estructurales de las ondas de choque, validadas a través de visualizaciones de campos de velocidad y temperatura en el sentido de la corriente.

Un mayor refinamiento del modelo de simulación implicó la creación de isosuperficies tridimensionales del criterio Q para mapear de manera intrincada las estructuras de choque y vórtice alrededor del waverider. Esto permitió un examen en profundidad de la dinámica del flujo, en particular la unión de ondas de choque y la formación de vórtices en las secciones críticas del vehículo. Estos análisis detallados fueron esenciales para confirmar la eficiencia aerodinámica del diseño. Además, el uso de técnicas de mallado en capas facilitó la captura precisa de los fenómenos de la capa límite, crucial para evaluar el rendimiento del vehículo en las condiciones extremas del vuelo hipersónico.

La culminación de estas extensas simulaciones fue el cálculo de las fuerzas de sustentación y resistencia, donde se determinó que la relación sustentación-resistencia era 2,18, indicativa de un rendimiento aerodinámico eficiente para una waverider en un ángulo de ataque de cero grados. Estos hallazgos son significativos, ya que no sólo demuestran la capacidad del waverider bajo las condiciones de diseño estipuladas, sino que también sugieren posibles mejoras para diseños futuros. Por ejemplo, los ajustes en el ángulo de ataque podrían optimizar aún más el rendimiento del vehículo. Los conocimientos de este estudio sobre la aerodinámica a gran altitud, donde diferentes dinámicas de fluidos requieren modificaciones, como superficies de compresión más grandes, allanan el camino para diseños mejorados de futuros vehículos hipersónicos que operan en entornos espaciales cercanos.

Contribuciones de los autores: Conceptualización, AK e IKN; metodología, AK e IKN; software, Alaska; validación, AK e IKN; recursos, Alaska; redacción: preparación del borrador original, AK; redacción: revisión y edición, IKN; visualización, AK; supervisión, IKN; administración de proyectos, IKN; adquisición de financiación, IKN Todos los autores han leído y aceptado la versión publicada del manuscrito.

Financiamiento: Este estudio fue financiado por el Centro de Excelencia Integrado de Defensa Aérea y de Misiles (IAMD COE) y cualquier propiedad intelectual resultante del trabajo cubierto por este será propiedad del IAMD COE. Este documento refleja únicamente las políticas del IAMD COE y las posiciones de sus autores y no pretende crear ninguna obligación legal ni refleja las políticas o posiciones de la OTAN, ni involucra a la OTAN de ninguna manera.

Declaración de disponibilidad de datos: Los datos presentados en este estudio están disponibles previa solicitud del autor correspondiente debido a que este proyecto fue financiado por NATO IAMD-COE, y compartir los datos requiere su permiso explícito.

Agradecimientos: Los autores desean agradecer al UKTC y al EPSRC por el tiempo computacional en la instalación de supercomputación ARCHER2 del Reino Unido a través de los proyectos EP/R029326/1 y EP/X035484/1.

Machine Translated by Google

Conflictos de intereses: Los autores declaran no tener conflictos de intereses.

Referencias

1. Sandlin, DR; Pessin, DN Análisis aerodinámico de aviones hipersónicos Waverider; NASA-CR-192981; NASA: Washington, DC, Estados Unidos, 1993.
2. Nonweiler, TRF Alas delta con forma que se adapta a la teoría exacta de las ondas de choque. J.R. Aerosp. Soc. 1963, 67, 39. [Referencia cruzada] 3. Sziroczak, D.; Smith, H. Una revisión de cuestiones de diseño específicas de los vehículos de vuelo hipersónicos. Prog. Aerosp. Ciencia. 2016, 84, 1–28. [Referencia cruzada]
4. Zhang, TT; Wang, ZG; Huang, W.; Yan, L. Parametrización y optimización de configuraciones de vehículos de planeo hipersónico. durante el diseño conceptual. Aerosp. Ciencia. Tecnología. 2016, 58, 225–234. [Referencia cruzada]
5. Kontogiannis, K. Sobre el desarrollo de modelos de geometría paramétrica eficientes para aviones hipersónicos basados en Waverider. Doctor en Filosofía. Tesis, Universidad de Southampton, Southampton, Reino Unido, 2017.
6. Hijo, J.; Hijo, C.; Yee, K. Un nuevo marco de optimización directa para métodos de diseño inverso de Hypersonic Waverider. Aeroespacial 2022, 9, 348. [Referencia cruzada]
7. Flower, JW Configuraciones para altas velocidades supersónicas derivadas de ondas de choque y expansiones simples. R. Aeronauta. Soc. J. 1963, 67, 287–290. [Referencia cruzada]
8. Kuchemann, D. El diseño aerodinámico de aeronaves: una introducción detallada al conocimiento aerodinámico actual y una guía práctica a la Solución de Problemas de Diseño de Aeronaves; Pergamon Press: Oxford, Reino Unido, 1978.
9. Bowcutt, KG Optimización multidisciplinaria de vehículos hipersónicos que respiran aire. J. Propuls. Poder 2001, 17, 1184-1190. [Referencia cruzada]
10. Cockrell, CE, Jr. Interpretación de los datos de rendimiento de Waverider utilizando dinámica de fluidos computacional. J. Aircr. 1994, 31, 1095–1100. [Referencia cruzada]
11. Corda, S.; Anderson, J., Jr. Waveriders hipersónicos optimizados viscosos diseñados a partir de campos de flujo simétricos. En procedimientos de la 26ª Reunión de Ciencias Aeroespaciales, Reno, NV, EE.UU., 14 de enero de 1988.
12. Nonweiler, TRF Problemas aerodinámicos de los vehículos espaciales tripulados. R. Aeronauta. Soc. J. 1959, 63, 521–528. [Referencia cruzada]
13. Zubin, MA; Ostapenko, NA Investigación experimental de algunas singularidades del flujo supersónico alrededor de alas en forma de V. Dinámico fluido. 1975, 10, 647–652. [Referencia cruzada]
14. Ostapenko, NA Características aerodinámicas de alas en forma de V con ondas de choque desprendidas de los bordes de ataque en condiciones hipersónicas. velocidades. Dinámico fluido. 1993, 28, 545–552. [Referencia cruzada]
15. Maksimov, FA; Ostapenko, NA Alas en forma de V con un ángulo de apertura superior a π a velocidades de flujo supersónicas e hipersónicas. Dokl. Física. 2016, 61, 412–417. [Referencia cruzada]
16. Mazhul, II; Rakhimov, RD Investigación numérica de regímenes de flujo fuera de diseño que pasan por ondulaciones de la ley de potencia basada en el fluye detrás de los choques de aviones. Dinámico fluido. 2003, 38, 806–814. [Referencia cruzada]
17. Mazhul, II; Rakhimov, RD Waveriders hipersónicos con forma de ley de potencia. J. Aircr. 2004, 41, 839–845. [Referencia cruzada]
18. Mazhul, II Regímenes de flujo fuera de diseño que pasan por olas basadas en flujos de compresión isentrópica. Dinámico fluido. 2003, 45, 271–280. [Referencia cruzada]
19. Jones, JG; Moore, Kansas; Pike, J.; Roe, PL Un método para diseñar configuraciones de elevación para altas velocidades supersónicas, utilizando Campos de flujo simétricos. Ing.-Arch. 1968, 37, 56–72. [Referencia cruzada]
20. Mangin, B.; Benay, R.; Chanetz, B.; Chpoun, A. Optimización de waveriders viscosos derivados de flujos corporales contundentes de ley de potencia axisimétrica . J. Spacecr. Cohete. 2006, 43, 990–998. [Referencia cruzada]
21. Corda, S. Waveriders hipersónicos optimizados viscosos diseñados a partir de flujos sobre conos y cuerpos de arrastre mínimo. Doctor en Filosofía. Tesis, Universidad de Maryland, College Park, MD, EE. UU., 1988.
22. Ding, F.; Liu, J.; Shen, C.-B.; Huang, W. Enfoque novedoso para el diseño de un vehículo waverider generado a partir de supersónico simétrico fluye más allá de una ojiva puntiaguda de von Karman. Aerosp. Ciencia. Tecnología. 2015, 42, 297–308. [Referencia cruzada]
23. Rasmussen, ML Configuraciones del cuerpo de elevación derivadas de flujos supersónicos que pasan por conos elípticos y circulares inclinados. En Actas de la Quinta Conferencia sobre Mecánica de Vuelo Atmosférico para Sistemas Espaciales Futuros, AIAA Paper, Boulder, CO, EE.UU., 6 a 8 de agosto de 1979; pag. 1665.
24. Rasmussen, ML Configuraciones Waverider derivadas de conos elípticos y circulares inclinados. J. Spacecr. Cohete. 1980, 17, 537–545. [Referencia cruzada]
25. Rasmussen, ML; Jischke, MC; Daniel, DC Fuerzas y momentos experimentales en ondas derivadas de conos para m = 3 a 5. J. Espaciocr. Cohete. 1982, 19, 592–598. [Referencia cruzada]
26. Rasmussen, ML; Jischke, MC; Daniel, DC Presiones superficiales experimentales en waveriders derivados de conos para M = 3–5. J. Spacecr. Cohete. 1983, 20, 539–545.
27. Lin, Carolina del Sur; Rasmussen, ML Waveriders derivados de conos con curvatura transversal y longitudinal combinada. En procedimientos de la 26ª Reunión de Ciencias Aeroespaciales, AIAA Paper 88–03714, Reno, NV, EE. UU., 11 a 14 de enero de 1988.
28. Liu, CZ; Bai, P.; Chen, POR; Ji, CQ Diseño rápido y optimización de Waverider desde 3D Flow. En Actas de la 16.ª Conferencia de Operaciones, Integración y Tecnología de Aviación de la AIAA, Documento AIAA 2016–3288, Washington, DC, EE. UU., 13–17 de junio de 2016.
29. Mclaughlin, TA Waveriders hipersónicos optimizados viscosos para el flujo de equilibrio químico. Tesis de Maestría, Universidad de Maryland, College Park, MD, EE. UU., 1990.

Machine Translated by Google

30. Anderson, JD; Chang, J.; Mclaughlin, TA Hypersonic Waveriders: efectos del flujo que reacciona químicamente y la interacción viscosa.
En Actas de la 30ª reunión y exposición de ciencias aeroespaciales, documento AIAA 92–0302, Reno, NV, EE. UU., 6 al 9 de enero de 1992.
31. Li, MI; Zhou, H. Investigación sobre el método de diseño de la configuración aerodinámica de Waverider basado en software CFD comercial.
Mentón. P. Mec. 2014, 35, 293–299.
32. Taylor, soldado americano; Macoll, JW La presión del aire sobre un cono que se mueve a altas velocidades I. Proc. R. Soc. A 1933, 139, 278–297.
33. Santos, WF Impacto de la brusquedad en la relación elevación-arrastre del flujo de cuña hipersónica. J. Spacecr. Cohete. 2009, 46, 329–339. [Referencia cruzada]
34. Chen, XQ; Hou, ZX; Liu, JX; Gao, XZ Impacto de la franqueza en el rendimiento de waverider. Computadora. Fluidos 2011, 48, 30–43.
[Referencia cruzada]
35. Tincher, DJ; Burnett, DW Vehículo de prueba Hypersonic Waverider: el siguiente paso lógico. J. Spacecr. Cohete. 1994, 31, 392–399. [Referencia cruzada]
36. Bird, GA Dinámica de gases moleculares y simulación directa de flujos de gases; Clarendon Press: Oxford, Reino Unido, 1994.
37. Wagner, W. Una prueba de convergencia para el método de Monte Carlo de simulación directa de Bird para la ecuación de Boltzmann. J. estadística. Física. 1992,
66, 1011-1044. [Referencia cruzada]
38. Gallis, MA; Torczynski, JR; Plimpton, SJ; Rader, DJ; Koehler, T. Simulación directa Monte Carlo: La búsqueda de la velocidad. En
Actas del 29º Simposio sobre dinámica de gases enrarecidos (RGD), Xi'an, China, 13 a 18 de julio de 2014.
39. Koura, K.; Matsumoto, H. Modelo molecular de esfera blanda variable para especies de aire. Física. Fluidos Un fluido. Din. 1992, 4, 1083–1085.
[Referencia cruzada]
40. Borgnakke, C.; Larsen, PS Modelo estadístico de colisión para la simulación MonteCarlo de una mezcla de gases poliatómicos. J. Computación. Física.
1975, 18, 405–420. [Referencia cruzada]
41. Gallis, MA; Torczynski, JR Efecto de los esquemas de selección de socios de colisión sobre la precisión y eficiencia del método Monte Carlo de simulación directa. Int. J. Número. Métodos
Fluidos 2011, 67, 1057–1072. [Referencia cruzada]
42. Zhan, JM; Li, YT; Wai, QUIÉN; Hu, WQ Comparación entre el criterio Q y Rortex en la aplicación de un in-stream
estructura. Física. Fluidos 2019, 31, 121701. [CrossRef]
43. Jeong, J.; Hussain, F. Sobre la identificación de un vórtice. J. Mec. de fluidos. 1995, 285, 69–94. [Referencia cruzada]
44. Huang, W.; Mamá, yo; Wang, Z.; Pourkashanian, DB; Luo, S.; Lei, estudio paramétrico de JA sobre las características aerodinámicas de un
Vehículo Waverider hipersónico. Acta Aeronauta. 2011, 69, 135-140. [Referencia cruzada]

Descargo de responsabilidad/Nota del editor: Las declaraciones, opiniones y datos contenidos en todas las publicaciones son únicamente de los autores y contribuyentes individuales y no de MDPI ni de los editores. MDPI y/o los editores renuncian a toda responsabilidad por cualquier daño a personas o propiedad que resulte de cualquier idea, método, instrucción o producto mencionado en el contenido.

Machine Translated by Google

cálculo

MDPI

Artículo

Flujo de nanofluido híbrido sobre un disco giratorio que se contrae: Metodología de superficie de respuesta

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

[1] Instituto de Investigación Matemática, Universiti Putra Malaysia, Serdang 43400, Malasia; rusyairyanti@gmail.com (RIY); fadzilahma@upm.edu.my (FMA); ctsuzilliana@upm.edu.my (SSPMI)
[2] Departamento de Matemáticas y Estadística, Universiti Putra Malaysia, Serdang 43400, Malasia
[3] Departamento de Matemáticas, Universidad Babe¸ s-Bolyai, 400084 Cluj-Napoca, Rumania; popm.ioan@yahoo.co.uk
[4] Centro de Estudios Fundamentales para las Ciencias Agrícolas, Universiti Putra Malaysia, Serdang 43400, Malasia
* Correspondencia: norihana@upm.edu.my

Resumen: Para aplicaciones eficientes de calefacción y refrigeración, se desea un esfuerzo cortante de pared mínimo y una tasa máxima de transferencia de calor. El estudio actual optimizó el coeficiente de fricción local de la piel y el número de Nusselt en el flujo de nanofluidos híbridos Al2O3 -Cu/agua sobre un disco giratorio permeable y retráctil. Primero, las ecuaciones rectoras y las condiciones de contorno se resuelven numéricamente utilizando el solucionador bvp4c en MATLAB. Las transformaciones de Von Kármán se utilizan para reducir las ecuaciones diferenciales parciales a ecuaciones diferenciales ordinarias no lineales solubles. Se encuentra que el aumento del parámetro de transferencia de masa reduce el coeficiente de fricción superficial local y el número de Nusselt. Se observan valores más altos de estas cantidades físicas de interés en el caso de inyección que en el caso de s Mientras tanto, el aumento en la magnitud del parámetro de contracción mejoró y redujo el coeficiente de fricción superficial local y el número de Nusselt, respectivamente. Luego, se lleva a cabo la metodología de superficie de respuesta (RSM) para comprender los impactos interactivos de los parámetros de control en la optimización de las cantidades físicas de interés. Con una deseabilidad del 66%, el coeficiente de fricción superficial local y el número de Nusselt se optimizan en 1,528780016 y 0,888353037 cuando el parámetro de contracción (λ) y el parámetro de transferencia de masa (S) son −0,8 y −0,6, respectivamente.

Palabras clave: disco; nanofluido híbrido; RSM; contracción; succión/inyección

check for updates

Cita: Yahaya, RI; Arifin, Nuevo México; Papá, yo; Ali, FM; Isa, Flujo de nanofluidos híbridos SSPM sobre un disco giratorio que se contrae: Metodología de superficie de respuesta. Computación 2024, 12, 141. https://doi.org/10.3390/ computation12070141

Editores académicos: Ali Cemal Benim, Abdulmajeed A. Mohamad, Sang-Ho Suh, Rachid Bennacer, Paweł Oclon y Jan Taler

Recibido: 28 de junio de 2024
Revisado: 6 de julio de 2024
Aceptado: 8 de julio de 2024
Publicado: 10 de julio de 2024

Copyright: © 2024 por los autores. Licenciatario MDPI, Basilea, Suiza.

Este artículo es un artículo de acceso abierto. distribuido bajo los términos y condiciones de los Creative Commons Licencia de atribución (CC BY) (https:// creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

1. Introducción

La maquinaria rotativa, los rotores de turbinas de gas y los sistemas de generación de energía térmica se encuentran entre las numerosas aplicaciones prácticas del flujo de disco giratorio clásico [1]. Las ecuaciones de Navier-Stokes para el flujo de disco giratorio fueron presentadas por primera vez por Von Kármán [2]. En este estudio, se introdujeron las transformaciones de Von Kármán para reducir las ecuaciones diferenciales parciales a un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias. Posteriormente, estas ecuaciones se emplearon en varios problemas de flujo de disco giratorio. Ayano et al. [3] hicieron un cálculo numérico sobre el flujo de nanofluidos magnetohidrodinámicos (MHD) sobre un disco giratorio que se estira con movimiento browniano, termoforesis y microorganismos girotácticos. En este estudio se emplearon las transformaciones de Von Kármán y se encontró que el aumento del parámetro de estiramiento reducía el perfil de temperatura. Mientras tanto, el aumento de la termoforesis y el movimiento browniano mejoró y redujo el perfil de concentración. Luego, Sharma et al. analizaron el flujo inestable de nanofluido sobre un disco giratorio que se estira con viscosidad variable, movimiento browniano y termoforesis. [4]. Se descubrió que el aumento de la tasa de estiramiento promovía el flujo de fluido en la dirección radial y mejora Puneeth y cols. [5] luego examinó el flujo inestable sobre un disco giratorio de estiramiento permeable. Se observó que una fracción de alto volumen de nanopartículas mejoraba y reducía los perfiles de temperatura y velocidad del nanofluido.

Machine Translated by Google

Los investigadores también han examinado el flujo de disco giratorio de nanofluidos híbridos que contienen la dispersión de dos nanopartículas diferentes. Rashid y cols. [6] analizaron el flujo de nanofluidos híbridos MHD sobre un disco giratorio con movimiento browniano y termoforesis. Se observó que el nanofluido híbrido poseía una mejor conductividad térmica que el nanoflui Además, el aumento del campo magnético redujo las velocidades axiales y tangenciales al tiempo que aumentó la resistencia superficial. Mientras tanto, la termoforesis y la fracción de volumen de nanopartículas mejoraron el rendimiento de la transferencia de calor. Alkuhayli [7] amplió este estudio con radiación térmica y fuente/sumidero de calor. Se descubrió que la mejora de los parámetros de radiación térmica y de conductividad térmica variable había aumentado el perfil de temperatura y el número de Nusselt local. Kumar et al. ampliaron aún más este estudio. [8], quienes consideraron el flujo electromagnetohidrodinámico sobre un disco giratorio que se estira con una fuente de calor irregular, energía de Arrhenius y radiación no lineal. Se observó que el incremento en el parámetro eléctrico reduce el coeficiente de fricción de la piel y mejora la tasa de transferencia de calor. Mientras tanto, Kulkarni [9] descubrió que la tasa de transferencia de calor aumentaba con la esfericidad de las nanopartículas en el flujo de nanofluidos híbridos sobre un disco giratorio permeable con convección mixta, campo magnético y deslizamiento. Solitario y col. [10] luego analizaron el flujo MHD de nanofluido híbrido Al2O3-Cu/agua sobre un disco giratorio con deslizamiento de velocidad, flujo de masa cero y condiciones de contorno convectivas. A continuación, Khashi'ie et al. [11] realizaron un análisis de estabilidad en múltiples soluciones obtenidas en un flujo de nanofluido híbrido MHD sobre un disco giratorio permeable de estiramiento/contracción con generación de calor. Los hallazgos revelaron que sólo la primera y la segunda solución eran estables y físicamente significativas, mientras que la tercera solución era inestable. Además, sólo el parámetro de succión mejoró el rendimiento de transferencia de calor del nanofluido híbrido. Vijay y Sharma [12] luego estudiaron los efectos de Soret y Dufour en el flujo de nanofluidos híbridos MHD sobre un disco giratorio permeable y desacelerador. Posteriormente, Abu Bakar et al. [13] analizaron el flujo inestable de nanofluido híbrido Al2O3-Cu/agua sobre un disco giratorio inclinado, que se contrae, con radiación térmica y deslizamiento de velocidad. De manera similar, sólo se encontró que la primera solución era estable, mientras que la segunda solución era inestable. La fracción de volumen de las nanopartículas, la radiación y los parámetros de contracción aumentaron la tasa de transferencia de calor. Recientemente, los investigadores también analizaron el flujo de disco giratorio de nanofluidos ternarios y tetrahíbridos , que consisten en tres y cuatro nanopartículas diferentes dispersadas en un fluido base (ver Ali et al. [14], Singh et al. [15]], y Patgiri y Paul [16]). Además , los investigadores también han incorporado enfoques de aprendizaje automático para estudiar el flujo de fluido sobre un disco giratorio (ver Ali et al. [17] y K

Además, los investigadores también han incluido análisis estadísticos para mejorar las investigaciones teóricas del flujo de fluido sobre un disco giratorio. Comúnmente se emplea una herramienta estadística sofisticada llamada metodología de superficie de respuesta (RSM) para analizar los efectos y la importancia de varios parámetros de control en respuestas específicas. Las condiciones óptimas para lograr la respuesta deseada también se pueden estimar utilizando el RSM. Mehmood et al. [19] utilizaron el RSM para optimizar los coeficientes de fricción local de la piel y el número de Nusselt en el flujo de nanofluidos MHD a través de un disco giratorio estirado con generación de entropía y reacción química autocatalítica. Se encontró que ambas cantidades físicas de interés estaban optimizadas por el valor más alto del parámetro magnético. Entonces, Shafiq et al. [20] consideraron el flujo de nanofluido de Darcy-Forchheimer a través de un disco giratorio estirado con radiación térmica. Según el RSM y el análisis de sensibilidad, el número de Nusselt local fue el más sensible hacia la fracción de volumen sólido, seguido por el parámetro de radiación y el número de Biot. Posteriormente, Mathew et al. [21] examinaron los efectos del campo magnético y la estratificación en el flujo de punto de estancamiento bioconvectivo sobre un disco giratorio estirado. Este estudio empleó el RSM para investigar la relación entre el campo magnético, la estratificación térmica, la fracción de volumen de nanopartículas de magnetita y el parámetro de relación de velocidad y la tasa de transferencia de calor. Se encontró que los parámetros de estratificación térmica y campo magnético tenían una correlación negativa con la tasa de transferencia de calor. Recientemente, el RSM fue utilizado por Hussain et al. [22] para optimizar el flujo de nanofluido MHD a través de un disco giratorio con radiación térmica y calentamiento Joule. Mientras tanto, Khashi'ie et al. [23] encontró a través del RSM que los parámetros magnéticos y de succión afectaron significativamente

Machine Translated by Google

Flujo inestable de nanofluido híbrido sobre un disco giratorio con generación de calor. Mientras tanto, la tasa de transferencia de calor se vio afectada por los parámetros magnéticos, de succión y de generación de calor.

Debido a la escasez de estudios de flujo de disco giratorio que combinen investigaciones numéricas y estadísticas, la investigación actual se centrará en estos enfoques para analizar el flujo y el rendimiento de la transferencia de calor en el flujo de nanofluidos híbridos de Al2O3-Cu/agua a través de un disco giratorio que se contrae. Se supone que la superficie es permeable para permitir la succión/inyección. Las ecuaciones diferenciales parciales y las condiciones de contorno que rigen este problema de flujo se resolverán numéricamente utilizando el solucionador bvp4c en MATLAB. Luego, se ejecutará RSM para analizar la interacción de la transferencia de masa con los parámetros de contracción y su importancia en la optimización de las cantidades físicas de interés. El estudio actual tiene como objetivo llenar el vacío de literatura existente y ofrecer una mejor comprensión de los impactos de la transferencia de masa y los parámetros de contracción en el problema de flujo considerado.

2. Formulación Matemática

El fluido de trabajo contiene nanopartículas de alúmina (Al2O3) y cobre (Cu) dispersas en agua. Se elige esta combinación porque las nanopartículas de Cu ofrecen una alta conductividad térmica , las nanopartículas de Al2O3 exhiben una buena inercia y el agua está ampliamente disponible. Además, un estudio experimental de Siddiqui et al. [24] demostraron que un nanofluido híbrido Al2O3-Cu/agua con una proporción de mezcla de 50:50 dio como resultado una propiedad hidrotermal mejorada en general con una conductividad térmica mejorada y una mejor estabilidad. Mientras tanto, las correlaciones y valores de las propiedades termofísicas del nanofluido híbrido Al2O3-Cu/agua se basan en Takabi et al. [25] y Oztop y Abu-Nada [26]. A una concentración de bajo volumen de este nanofluido híbrido, las correlaciones propuestas por Takabi et al. [25] estuvieron en buen acuerdo con los resultados del experimento presentados por Suresh et al. [27]. Después de esto, en el estudio actual se utiliza una concentración de bajo volumen de nanopartículas de Cu y Al2O3 (es decir, φAl2O3 = φCu = 0,02). = = 0,02

Mientras tanto, la configuración del flujo se describe utilizando coordenadas cilíndricas (r, , , z) y componentes de velocidad (u, v, , w), respectivamente. La representación esquemática se muestra en la Figura 1.

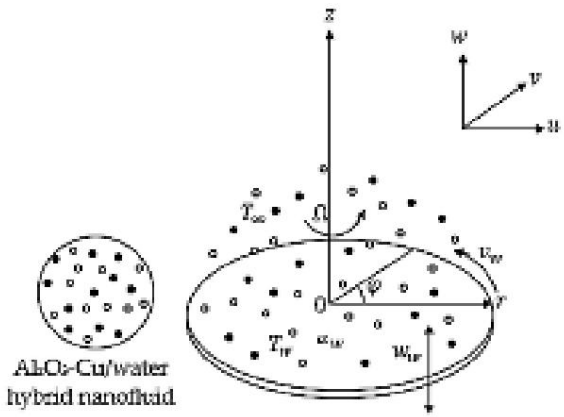


Figura 1. Diagrama esquemático del problema de flujo.

Se supone que el fluido fluye en la región z ≥ 0 sobre un disco giratorio infinito con una tasa de contracción uniforme a en la dirección radial r; velocidad angular Ω; velocidad de flujo de masa Ω ww = Ωvb f S con parámetro de transferencia de masa S y viscosidad cinemática del fluido base vb f ; y temperatura constante Tw. Mientras tanto, se supone que el nanofluido híbrido circundante tiene una temperatura de T∞, con Tw > T∞ para un disco caliente. En el estudio actual, se considera que el flujo es estacionario y simétrico (es decir, ∂/∂ = 0 para todas las variables). / = 0

Machine Translated by Google

Siguiendo los supuestos establecidos, las ecuaciones rectoras y las condiciones de contorno para el flujo de nanofluido híbrido newtoniano laminar e incompresible son las siguientes [28,29]:

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

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

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

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

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

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

En estas ecuaciones, el subíndice hnf denota nanofluido híbrido, μ es la viscosidad dinámica, ρ es la densidad, k es la conductividad térmica, Cp es el calor específico, T es la temperatura y p es la presión. Luego, estas ecuaciones diferenciales parciales se someten a las siguientes transformaciones de Von Kármán [2]:

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

para formar las siguientes ecuaciones diferenciales ordinarias no lineales y condiciones de contorno:

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

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

$$\frac{\mu_{bf}/\mu_{hnf}}{\rho_{bf}/\rho_{hnf}} g'' - h g' - 2fg = 0, \quad (10)$$

$$\frac{k_{hnf}/k_{bf}}{(\rho C_p)_{hnf}/(\rho C_p)_f} \theta'' - \Pr h \theta' = 0, \quad (11)$$

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

donde ' denota diferenciación con respecto a η; bf se refiere al fluido base; f , g y h son las velocidades radial, tangencial y axial; λ = a/Ω es el parámetro de contracción; S es el parámetro de transferencia de masa con S < 0 para inyección y S > 0 para succión; y $\Pr = \mu_{nf} C_p / k_{nf}$ es el número de Prandtl. Según Turkyilmazoglu [28], la presión del fluido se puede determinar integrando la ecuación (4), y la ecuación de presión resultante se desacopla del campo de flujo. Dado que el interés del presente estudio es analizar el flujo y los campos térmicos del nanofluido híbrido, la función de presión puede despreciarse.

Machine Translated by Google

Entonces, las cantidades físicas de interés son el coeficiente de fricción cutánea (Cf) y el número de Nusselt (Nur) [28]:

$$Cf = \frac{\mu hn\, f}{\rho b\, f\,(\Omega\, r)^2}\sqrt{\left(\frac{\partial\, tu}{z}\frac{\partial\, w}{\partial} + \frac{\partial}{z=0}\right)^2 + \left(\frac{\partial\, v\, 1}{\partial\, zr} + \frac{\partial\, w}{\partial}\right)^2_{z=0}},$$

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

lo que resulta en lo siguiente:

$$Re1/2\, Cf = \frac{\mu hn}{f\,\mu b\, f}\sqrt{[f'(0)]2 + [g'(0)]2}, \quad Re-1/2\, r\, Nur = -\theta\, kb\, f\frac{khn\, f}{}'(0), \tag{13}$$

donde Re1/2 r Cf es el coeficiente de fricción superficial local; Re−1/2 r Nur es el número de Nusselt local; es el número de Reynolds y Rer = $\frac{2}{\Omega r\, vbf}$ local. Aquí, un aumento en la velocidad angular puede elevar el número de Reynolds local.

3. Metodología de Superficie de Respuesta (RSM)

Box y Wilson [30] introdujeron un enfoque basado en el diseño experimental, que incorpora técnicas estadísticas y matemáticas, llamado metodología de superficie de respuesta (RSM). El RSM se puede utilizar para modelar, analizar y optimizar un sistema que contiene parámetros dependientes (respuesta) e independientes. La relación entre la respuesta y los parámetros independientes se puede describir de la siguiente manera [31]:

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

donde F es la función desconocida de respuesta con X1, X2, X3 ,. . . , XN como parámetros independientes; y E es el error experimental aleatorio que se supone tiene media cero. Mientras tanto, el modelo cuadrático general es

$$\text{Respuesta} = c0 + \sum_{yo=1}^{norte} cixi + \sum_{i\,i=1}^{norte} 2\, ciix + \sum_{yo=1}^{norte-1} \sum_{j=i+1}^{norte} cijxixj, \tag{15}$$

donde c0, ci , cii y cij representan los términos de dos factores interceptados, lineales, cuadráticos y bilineales , respectivamente.

El estudio actual utiliza el RSM y el diseño compuesto central centrado en la cara para investigar la importancia de la transferencia de masa y los parámetros de contracción en el coeficiente de fricción local de la piel y el número de Nusselt, así como la configuración óptima de estos parámetros para minimizar y maximizar las respuestas. Por lo tanto, los parámetros de transferencia de masa y contracción se indican como parámetros independientes, y el coeficiente de fricción superficial local y el número de Nusselt son las respuestas. Los parámetros independientes están etiquetados como A y B y se les asignan valores reales y codificados, como se muestra en la Tabla 1. Los rangos de los valores reales se toman en función de la investigación numérica realizada en el estudio actual.

Tabla 1. Los valores reales y codificados de los parámetros independientes.

Independiente Parámetro	Símbolo	Nivel		
		Bajo (-1)	Medio (0)	Alto (1)
λ	A	−1,0	−0,9	−0,8
S	B	−0,6	−0,1	0,4

El diseño compuesto central es el diseño de superficie de respuesta más comúnmente utilizado para determinar los coeficientes del modelo cuadrático. Según Bhattacharya [32], el

Machine Translated by Google

El diseño compuesto central tiene el beneficio de estimar la relación no lineal entre los parámetros independientes y la respuesta, así como la capacidad de proporcionar el máximo información con datos experimentales mínimos, y se necesitan menos experimentos para predecir el término cuadrático en un modelo cuadrático. El diseño compuesto central está compuesto de varios tipos, incluido el tipo centrado en la cara. El compuesto central centrado en la cara. El diseño requiere tres niveles de cada factor o parámetro independiente (es decir, −1, 0, 1) con Experimentos N + 2N + C. Aquí, N es el número de parámetros independientes; 2N denota los puntos factoriales; 2N denota los puntos axiales; y C denota los puntos centrales. Como Según Sahoo y Barman [33], los puntos centrales pueden variar de tres a seis. en esto En el estudio actual, con N = 2 y C = 5, se realizan un total de 13 corridas. El respectivo Las respuestas, calculadas utilizando MATLAB para cada ejecución, se tabulan en la Tabla 2. Mientras tanto, La Figura 2 presenta el diagrama de flujo de los procedimientos numéricos y estadísticos involucrados en la estudio actual.

Tabla 2. Diseño experimental y valores de respuesta.

Corre	Valores codificados		Valores reales		Respuestas	
	A	B	λ	S	$Re_{1/2}$ (Respuesta 1)	$Re_{\tau}^{1/2}\,Nu_r$ (Respuesta 2)
1	−1	−1	−1,0	−0,6	1.803245471	0.232133118
2	1	−1	−0,8	−0,6	1.529299905	0.975650061
3	−1	1	−1,0	0,4	1.475361873	0.000000014
4	1	1	−0,8	0,4	1.229514429	0.000001138
5	−1	0	−1,0	−0,1	1.642240690	0.000228587
6	1	0	−0,8	−0,1	1.380007580	0.004928016
7	0	−1	−0,9	−0,6	1.659170147	0.525530320
8	0	1	−0,9	0,4	1.346068736	0.000000126
9	0	0	−0,9	−0,1	1,504436107	0.001106468
10	0	0	−0,9	−0,1	1,504436107	0.001106468
11	0	0	−0,9	−0,1	1,504436107	0.001106468
12	0	0	−0,9	−0,1	1,504436107	0.001106468
13	0	0	−0,9	−0,1	1,504436107	0.001106468

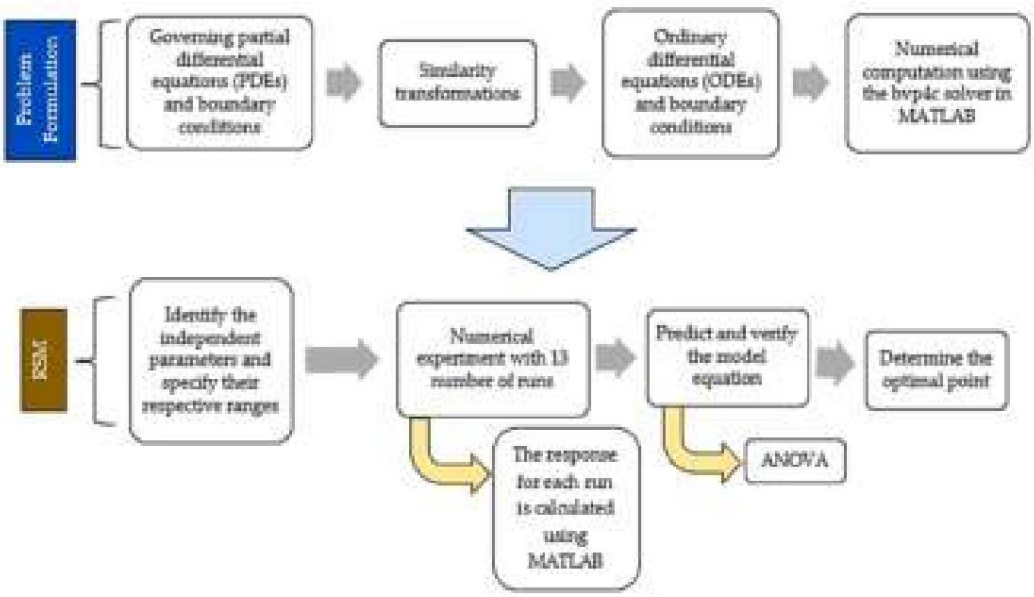


Figura 2. Diagrama de flujo de los procedimientos numéricos y estadísticos.

4. Resultados y Discusión

El problema de valores límite (8)-(12) se resuelve numéricamente utilizando el solucionador bvp4c en MATLAB y el algoritmo se presentan en Materiales complementarios. una comparación de

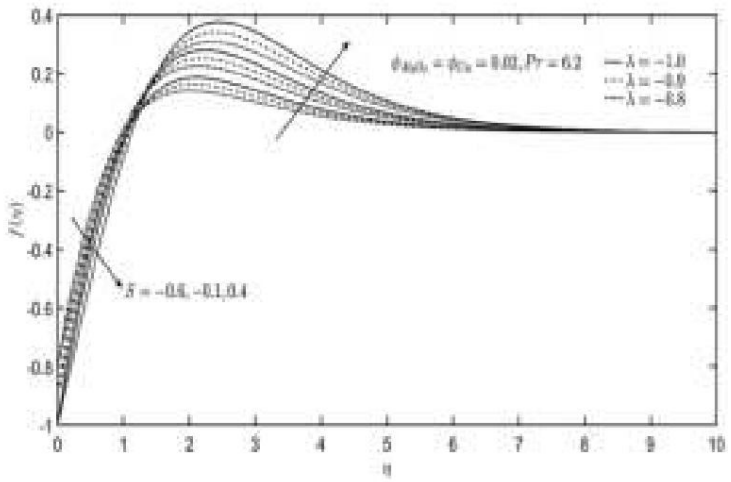
Machine Translated by Google

Los resultados se realizan para validar la exactitud del enfoque matemático empleado en este estudio actual. Para φhn f = 0, el problema del valor límite se reduce a un problema viscoso clásico. problema de flujo de fluido, y los resultados numéricos se pueden comparar con los calculados por Rashidi et al. [34] y Turkyilmazoglu [28]. Estos estudios previos utilizaron el disparo. y métodos de colocación espectral de Chebyshev, respectivamente. A pesar de la diferencia en las técnicas de cálculo, los resultados generados por el solucionador bvp4c están muy de acuerdo con los estudios previos (ver Tabla 3). Además, asumiendo el valor finito del flujo libre condición de frontera (es decir, η → ∞) es ηmax = 10, todos los perfiles adquiridos en esta investigación acerque las condiciones de contorno de la corriente libre (12) asintóticamente. Por lo tanto, mejora confianza en la confiabilidad de los hallazgos numéricos.

Tabla 3. Comparación de resultados para φAl2O3 = φCu = S = λ = 0 y Pr = 6,2.

	Rashidi et al. [34]	Turkyilmazoglu [28]	Estudio actual
F′(0)	0.510186	0.51023262	0.510232394
−g′(0)	0.61589	0.61592201	0.615921866
−θ′(0)	-	0.93387794	0.933877577

Los efectos de los parámetros de contracción y transferencia de masa sobre la velocidad y la temperatura. perfiles se presentan en la Figura 3. Las velocidades radial, tangencial y axial se denotan por f(η), g(η) y h(η), respectivamente. Como se observa en la Figura 3a, el perfil de velocidad radial de el nanofluido híbrido disminuye con el aumento del parámetro de transferencia de masa y la magnitud del parámetro de contracción. Sin embargo, se observa el comportamiento contrario a cierta distancia del disco. Como se supone que el disco tiene una condición antideslizante y para contraerse en la dirección radial, la velocidad radial del nanofluido híbrido cerca del disco disminuye a medida que aumenta la magnitud del parámetro de contracción. Los efectos de contracción hacia la velocidad del fluido se muestra que disminuyen a cierta distancia del disco (ver Figura 3a). Mientras tanto, la contracción del disco no afecta la tangencial y velocidades axiales del nanofluido híbrido. La velocidad tangencial del nanofluido híbrido. continúa aumentando en toda la capa límite cuando el parámetro de transferencia de masa y magnitud del aumento del parámetro de contracción (ver Figura 3b). La figura 3c demuestra que el perfil de velocidad axial cerca del disco aumenta tanto con el parámetro de transferencia de masa y la magnitud del parámetro de contracción. Como la transferencia de masa ocurre en el eje dirección, la velocidad del fluido aumenta con el parámetro de transferencia de masa. Mientras tanto, el La velocidad radial cerca del disco, que se muestra en la Figura 3a, disminuye debido a la eliminación de fluido del límite por succión (S > 0). El incremento en el parámetro y magnitud de la transferencia de masa. del parámetro de contracción mejora el perfil de temperatura, como se muestra en la Figura 3d.



(a)

Figura 3. Continuación.

Machine Translated by Google

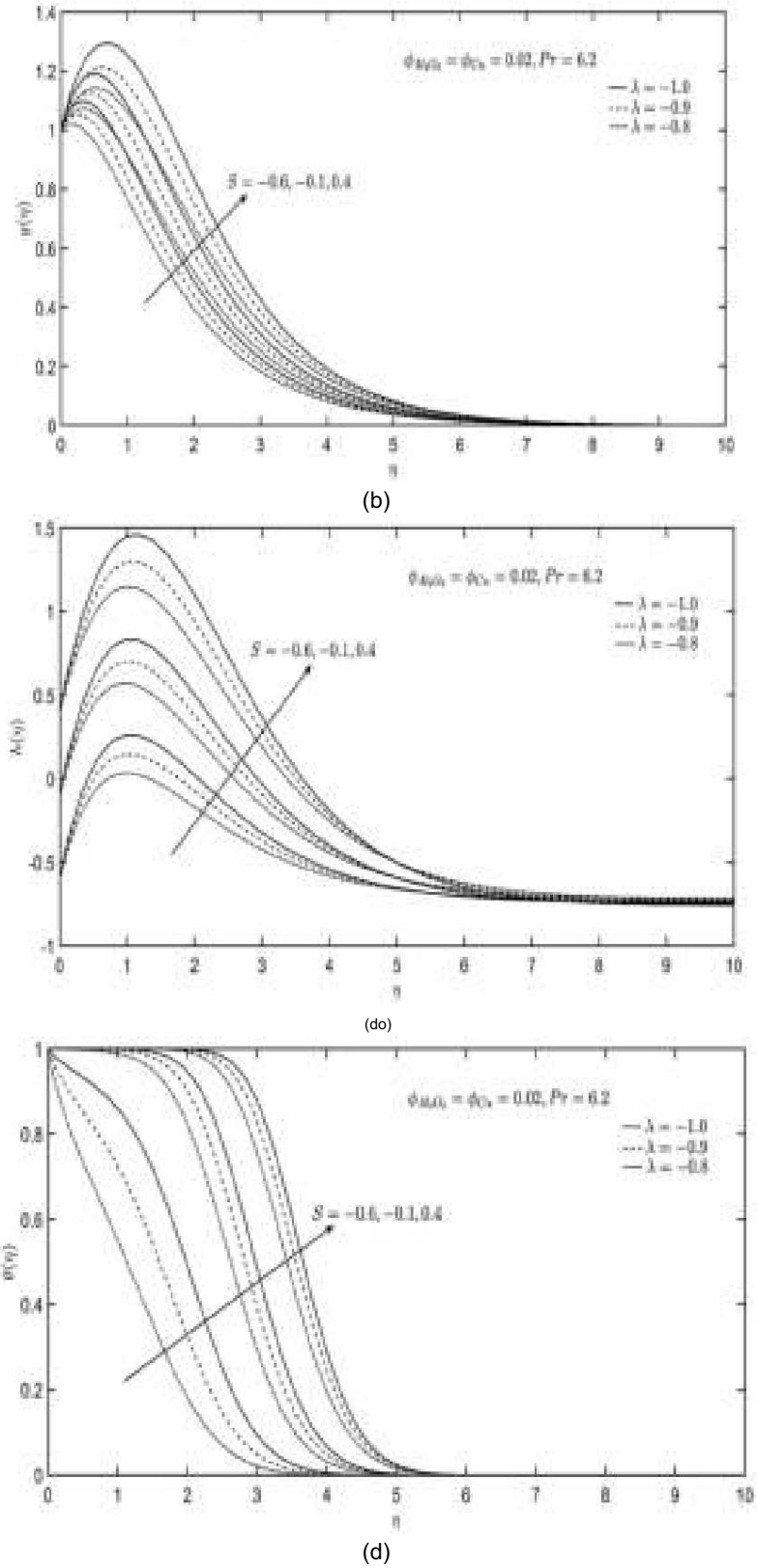
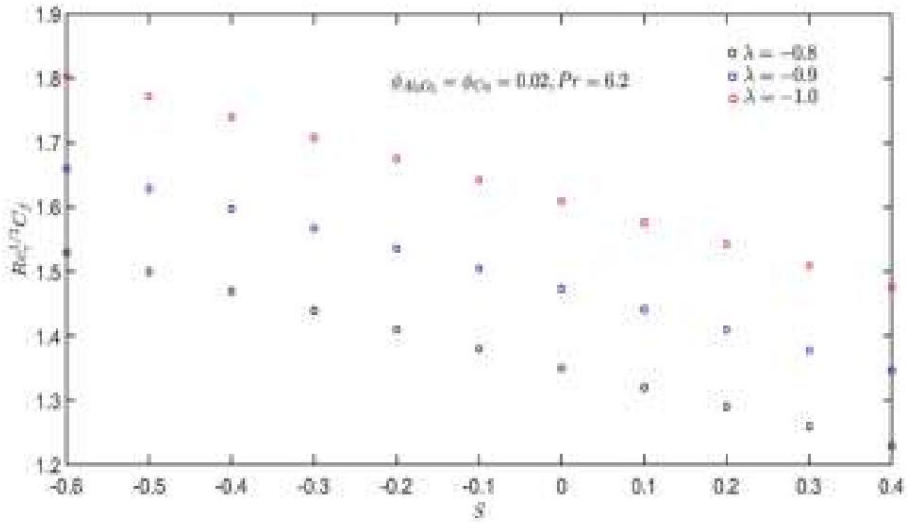


Figura 3. Los perfiles de (a) velocidad radial, (b) velocidad tangencial, (c) velocidad axial y (d) temperatura con varios valores de λ y S.

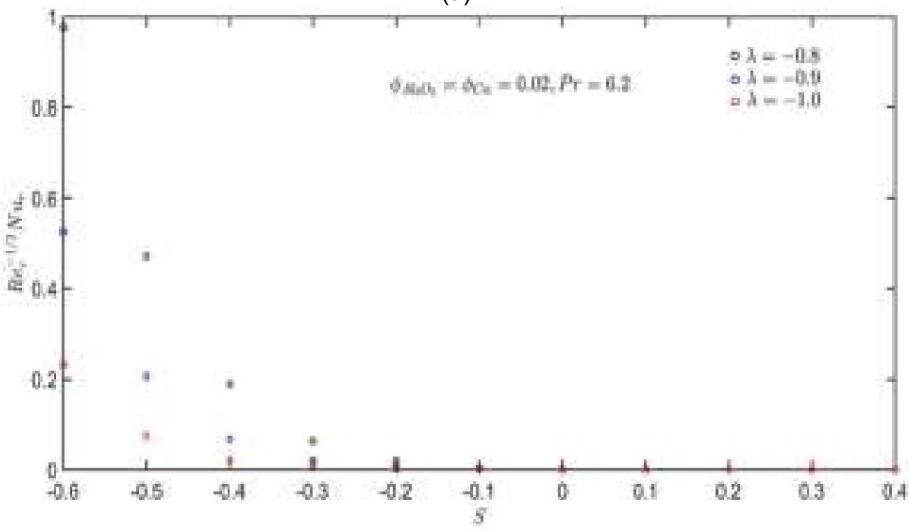
A continuación, los efectos de los parámetros de contracción y transferencia de masa sobre la fricción local de la piel. El coeficiente y el número de Nusselt se ilustran en la Figura 4. La mejora de la masa Se ha descubierto que el parámetro de transferencia reduce el coeficiente de fricción cutánea local y el número de Nusselt.

Machine Translated by Google

en la Figura 4a, b, respectivamente. Mientras tanto, el incremento en la magnitud de la contracción El parámetro aumenta el coeficiente de fricción de la piel local, como se muestra en la Figura 4a. Así, el muro La tensión cortante aumenta con el aumento de la magnitud del parámetro de contracción. En contraste, el número local de Nusselt disminuye a medida que |λ| aumenta. El comportamiento observado puede deberse a la reducción de la superficie disponible para la transferencia de calor. Por lo tanto, provoca el calor. La tasa de transferencia entre el disco y el nanofluido híbrido disminuirá. Es más, se puede señalar que los valores del coeficiente de fricción cutánea local y el número de Nusselt para la inyección caso (S < 0) son mayores que el caso de succión (S > 0).



(a)



(b)

Figura 4. Los perfiles de (a) coeficiente de fricción superficial local y (b) número de Nusselt local con varios valores de λ y S.

Mientras tanto, los impactos interactivos de los parámetros de contracción y transferencia de masa en las cantidades físicas de interés se analizan utilizando el RSM en Minitab. Las correlaciones entre los parámetros independientes y las respuestas vienen dadas por lo siguiente:

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

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

La importancia de cada término en las ecuaciones (16) y (17) se identifica mediante la análisis de varianza (ANOVA). Los resultados se presentan en las Tablas 4 y 5.

Machine Translated by Google

Tabla 4. Análisis de varianza para la Respuesta 1.

Fuente	DF	Ajuste SS	Adj MS	Valor F	Valor p
Modelo	5	0.249759313	0.049951863	174774.611709837	0.000000000
Lineal	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
Cuadrado	2	0.000126277	0.000063139	220.913397825	0.000000474
[illegible]	1	0.000124396	0.000124396	435.243856915	0.000000146
[illegible]	1	0.000008884	0.000008884	31.084684334	0.000837291
2 vías Interacción	1	0.000197376	0.000197376	690.591542539	0.000000030
AB	1	0.000197376	0.000197376	690.591542539	0.000000030
Error	7	0.000002001	0.000000286		
Falta de ajuste	3	0.000002001	0.000000667	*	*
Error puro	4	0.000000000	0.000000000		
Total	12	0.249761314			

El símbolo * indica que el valor es demasiado pequeño.

Tabla 5. Análisis de varianza para la Respuesta 2.

Fuente	DF	Ajuste SS	Adj MS	Valor F	Valor p
Modelo	5	1.000087703	0,200017541	29,206710770	0,000150454
Lineal	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
Cuadrado	2	0.267850314	0,133925157	19,555851501	0,001363026
[illegible]	1	0.001069278	0.001069278	0.156136818	0.704502971
[illegible]	1	0.216321666	0,216321666	31,587451304	0,000798846
2 vías Interacción	1	0.138203943	0,138203943	20,180643085	0,002824322
AB	1	0.138203943	0,138203943	20,180643085	0,002824322
Error	7	0.047938393	0.006848342		
Falta de ajuste	3	0.047938393	0.015979464	*	*
Error puro	4	0.000000000	0.000000000		
Total	12	1.048026096			

El símbolo * indica que el valor es demasiado pequeño.

El símbolo * indica que el valor es demasiado pequeño.

Según Alhadri et al. [35], un término es estadísticamente significativo si su valor p es menor que 0,05. Según las Tablas 4 y 5, todos los términos son significativos para la correlación (16), mientras que los El término AA se puede eliminar de la correlación (17) ya que su valor p es mayor que 0,05. Después eliminando el término insignificante, se realiza un segundo ANOVA para la Respuesta 2. Luego, Se obtienen las siguientes nuevas correlaciones, que contienen sólo los términos significativos:

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

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

Con base en las ecuaciones (18) y (19), se considera que el término B tiene una correlación negativa con Respuesta 1 y Respuesta 2. Por lo tanto, el incremento en el parámetro de transferencia de masa tiene un impacto desfavorable sobre el coeficiente de fricción superficial local y el número de Nusselt. Estos Los hallazgos concuerdan con los resultados obtenidos en la Figura 4.

Entonces, los impactos interactivos entre los parámetros de contracción y transferencia de masa pueden analizarse a través de los gráficos de superficie y contorno que se muestran en las Figuras 5 y 6. Basado En la Figura 5, el aumento en A y B reduce la Respuesta 1. Los niveles superior y medio Se observa que el parámetro de contracción (A) y el parámetro de transferencia de masa (B) producen bajos valores de $Re_{1/2}r\,Cf$ (Respuesta 1). El máximo $Re_{1/2}\,r\,Cf$ (Respuesta 1) ocurre en niveles bajos

Machine Translated by Google

de estos parámetros independientes. Mientras tanto, la Figura 6 muestra que los niveles más bajos de la parámetro de transferencia de masa (B) y niveles más altos del parámetro de contracción (A) producen valores altos de $Re\sqrt{Nu}$ (Respuesta 2). Sin embargo, en el nivel moderado de transferencia de masa parámetro (B), el incremento en el parámetro de contracción (A) no tiene ningún efecto significativo en $Re\sqrt{Nu}$ (Respuesta 2).

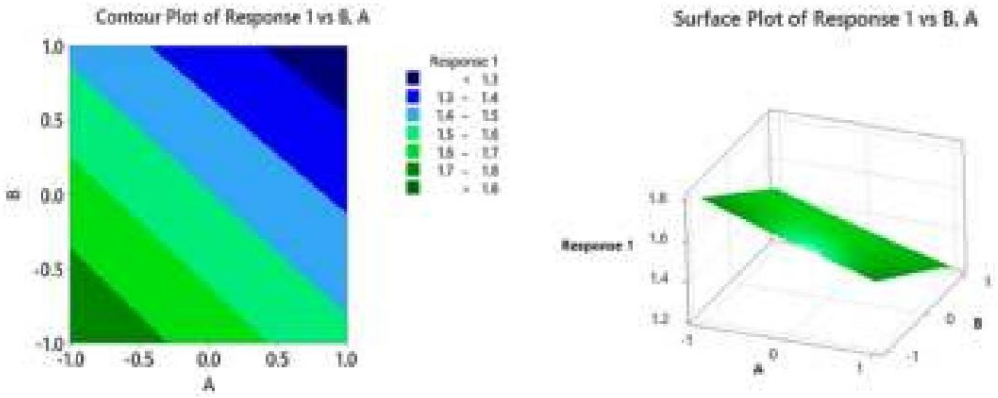


Figura 5. Gráficos de contorno y superficie para la Respuesta 1.

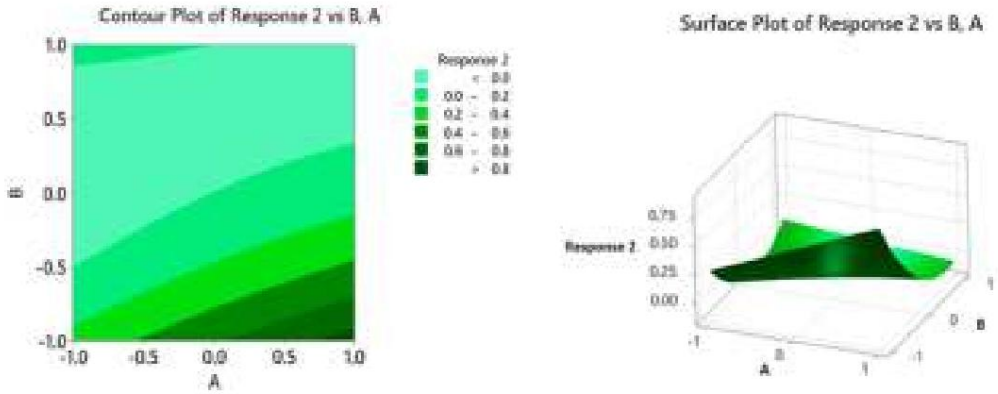


Figura 6. Gráficos de contorno y superficie para la Respuesta 2.

A continuación, se realiza la optimización para minimizar y maximizar la fricción local de la piel. coeficiente y número de Nusselt, respectivamente. El coeficiente de fricción local de la piel está relacionado con el esfuerzo cortante de la pared. Se busca un bajo coeficiente de fricción cutánea para reducir el consumo energético. en la mayoría de las aplicaciones. Mientras tanto, una alta tasa de transferencia de calor, representada por el local Nusselt número, es deseable para un mejor rendimiento de transferencia de calor en procesos de enfriamiento o calentamiento. La deseabilidad compuesta evalúa cómo las configuraciones de los parámetros independientes optimizar un conjunto dado de respuestas. La deseabilidad se mide en una escala de cero a uno. Un valor de cero significa que una o más respuestas exceden sus límites permitidos, mientras que un valor de uno representa el escenario óptimo. Por lo tanto, en la presente investigación, el La optimización se puede observar examinando la deseabilidad del compuesto.

La Tabla 6 presenta el resultado de la optimización para el coeficiente de fricción superficial local y Nusselt. número. El coeficiente de fricción cutánea local mínimo (Respuesta 1) y el coeficiente local máximo El número de Nusselt (Respuesta 2) se puede lograr configurando el parámetro de contracción (A) y parámetro de transferencia de masa (B) en niveles alto y bajo, respectivamente. Con una deseabilidad del 66% en $\lambda = -0,8$ y $S = -0,8$, el coeficiente de fricción superficial local se minimiza en 1,528780016, mientras que el número local de Nusselt se maximiza en 0,888353037. Por tanto, la magnitud más baja del parámetro de contracción y el parámetro de transferencia de masa más bajo optimizaron la física cantidades de interés en el problema de flujo actual. Se puede observar un comportamiento diferente para otros parámetros de control y rangos de condiciones de flujo.

Machine Translated by Google

Tabla 6. Optimización de respuestas.

Solución	A	B	Respuesta 2 Adaptar	Respuesta 1 Adaptar	Compuesto Atractivo
1	1	−1	0.888353037	1.528780016	0.659986551

5. Conclusiones

El estudio actual analiza el flujo de disco giratorio de un nanofluido híbrido. Se considera que el disco se contrae en la dirección radial y es permeable para permitir la succión/inyección. El coeficiente de fricción superficial local y el número de Nusselt para este problema de flujo se optimizan utilizando el RSM. Primero, las ecuaciones que rigen el problema de flujo, que consisten en ecuaciones diferenciales y condiciones de contorno, se presentan y resuelven utilizando el solucionador bvp4c en MATLAB. Luego, se utiliza el software Minitab 21 para realizar el RSM. Los resultados se describen a continuación:

1. A medida que aumentan el parámetro de transferencia de masa y la magnitud del parámetro de contracción (|λ|) , el perfil de velocidad radial del nanofluido híbrido cerca del disco disminuye.
2. El incremento en el parámetro de transferencia de masa y la magnitud del parámetro de contracción mejoran los perfiles de velocidad tangencial, velocidad axial y temperatura.
3. El coeficiente de fricción superficial local y el número de Nusselt disminuyen con el aumento del parámetro de transferencia de masa. El caso de la inyección demuestra valores más altos de estas cantidades físicas de interés que el caso de la succión.
4. El incremento en la magnitud del parámetro de contracción mejora la piel local. coeficiente de fricción y reduce el número de Nusselt local.
5. Basado en el RSM, valores bajos de Re1/2 r Cf se producen a niveles altos y medios del parámetro de contracción (λ) y del parámetro de transferencia de masa. Mientras tanto, el valor más alto de Re1/2 r Cf se observa a niveles bajos de estos parámetros independientes.
6. Valores altos de Re-1/2 nivel Nur ocurren en niveles más bajos del parámetro de transferencia de masa y más altos del parámetro de contracción.
   El número de Nusselt local no se ve afectado significativamente por el aumento en el parámetro de contracción en el nivel moderado del parámetro de transferencia de masa.
7. Con una deseabilidad del 66%, el coeficiente de fricción superficial local se minimiza en 1,528780016, mientras que el número de Nusselt local se maximiza en 0,888353037 cuando λ = −0,8 y S = −0,6.

El estudio actual se puede ampliar a otros tipos de nanofluidos híbridos, como los nanofluidos híbridos no newtonianos, los nanofluidos híbridos de nanotubos de carbono y los nanofluidos híbridos ternarios. Además, la compleja interacción no lineal de varios parámetros de control en este problema de flujo se puede analizar más a fondo utilizando una sofisticada técnica de aprendizaje automático conocida como red neuronal artificial (RNA).

Materiales complementarios: la siguiente información de respaldo se puede descargar en: https://www.mdpi.com/article/10.3390/computation12070141/s1.

Contribuciones de los autores: conceptualización, propiedad intelectual; metodología, IP y RIY; validación, IP y NMA; análisis formal, RIY; redacción: preparación del borrador original, RIY e IP; redacción: revisión y edición, NMA e IP; supervisión, NMA, FMA y SSPMI; adquisición de financiación, NMA Todos los autores han leído y aceptado la versión publicada del manuscrito.

Financiamiento: Esta investigación fue financiada por Universiti Putra Malaysia, subvención número GP-GPB 9711400.

Declaración de disponibilidad de datos: Las contribuciones originales presentadas en el estudio se incluyen en el artículo/materiales complementarios; más consultas pueden dirigirse a los autores correspondientes.

Conflictos de intereses: Los autores declaran no tener conflictos de intereses. Los financiadores no tuvieron ningún papel en el diseño del estudio; en la recopilación, análisis o interpretación de datos; en la redacción del manuscrito; o en la decisión de publicar los resultados.

Machine Translated by Google

Referencias

1. Gamachu, D.; Ibrahim, W. Flujo de convección mixto de nanofluido híbrido viscoelástico Ag-Al2O3/agua más allá de un disco giratorio. Física. scr. 2021, 96, 125205. [Referencia cruzada]
2. Kármán, TV Über Laminare Und Turbulente Reibung. ZAMM J. Appl. Matemáticas. Mec. Z. Angew. Matemáticas. Mec. 1921, 1, 233–252. [Referencia cruzada]
3. Ayano, MS; Otegbeye, O.; Mathunjwa, JS Simulación numérica del flujo de nanofluidos debido a un disco giratorio estirable. Teor. Aplica. Mec. 2023, 50, 55–72. [Referencia cruzada]
4. Sharma, K.; Vijay, N.; Bhardwaj, D.; Jindal, R. Flujo de agua que transporta nanopartículas de Fe3O4 y Mn-ZnFe2O4 sobre un disco giratorio: importancia de la termoforesis y el movimiento browniano. J. Magn. Magn. Madre. 2023, 574, 170710. [Referencia cruzada]
5. Puneeth, V.; Ali, EH; Pop, I. Nanofluido que fluye sobre un disco giratorio que se estira y es permeable: un modelo inestable. Int. J.Mod. Física. B 2023, 37, 23502491. [Referencia cruzada]
6. Rashid, A.; Dawar, A.; Ayaz, M.; Islam, S.; Galal, AM; Gul, H. Solución homotópica del flujo magnetohidrodinámico químicamente reactivo de un nanofluido híbrido sobre un disco giratorio con movimiento browniano y efectos de termoforesis. ZAMM Z. Angew. Matemáticas. Mec. 2023, 103, e202200262. [Referencia cruzada]
7. Alkuhayli, NAM Análisis de transferencia de calor de un flujo de nanofluido híbrido en un disco giratorio considerando los efectos de la radiación térmica. Caso Stud. Termia. Ing. 2023, 49, 103131. [Referencia cruzada]
8. Kumar, P.; Poonia, H.; Areekara, S.; Sabú, AS; Mateo, A.; Ali, L. Importancia de la fuente de calor irregular y la energía de Arrhenius en el flujo de nanofluidos híbridos electromagnetohidrodinámicos sobre un disco giratorio extensible con radiación no lineal. Número. Calor. Transf. Una aplicación. 2024, 85, 1866–1888. [Referencia cruzada]
9. Kulkarni, M. Flujo de nanofluidos híbridos GO-MoS2 / H2O magnetizados convectivos mixtos alrededor de un disco giratorio permeable. Asia Pacífico. J. química. Ing. 2023, 18, e2923. [Referencia cruzada]
10. Solitario, SA; Anwar, S.; Raizah, Z.; Almusawa, MI; Saeed, A. Una investigación teórica del flujo de nanofluidos híbridos a base de agua MHD sobre una superficie de disco giratorio calentado por convección con deslizamientos de velocidad y condiciones de flujo de masa cero. euros. Física. J. Plus 2023, 138, 1–14. [Referencia cruzada]
11. Khashi'ie, NS; Waini, I.; Zainal, NA; Hamzah, K.; Arifin, Nuevo México; Pop, I. Múltiples soluciones y análisis de estabilidad del flujo de nanofluidos híbridos magnéticos sobre un disco giratorio con generación de calor. J. Adv. Res. Líquido. Mec. Termia. Ciencia. 2023, 102, 59–72. [Referencia cruzada]
12. Vijay, N.; Sharma, K. Flujo de nanofluidos híbridos magnetohidrodinámicos sobre un disco giratorio desacelerado con Soret y Dufour Efectos. Multidisciplinario. Modelo. Madre. Estructura. 2023, 19, 253–276. [Referencia cruzada]
13. Abu Bakar, S.; Papá, yo; Md Arifin, N. Flujo inestable de nanofluido híbrido sobre un disco giratorio inclinado que se encoge y permeable con efectos de deslizamiento de velocidad y radiación. Computación neuronal. Aplica. 2024, 36, 11525–11544. [Referencia cruzada]
14. Ali, F.; Zaib, A.; Khan, Michigan; Alzahrani, F.; Eldin, SM Análisis de irreversibilidad en el flujo de punto de estancamiento de nanofluido trihíbrido sobre un disco giratorio; Aplicación de la Energía Cinética. J. Indio. Química. Soc. 2023, 100, 100873. [Referencia cruzada]
15. Singh, SP; Kumar, M.; Yaseen, M.; Rawat, SK Flujo de nanofluido híbrido ternario (TiO2-SiO2-MoS2/ aceite de queroseno) sobre un disco giratorio con radiación térmica cuadrática y modelo de Cattaneo-Christov. J. Cent. Universidad S. 2023, 30, 1262–1278. [Referencia cruzada]
16. Patgiri, B.; Paul, A. Inspección del flujo de nanofluidos tetrahíbridos de aceite viscoelástico Ag + Cu + Fe3O4 + Al2O3 / queroseno a través de un Disco giratorio estirable con viscosidad exponencialmente variable. Universidad J. Taibah. Ciencia. 2024, 18, 2336327.
17. Ali, I.; Gul, T.; Khan, A. Flujo hidromagnético inestable sobre un disco giratorio inclinado mediante un enfoque de redes neuronales. Matemáticas 2023, 11, 1893. [CrossRef]
18. Varun Kumar, RS; Kumar, enfermera registrada; Ben Ahmed, S.; Madhu, J.; Verma, A.; Punith Gowda, RJ Flujo inestable de un nanofluido ternario sobre un disco de rotación lenta sujeto a succión uniforme y red neuronal retropropagada. Número. Transf. de calor. Parte B Fundam. 2023, 1–21. [Referencia cruzada]
19. Mehmood, T.; Ramzan, M.; Howari, F.; Kadry, S.; Chu, YM Aplicación de la metodología de superficie de respuesta en el flujo de nanofluidos sobre un disco giratorio con reacción química autocatalítica y optimización de la generación de entropía. Ciencia. Rep. 2021, 11, 4021. [Referencia cruzada]
20. Shafiq, A.; Sindhu, Tennessee; Al-Mdallal, QM Un estudio de sensibilidad sobre la importancia de los nanotubos de carbono en el flujo de Darcy-Forchheimer hacia un disco giratorio mediante la metodología de superficie de respuesta. Ciencia. Rep. 2021, 11, 8812. [CrossRef]
21. Mateo, A.; Areekara, S.; Sabu, AS Importancia del campo magnético y los efectos de la estratificación en el flujo del punto de estancamiento bioconvectivo de ferro-nanofluido sobre un disco elástico giratorio: metodología de superficie de respuesta de cuatro factores. J. Química india. Soc. 2022, 99, 100615. [Referencia cruzada]
22. Hussain, S.; Ali, A.; Rashid, K.; Pasha, AA; Algarni, S.; Alqahtani, T.; Irshad, K. Aplicación de la metodología de superficie de respuesta para optimizar el flujo de nanofluidos MHD sobre un disco giratorio con radiación térmica y calentamiento Joule. Caso Stud. Termia. Ing. 2023, 52, 103715. [Referencia cruzada]
23. Khashi'ie, NS; Waini, I.; Hamzah, KB; Mukhtar, MF; Kasim, BRAZO; Arifin, Nuevo México; Pop, I. Solución numérica y análisis estadístico del flujo de ferrofluido híbrido inestable con generación de calor sujeto a un disco giratorio. ZAMM J. Appl. Matemáticas. Mec. Z. Angélica. Matemáticas. Mec. 2023, 103, e202200384. [Referencia cruzada]
24. Siddiqui, FR; Tso, CY; Chan, KC; Fu, Carolina del Sur; Chao, CYH sobre la compensación por la estabilidad de la dispersión y el transporte térmico del nanofluido híbrido Cu-Al2O3 para diversas relaciones de mezcla. Int. J. Transferencia de masa de calor. 2019, 132, 1200–1216. [Referencia cruzada]

Machine Translated by Google

25. Takabi, B.; Gheitaghy, AM; Tazraei, P. Suspensión híbrida a base de agua de nanopartículas de Al2O3 y Cu por convección laminar Eficacia. J. Termofis. Transmisión de calor. 2016, 30, 523–532. [Referencia cruzada]
26. Oztop, HF; Abu-Nada, E. Estudio numérico de la convección natural en recintos rectangulares parcialmente calentados llenos de Nanofluidos. Int. J. Flujo de fluido térmico 2008, 29, 1326–1336. [Referencia cruzada]
27. Suresh, S.; Venkitaraj, KP; Selvakumar, P.; Chandrasekar, M. Síntesis de nanofluidos híbridos Al2O3 -Cu/agua utilizando el método de dos pasos y sus propiedades termofísicas. Surf de coloides. Una fisicoquímica. Ing. Áspid. 2011, 388, 41–48. [Referencia cruzada]
28. Turkyilmazoglu, M. Flujo de nanofluidos y transferencia de calor debido a un disco giratorio. Computadora. Fluidos 2014, 94, 139–146. [Referencia cruzada]
29. Yin, C.; Zheng, L.; Zhang, C.; Zhang, X. Flujo y transferencia de calor de nanofluidos sobre un disco giratorio con tasa de estiramiento uniforme en dirección radial. Propulsores. Res. de potencia. 2017, 6, 25–30. [Referencia cruzada]
30. Caja, GEP; Wilson, KB Sobre el logro experimental de condiciones óptimas. Estadística JR. Soc. Ser. B (Método.) 1951, 13, 1–38. [Referencia cruzada]
31. Mahanthesh, B.; Thriveni, K.; Rana, P.; Muhammad, T. Transferencia de calor radiativo de nanomaterial en un tubo circular calentado por convección con energía de activación y efectos cinemáticos de agregación de nanopartículas. Int. Comunitario. Transf. masa calor. 2021, 127, 105568. [Referencia cruzada]
32. Bhattacharya, S. Diseño compuesto central para la metodología de superficie de respuesta y su aplicación en farmacia. En respuesta Metodología de Superficies en Ciencias de la Ingeniería; IntechOpen: Londres, Reino Unido, 2021.
33. Sahoo, P.; Barman, TK ANN Modelado de dimensiones fractales en mecanizado. En Mecatrónica e Ingeniería de Manufactura; Woodhead Publishing: Cambridge, Reino Unido, 2012.
34. Rashidi, MM; Abelman, S.; Más, generación de entropía NF en flujo constante de MHD debido a un disco poroso giratorio en un nanofluido. Int. J. Transferencia de masa de calor. 2013, 62, 515–525. [Referencia cruzada]
35. Alhadri, M.; Raza, J.; Yashkun, U.; Lund, Luisiana; Maatki, C.; Khan, SU; Kolsi, L. Simulaciones de metodología de superficie de respuesta (RSM) y redes neuronales artificiales (ANN) para flujo térmico de nanofluidos híbridos con efectos Darcy-Forchheimer. J. Química india. Soc. 2022, 99, 100607. [Referencia cruzada]

Descargo de responsabilidad/Nota del editor: Las declaraciones, opiniones y datos contenidos en todas las publicaciones son únicamente de los autores y contribuyentes individuales y no de MDPI ni de los editores. MDPI y/o los editores renuncian a toda responsabilidad por cualquier daño a personas o propiedad que resulte de cualquier idea, método, instrucción o producto mencionado en el contenido.

Machine Translated by Google

cálculo

MDPI

Revisar

Ingeniería de sistemas basada en dinámica de fluidos computacional para astronomía terrestre

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

[1] Organización del Telescopio Gigante de Magallanes, Pasadena, CA 91101, EE. UU.; gyangeli@gmail.com (GA); rconan@gmto.org (RC)
[2] Observatorio Internacional TMT, Pasadena, CA 91124, EE. UU.; gtrancho@tmt.org *
Correspondencia: konvoyages@gmail.com

Resumen: Este artículo presenta las técnicas más modernas empleadas en modelado aerotérmico para responder a los desafíos actuales del diseño de observatorios, en particular los de la próxima generación de telescopios extremadamente grandes (ELT), como el ELT europeo, el Observatorio Internacional del Telescopio de Treinta Metros (TIO) y el Telescopio Gigante de Magallanes (GMT). Se revisan las diversas técnicas de simulación aerotérmica, la sinergia entre los resultados de la modelización y la modelización integradora del observatorio, y sus aplicaciones recientes. El conjunto de modelado aerotérmico presentado incluye modelos de redes térmicas, modelos de dinámica de fluidos computacional (CFD), modelos térmicos y de deformación de sólidos y modelos conjugados de transferencia de calor (simulaciones concurrentes de fluido/sólido). La suite aerotérmica es parte del marco general de modelado integrado (IM) del observatorio, que también incluye óptica, dinámica y controles. Los resultados del marco IM, nominalmente métricas de calidad de imagen (IQ) para un estado específico del telescopio, se introducen en un marco estocástico en forma de una matriz multidimensional que cubre el rango de parámetros operativos que influyen, proporcionando así una representación estadística del rendimiento del observatorio. - mance. Las aplicaciones del marco van desde la selección del sitio, la caracterización de la capa del suelo y el desarrollo del sitio hasta la mejor estimación y optimización actual del desempeño del observatorio, el diseño de control térmico activo, el análisis estructural y una variedad de estudios comerciales de costo-rendimiento. Finalmente, este artículo aborda las mejoras planificadas, el desarrollo de nuevas ideas, el abordaje de nuevos desafíos y cómo todo esto se relaciona con la iniciativa “Computational Fluid Dynamics Vision 2030”.

Palabras clave: dinámica de fluidos computacional; modelado aerotérmico; ingeniería de sistemas; telescopios terrestres

check for updates

Cita: Vogiatzis, K.; Angeli, G.; Trancho, G.; Conan, R. Ingeniería de sistemas basada en dinámica de fluidos computacional para astronomía terrestre. Computación 2024, 12, 143. https://doi.org/10.3390/ computation12070143

Editor académico: Dimitrios Koubogiannis

Recibido: 10 de junio de 2024
Revisado: 29 de junio de 2024
Aceptado: 3 de julio de 2024
Publicado: 11 de julio de 2024

Copyright: © 2024 por los autores. Licenciatario MDPI, Basilea, Suiza. Este artículo es un artículo de acceso abierto. distribuido bajo los términos y condiciones de los Creative Commons Licencia de atribución (CC BY) (https:// creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

1. Introducción

Una fracción significativa (aproximadamente un tercio) de la aberración total de la imagen de los observatorios ópticos terrestres tiene causas aerotérmicas, la mayor parte atribuida a la visión térmica (~80%), la fluctuación del viento y las deformaciones térmicas de la estructura y la óptica del telescopio. Estas aberraciones también conllevan la mayor incertidumbre debido a su naturaleza aleatoria. A lo largo de los años, se han desarrollado e implementado varios diseños empíricos de gestión térmica y aerodinámica y estrategias operativas . En las últimas dos décadas, sin embargo, la optimización de la configuración y operación de estas herramientas se realiza modelando la interacción montaña-observatorio y la interacción interior del recinto-estructura-óptica

En este artículo, presentamos las técnicas de última generación empleadas en el modelado aerotérmico para abordar los desafíos actuales del diseño de observatorios, en particular los de la próxima generación de ELT (telescopios extremadamente grandes). Este también es el acrónimo del primero, actualmente en construcción en Chile por el Observatorio Europeo Austral (ESO), con un diámetro de espejo primario de ~39 m [1]. Para evitar confusiones, a menudo se le llama E-ELT (ELT europeo o ESO ELT). Al otro lado del Atlántico existen dos proyectos de este tipo: el Telescopio Gigante de Magallanes (GMT) [2] y el Observatorio Internacional del Telescopio de Treinta Metros (TIO) [3]. Los dos telescopios de ~25 my ~30 m de diámetro de espejo primario y actualmen

Machine Translated by Google

Planeados para los hemisferios sur y norte, respectivamente, pueden brindar diversas oportunidades de investigación y permitir avances fundamentales en casi todas las áreas de la astrofísica, desde nuestro Sistema Solar hasta las estrellas y galaxias más distantes, desde la física fundamental y la cosmología hasta la búsqueda de evidencia de vida en el planeta. planetas alrededor de otras estrellas.

Las aplicaciones recientes de modelado aerotérmico abarcan desde la selección de sitios, la caracterización de la capa del suelo y el desarrollo del sitio hasta la optimización del diseño aerotérmico de los observatorios, el diseño de control térmico, el análisis estructural y una variedad de estudios comerciales de costo-rendimiento . Se presentará una revisión de los tipos de modelos aerotérmicos empleados por TIO y GMT . Estos modelos son extensibles a todos los observatorios ópticos, incluidos los solares, y aspectos de ellos incluso a los radiotelescopios. A esto le seguirá la sinergia entre los resultados del modelado (como presiones superficiales, fuerzas integradas, momentos, campos de temperatura y coeficientes de transferencia de calor) y el modelado integrador del observatorio (IM). Finalmente, se visitarán las mejoras planificadas, el desarrollo de nuevas ideas, el abordaje de nuevos desafíos y cómo todo esto se relaciona con la “Visión de Dinámica de Fluidos Computacional 2030”.

2. Sinergia de Modelado Integrado

2.1. Métricas de desempeño y validación de requisitos

Los proyectos ELT establecieron parámetros clave de desempeño (KPP) para medir, rastrear y gestionar la evolución del desempeño esperado del observatorio durante la construcción y la puesta en servicio.

Los documentos básicos generales comienzan con el Documento de requisitos de operaciones (para TIO) o el Concepto de operaciones (para GMT) y el Documento de requisitos científicos (SRD) (todos de nivel 1), que se derivan de casos científicos predeterminados. Los requisitos del SRD luego pasan al Documento de Requisitos del Observatorio (ORD; Nivel 2), que es la respuesta del proyecto al SRD y contiene requisitos técnicos que establecen la línea de base para el proyecto de construcción. Los requisitos en el ORD se dan en unidades de ingeniería que se pueden medir y verificar durante la fase de ensamblaje, integración, verificación y puesta en servicio (AIVC) del proyecto.

Los KPP están definidos en la ORD y son los requisitos de ingeniería que tendrían el impacto más significativo para la ciencia si no se cumplieran. Muchos de los KPP de nivel 2 se vinculan con varios de los requisitos científicos. Cada requisito de Nivel 2 también tiene un presupuesto de desempeño asociado en el Documento de Arquitectura del Observatorio (OAD) de Nivel 3.
La Figura 1 indica el análisis de mejor estimación (CBE) actual: las asignaciones de los presupuestos de errores, incluidos los presupuestos de KPP, se transfieren en unidades de ingeniería a los documentos de requisitos del subsistema de nivel 4.

Figura 1. Ciclo de cumplimiento y análisis CBE.

2.2. Marco de modelado integrado El

modelo integrado es un marco informático único que combina subconjuntos de modelos especializados, que son representaciones numéricas detalladas de propiedades y funcionalidades específicas de un ELT [4,5]. Se trata de una composición de varios modelos físicos, de los que forman parte también los modelos de aerotermia, y un sistema de control distribuido que une los sensores y actuadores emulados por los diferentes modelos. Una instancia de IM es una simulación en el dominio del tiempo configurada con un conjunto de parámetros que representan una especificación de diseño de telescop

Machine Translated by Google

Los modelos de perturbaciones ambientales proporcionan condiciones de contorno externas a los modelos físicos. Ejemplos de perturbaciones externas son la atmósfera y la visión local, las fuerzas del viento, las fuentes de calor, etc. Las perturbaciones ambientales son estocásticas por naturaleza y se extrae una ocurrencia aleatoria de las perturbaciones para cada instancia del modelo. De ello se deduce que el rendimiento óptico también es estocástico, y el rendimiento de un diseño de telescopio se establece en función de los momentos estadísticos de la métrica de rendimiento óptico (en este caso, KPP). Por lo tanto, el objetivo del IM es estimar los términos del presupuesto de error de Nivel 3 y los KPP de Nivel 2.

Cada simulación del IM genera una salida (valor KPP) que es válida para un conjunto particular de valores de perturbación, llamado Estado del sistema. Cada perturbación (o parámetro influyente) se discretiza con varios valores que cubren su rango esperado. Para abarcar todo el entorno operativo, la simulación debe repetirse para una combinación diferente de valores de perturbación. Por lo tanto, se genera una matriz multidimensional de valores KPP o tablas de consulta (LUT) .

2.3. Marco estocástico

El sistema de observatorios puede considerarse un proceso estocástico; su comportamiento no es determinista, en el sentido de que el estado posterior del sistema está determinado tanto por acciones predecibles como por elementos aleatorios. En consecuencia, cualquier métrica que describa el desempeño del sistema es una variable estadística. Si bien algunos aspectos del rendimiento pueden predecirse de manera determinista dado un conjunto de entradas, estas entradas en sí mismas suelen ser de naturaleza estadística [6,7].

Una amplia gama de imperfecciones y perturbaciones externas son verdaderamente aleatorias en el tiempo o mediante realizaciones. Como ejemplo, los efectos ópticos de las deformaciones térmicas de los elementos ópticos y su estructura de soporte se pueden calcular de forma determinista. Los datos de entrada para los cálculos de deformación térmica son parámetros ambientales y operativos aleatorios.
La respuesta habitual a esta complejidad es definir intuitivamente los escenarios “representativos” y “peores de los casos” y luego calcular el desempeño “medio” y “limitante”.

Para obtener una mejor visión, desarrollamos un marco estocástico para definir y evaluar el desempeño. Se basa en datos de pruebas de sitio recopilados por los proyectos en los sitios de los observatorios Maunakea y Las Campanas, así como en el historial de secuencias de operación de los observatorios Gemini Norte y Magallanes [8,9]. El rendimiento de un ELT se expresa y evalúa en comparación con un programa de observación real llevado a cabo en el mismo entorno donde se construirá.

No es práctico que un modelo único y unificado abarque todos los períodos de tiempo relevantes para el desempeño de un ELT, desde milisegundos hasta años. Por lo tanto, nuestro enfoque es separar los procesos físicos en distintos modelos matemáticos que puedan explorarse de forma algo independiente. Utilizando la métrica de sensibilidad de fuente puntual normalizada (PSSn) [10-12] como ejemplo de KPP, los resultados individuales se pueden combinar para obtener estimaciones a nivel de sistema. Hay excepciones observadas a este enfoque. En algunos casos, los plazos de los procesos acoplados se superponen lo suficiente como para justificar el desarrollo de modelos integrados. Un caso particular involucra el viento, la dinámica estructural de telescopios y la dinámica de control. En el caso de los ELT, esto se investiga exhaustivamente, incluido el golpe del viento en el espejo primario y la estrecha interacción entre el control y la estructura. De manera similar, la fluctuación de la imagen debida a las vibraciones del telescopio se aborda directamente en las simulaciones de óptica adaptativa. En períodos de tiempo más largos, los procesos sólidos (vidrio y acero) y aerotérmicos están estrechamente relacionados. Abordar este acoplamiento requiere iteraciones entre los modelos CFD y FEA o el desarrollo de modelos conjugados de transferencia de calor de alta resolución.

La esencia del marco de desempeño se muestra en la Figura 2. El grupo A (rojo) denota los insumos disponibles. El grupo B (azul) es el que se puede controlar por diseño y operación. El grupo C (marrón) muestra la salida del marco de modelado integrado desarrollado con las aberraciones precalculadas en forma LUT (la caja de óptica/controles/dinámica/CFD/FEA es en realidad el marco de modelado integrado). Finalmente, las funciones del Grupo D (verde) corresponden al procesamiento matemático/estadístico y, de hecho, son el núcleo de la simulación en el dominio del tiempo.

Machine Translated by Google

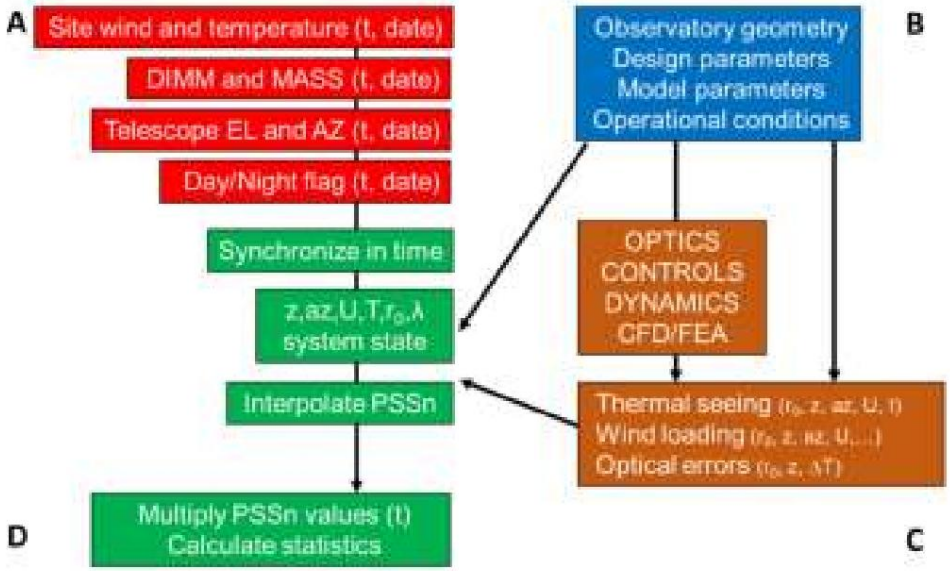


Figura 2. Diagrama de flujo del marco estocástico. (A) entradas ambientales, (B) parámetros controlados, (C) salidas de modelado integrado, (D) fusión de datos y estadísticas.

Las ventajas de este marco se resumen a continuación:

• Permite la representación estadística de errores aleatorios según las condiciones ambientales y operativas; • Permite la representación estadística de errores que dependen de estados temporales anteriores. del sistema;
• Permite la representación combinada de errores que están correlacionados y no pueden evaluarse de forma independiente; • Permite la representación combinada de errores que exhiben escalas temporales y espaciales dispares;
• Proporciona distribuciones de probabilidad de errores para indicar el rango de desempeño esperado bajo diversas condiciones de visión, conocimiento particularmente útil para la observación en cola;
• Permite la investigación del comportamiento del observatorio en diferentes sitios candidatos;
• Permite optimizar ciertas estrategias operativas, como ventilación, horario diurno. tratamiento térmico y frecuencia de medición de calibración;
• Revela el verdadero impacto de una decisión de diseño particular en el desempeño esperado del observatorio y la productividad científica posterior, permitiendo compensaciones rentables.

3. Sinergia de modelado aerotérmico La

gestión térmica es clave para controlar la calidad de la imagen del observatorio. Como herramientas para minimizar los efectos térmicos, los ELT utilizan aire acondicionado durante el día y ventilación pasiva y control de la liberación de calor en diversas formas (enfriamiento del subsistema, ubicación adecuada de las fuentes de calor, revestimientos de emisividad deseada) durante la noche. La emisividad y reflectividad de la superficie del gabinete están optimizadas para reducir el sobrecalentamiento durante el día y el sobreenfriamiento durante la noche.

Es prudente minimizar la diferencia entre la temperatura del telescopio (estructura y óptica) y la temperatura media esperada durante la noche. Especialmente para la óptica, dada su constante de tiempo, esto es importante tanto para mitigar la deformación térmica como para ver el espejo. Además, se minimizarán los gradientes espaciales de temperatura, ya que contribuyen en gran medida a la desalineación del telescopio.

Al amanecer, el recinto se cerrará y el aire atrapado en el interior comenzará a calentarse debido a la liberación de calor diurna de los equipos que operan dentro del recinto, la radiación solar y la infiltración de aire exterior. Las unidades de tratamiento de aire (UTA) están conectadas a enfriadores/enfriadores secos en el área de instalaciones. Las boquillas de la AHU suministran aire al interior del recinto en varios lugares, mientras que los retornos se encuentran cerca del piso de observación. El objetivo es minimizar los gradientes verticales de temperatura al menos hasta la altura del telescopio y mantener

Machine Translated by Google

ambiente a la temperatura nocturna esperada eliminando todo el calor generado internamente y el calor impuesto externamente.

Por la noche, la pérdida de radiación hacia el cielo a través de la abertura del recinto se equilibra mediante la transferencia de calor por convección a través de la abertura y las rejillas de ventilación del recinto, así como el calor liberado al aire interior. La distribución espacial no uniforme del calor liberado puede ser particularmente perjudicial para la visión de la cúpula y los espejos. Su efecto se mitiga enjuagando el recinto con aire ambiente a través de las rejillas de ventilación. Sin embargo, a velocidades de viento más altas, es necesario restringir el lavado de la carcasa para limitar el impacto del viento en la estructura del telescopio y los espejos. La estrategia de ventilación está optimizada para equilibrar los efectos de la visión térmica y el viento. Como punto de referencia, se espera que las rejillas de ventilación del recinto estén completamente abiertas a bajas velocidades del viento externo, completamente cerradas a altas velocidades del viento externo y parcialmente abiertas a velocidades medias del viento externo.

El calor residual eliminado del observatorio se concentra en columnas de escape que salen del punto más alejado del edificio de la instalación, que se encuentra predominantemente en la dirección del viento desde el telescopio. Durante la noche, la desviación máxima de temperatura de la columna con respecto a la ambiental se restringe para garantizar que cualquier efecto sobre la visión en esta dirección sea insignificante.

Los modelos utilizados para simular los procesos físicos anteriores se agrupan en tres categorías principales según el alcance, la fidelidad geométrica y el tiempo de respuesta: • Modelos de redes térmicas; • Modelos CFD; • Modelos conjugados de transferencia de calor.

Para desarrollar las herramientas de modelado se emplean conjuntos de software comerciales de uso general conocidos y disponibles en el mercado . STAR-CCM+ (2210 o posterior) [13] se emplea para desarrollar modelos tridimensionales representativos de observatorios y subsistemas, mientras que los modelos de redes térmicas unidimensionales, marcos de rendimiento y posprocesadores se desarrollan principalmente en MATLAB (2020a o posterior).) [14] y Python (3.7 o posterior).

3.1. Modelos de redes térmicas

Estos son modelos térmicos transitorios unidimensionales o de masa concentrada. Son computacionalmente económicos y con tiempos de respuesta cortos. Su objetivo principal es estimar las temperaturas de las superficies, por ejemplo del revestimiento del recinto, así como de otros componentes.
Estas temperaturas se utilizan para respaldar el diseño, validar los requisitos y como condiciones límite para los modelos de alta fidelidad. Dado que son modelos de redes térmicas, pueden aceptar aire como otro nodo, por lo que también pueden informar el comportamiento de la temperatura media de un volumen de aire confinado. La verdadera utilidad de estos modelos radica en el hecho de que las condiciones de entrada ambientales y operativas junto con el tiempo de simulación virtual abarcan años, lo que permite el análisis estadístico de los diferenciales de temperatura.

3.2. Modelos computacionales de dinámica de fluidos

Se trata de modelos tridimensionales, estacionarios o transitorios, de alta fidelidad. Son computacionalmente costosos y tienen largos tiempos de respuesta. Como sugiere el nombre, su propósito es estimar el comportamiento de la velocidad, temperatura y presión del fluido (aire) en el espacio y el tiempo, en los sitios ELT, alrededor y dentro de los recintos, y dentro de los componentes.

Las simulaciones constantes sobre la topografía proporcionan estimaciones de la capa del suelo (GL) para estudios de caracterización del sitio. Las simulaciones inestables durante el día dentro del recinto proporcionan rendimiento HVAC. Finalmente, las simulaciones nocturnas inestables proporcionan el rendimiento de los observatorios aerotérmicos, mediante la visualización de cúpulas y la carga de viento del telescopio. Los tiempos de simulación para este último son del orden de minutos.

3.3. Modelos de transferencia de calor sólidos y conjugados

Estos son modelos transitorios tridimensionales. En general, son computacionalmente económicos y con tiempos de respuesta cortos, con algunas excepciones. Su propósito no es sólo estimar el comportamiento de la inercia térmica de los componentes en el tiempo sino también la variabilidad espacial de la temperatura y la deformación resultante. En los casos en que el efecto de un componente sobre

Machine Translated by Google

Si se necesita un volumen de aire confinado o la variabilidad de la transferencia de calor por convección es importante, se desarrollan modelos de interacción sólido/fluido (conjugados). El tiempo de simulación para estos modelos es normalmente de unos pocos ciclos diurnos.

3.4. Herramientas de

posprocesamiento También existe una serie de herramientas de posprocesamiento para manejar las diversas salidas intermedias y proporcionar resultados en el formato variable final. Algunos están incorporados en los archivos de simulación del software y otros son independientes.

La Figura 3 muestra la sinergia típica actual de modelado aerotérmico ELT. El conjunto consta de un conjunto de modelos de red térmica, CFD y transferencia de calor conjugada. También incorpora un modelo estructural especial que ha sido desarrollado sólo para deformaciones térmicas.
El propósito de estos modelos no es sólo proporcionar resultados específicos para las estimaciones del coeficiente intelectual, sino también complementarse y apoyarse entre sí. El azul corresponde a los modelos CFD de alta fidelidad, el oro a los modelos conjugados de transferencia de calor, red térmica y deformación térmica, el verde son herramientas IQ que pertenecen al marco IM y el amarillo son las variables de entrada/ salida. Los modelos CFD proporcionan coeficientes de transferencia de calor a los modelos térmicos sólidos de Análisis de Elementos Finitos (FEA) de la estructura del espejo y del telescopio, que a su vez proporcionan temperatura y flujos de calor a los modelos CFD como condiciones límite para el telescopio y las superficies ópticas. Los modelos térmicos de red proporcionan flujos de calor a los modelos CFD para las superficies del gabinete y otros componentes. También pueden proporcionar a los modelos FEA las propiedades de radiación correctas. Finalmente, pueden proporcionar información cualitativa rápida sobre estrategias óptimas de control térmico diurno para minimizar las simulaciones CFD diurnas computacionalmente intensivas. Los coeficientes de transferencia de calor por convección necesarios para la red térmica y los modelos FEA se obtienen mediante simulaciones CFD.

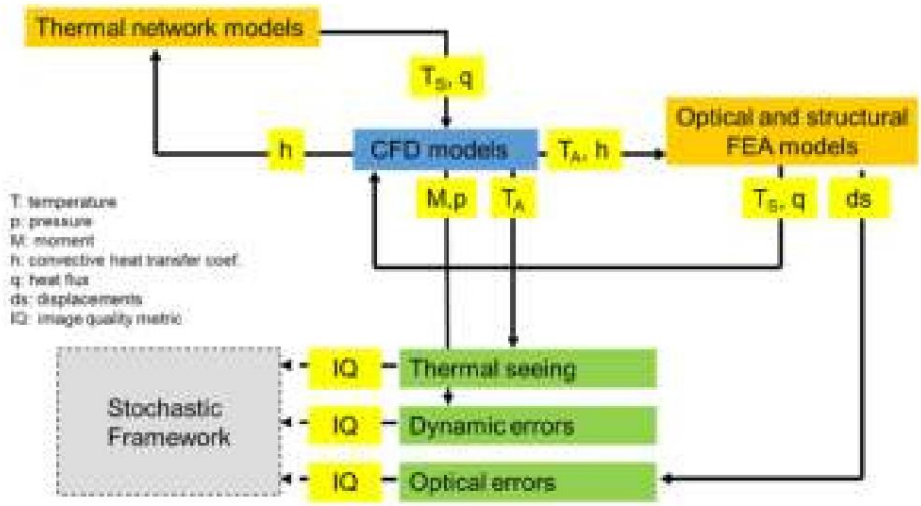


Figura 3. Diagrama de flujo de información del modelado aerotérmico.

El conjunto de modelos aerotérmicos puede proporcionar una amplia gama de resultados para validar y/o verificar los requisitos de diseño del subsistema. Las simulaciones térmicas CFD producen campos de fuerza/ momento y temperatura utilizados, respectivamente, por los bloques de visión dinámica y térmica, mientras que las simulaciones térmicas FEA producen desplazamientos utilizados directamente por el bloque óptico. Por lo tanto, puede producir estimaciones de términos de presupuesto de errores relacionados con la aerotermia del subsistema y presupuestos de desempeño a nivel de sistema.

Las entradas disponibles, los parámetros que pueden controlarse mediante diseño y operación y las aberraciones precalculadas de los bloques IM en forma de matriz multidimensional (tabla de búsqueda, LUT) se combinan dentro del marco estocástico para definir el estado del sistema en el tiempo. Finalmente, las funciones correspondientes al procesamiento matemático/estadístico producen parámetros de rendimiento a nivel de sistema, como el PSSn.

Machine Translated by Google

3.5. Procesamiento de consultas a nivel de subsistema

Los equipos de ELT IM cuentan con un plan interno para el desarrollo de modelos de aerotermia. La programación está vinculada a revisiones a nivel de sistema, mientras que los modelos específicos se priorizan de acuerdo con la importancia correspondiente del término del presupuesto de error. La necesidad de estimaciones iniciales de la visibilidad local y de la carga del viento del telescopio dictaminó que el primer modelo a desarrollar y el primer diseño de subsistema a soportar y optimizar debería ser el recinto. En su interior se colocaría un telescopio a nivel de diseño conceptual . Las condiciones de contorno térmico provendrían de un modelo de red térmica inicial que considerara grandes áreas de superficie que afectan directamente la ruta óptica. El resto de fuentes de calor procederían de las correspondientes necesidades térmicas. Esto constituyó el modelo CFD del observatorio. Tenga en cuenta aquí que existe una versión diurna y nocturna de este modelo. El modelo se actualizaría anualmente con una fidelidad geométrica cada vez mayor. Se desarrollarían modelos de subsistemas para aumentar la fidelidad de las condiciones límite térmicas para el modelo del observatorio, aumentando así la precisión de la estimación del rendimiento, o para respaldar las revisiones de los subsistemas, a medida que Este último proceso genera lo que aquí se denomina consulta aerotérmica del subsistema.

El equipo del subsistema se comunica con el equipo de mensajería instantánea con una consulta (Figura 4). Las consultas típicas pueden ser estudios de diseño (consideraciones geométricas, selección de equipos, caudal y opciones de disipación de calor), datos de entrada para análisis de supervivencia y el impacto en el rendimiento de opciones de diseño irreversibles. A menudo, estos pueden ser elementos de acción de revisión. Se lleva a cabo una reunión o una serie de reuniones entre los equipos para rastrear los requisitos del subsistema directamente involucrados (Nivel 4) y los requisitos de rendimiento correspondientes (normalmente Nivel 3). Esto es importante para definir el alcance de la acción esperada por el equipo de IM: qué modelos se requieren, con qué resultados y cuándo. Una vez definido el alcance, se pueden identificar todos los requisitos previos y estimar los recursos necesarios.

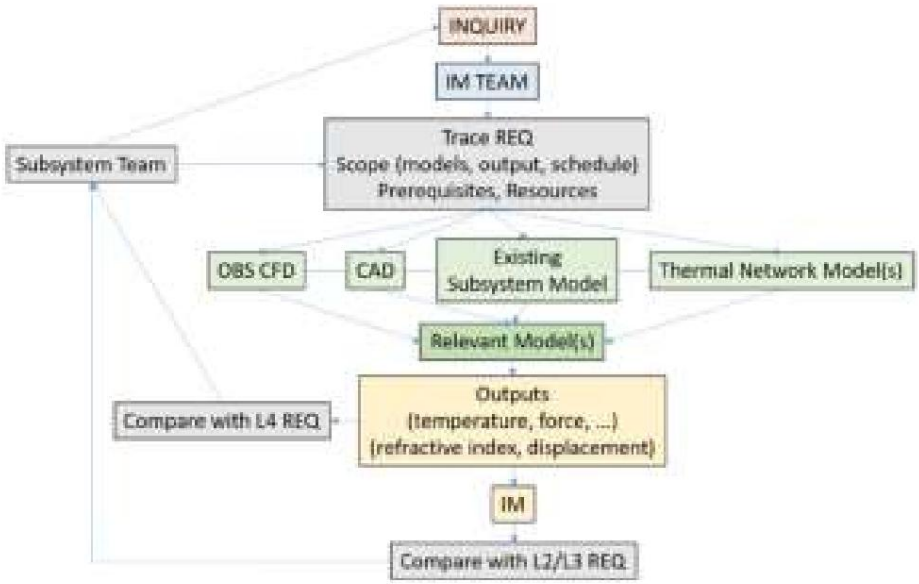


Figura 4. Proceso representativo de validación de requisitos aerotérmicos de ELT.

Los requisitos previos incluyen entradas genéricas (velocidad del viento, orientación del telescopio, potencia de los componentes/tasas de flujo, etc.), un modelo de subsistema existente, que debe usarse con diferentes entradas, un modelo CAD para una nueva geometría o para actualizar una representación de modelo existente, información térmica . modelos de red para cálculos de temperatura adicionales y presupuestos de disipación de calor a nivel de sistema o subsistema. Tenga en cuenta que la inmensa mayoría de las solicitudes hasta la fecha requieren información proporcionada por el modelo CFD del observatorio.

A menudo, la urgencia o la escala de tiempo asociada con la investigación no son compatibles con los recursos estimados, lo que lleva a un ejercicio de determinación del alcance (cantidad mínima de esfuerzo para producir respuestas aceptables).

Machine Translated by Google

Una vez que se han identificado todos los modelos y entradas relevantes, se realizan las simulaciones y se recopilan los resultados. Es posible que se requiera o no un modelado integrado según el nivel de requisitos que se van a validar (o verificar). Es común que la primera ronda de resultados genere consultas y modificaciones adicionales, junto con el posible desarrollo de nuevos modelos.

En las siguientes secciones se visitarán con más detalle los distintos tipos y aplicaciones principales de los modelos aerotérmicos. Para cerrar esta sección, en la Tabla 1 se presenta un resumen del impacto que tuvo el modelado aerotérmico en el diseño del ELT , principalmente en orden cronológico (dependiendo también de la madurez del diseño del subsistema). El resumen no es exhaus La mayoría de los modelos se actualizan periódicamente y su fidelidad aumenta como resultado de la madurez del diseño y las lecciones aprendidas de modelado. Además, ha habido varias instancias de CBE de rendimiento general antes del desarrollo de muchos de estos modelos. Tenga en cuenta, sin embargo, que no todos los observatorios siguieron estrictamente ese orden, especialmente en las etapas de diseño y selección del sitio y el recinto.

Tabla 1. Impacto del modelado aerotérmico en los ELT.

Aspecto de desarrollo ELT	Modelado Acción	Función de Ingeniería de Sistemas
Selección del sitio	Modelado GL. Comparación con mediciones del sitio.	Estudios de compensación. Mitigación de riesgos (validación de modelos).
Desarrollo del sitio	Modelado GL: minimizar el impacto en la calidad del sitio, seleccionar una ubicación específica dentro del sitio e investigar las interacciones con los observatorios existentes cuando corresponda. Comparación con mediciones del sitio.	Estudios de compensación. Mitigación de riesgos (validación de modelos).
Cerramiento e instalaciones	Modelado del observatorio: selección del tipo de recinto, optimización de la forma aerodinámica, cargas de viento de supervivencia, área, ubicación y número de ventilación, tamaño y rendimiento de la refrigeración, control térmico de los variadores, equipos de servicios públicos y espacios intersticiales, temperaturas de la superficie/emisividad de la pintura y espesor del aislamiento.	Estudios de compensación. Validación de requisitos.
Soporte para telescopio (estructura)	Modelado térmico de sólidos: deformación térmica, orientación del telescopio, temperatura de la superficie/emisividad de la pintura y tabla de consulta de ubicación/ alineación del sensor de temperatura. Modelado del observatorio: optimización aerodinámica del extremo superior y estructura de soporte secundaria.	Validación de requisitos. Estudios de compensación.
Conjuntos ópticos	Modelado de transferencia de calor conjugado: temperaturas de superficie y componentes, error de frente de onda de deformación, control térmico y efectos en sensores de metrología.	Validación de requisitos.
Instrumentos y guía láser. Sistemas estelares	Modelado de transferencia de calor conjugado: temperaturas de superficie y componentes, errores de enfoque, turbulencia de la trayectoria óptica interna y optimización del diseño.	Validación de requisitos. Estudios de compensación.
Rendimiento CBE	Modelado de observatorios: visión térmica/efectos en metrología, carga del viento en la estructura y la óptica, deformación térmica de la estructura y la óptica y apuntamiento de telescopios. Modelado de observatorios existentes para estudios de comparación y resolución de malla (para múltiples modelos).	Verificación de requisitos. Mitigación de riesgos (validación de modelos).
AIVC/operaciones	Modelización del observatorio: ambiente aerotérmico durante la construcción, gradientes térmicos internos en ausencia de aire acondicionado, perfiles de viento externos y efectos en la metrología. Modelado de orden reducido (ROM) y modelado de redes neuronales artificiales (ANN) para la caracterización de la primera luz y optimización de operaciones/observación de colas.	Validación de requisitos. Verificación de requisitos.

Machine Translated by Google

4. Modelado de redes térmicas

El marco estocástico es la base para que cualquier modelo de red térmica cubra estadísticamente una amplia gama de condiciones ambientales. Aunque la principal variable de interés es la temperatura ambiente, la variabilidad del viento y de la orientación del telescopio proporcionan la diversidad necesaria en los coeficientes de transferencia de calor por convección y los factores de visión radiativa para las superficies externas e internas del recinto, así como para los componentes del telescopio. Los registros ambientales diurnos son entradas vitales para cualquier modelo de red térmica, ya que debido a la inercia térmica, el comportamiento de los componentes exhibe "memoria"; su estado térmico actual depende de estados térmicos anteriores.

La versión heredada de este marco incorporó un modelo térmico de masa concentrada para el espejo primario TIO, ya que la visión del espejo podría calcularse utilizando una relación semiempírica [15]. Desde entonces se ha descubierto que esta relación no es válida para espejos gigantes y todos los patrones de flujo dentro de recintos ELT y ya no se utiliza.

Desde entonces, el marco se ha combinado con varios modelos de redes térmicas, que se presentarán a continuación. Los parámetros de salida de este marco que se utilizan como entradas para otros modelos o con fines de diseño (rangos operativos) incluyen lo siguiente: • Deriva de la temperatura ambiente desde la última alineación del telescopio, utilizada por el telescopio/espejo modelos de deformación térmica;

• Diferencial de temperatura entre el amanecer y un momento particular de la noche o la media de la noche, utilizado para dimensionar el gabinete AHU y determinar la temperatura del suministro; • Diferencial de temperatura entre la temperatura ambiente exterior e interior durante el día, utilizando los resultados del modelo de aire acondicionado, utilizado en combinación con la velocidad del viento exterior para determinar la carga de infiltración del recinto.

4.1. Recinto

Las condiciones límite térmicas adecuadas en las superficies del gabinete son importantes para capturar correctamente el campo de temperatura dentro de la ruta óptica. En lugares donde la velocidad del viento es baja, dominan la difusión y la flotabilidad, y los gradientes de temperatura en las superficies se transforman en penachos que afectan la trayectoria óptica. Además, a medida que el viento se mueve sobre el área alrededor de la abertura del recinto, la temperatura de la superficie exterior introduce un gradiente que luego pasa a través del camino óptico. Para estimar el flujo de calor correcto en las superficies del recinto, se implementó un modelo que puede tener en cuenta el movimiento constante de los componentes del recinto, la conducción, la convección y, lo más importante, la radiación . Incorpora nodos para la piel del cerramiento, aislamiento, estructura del cerramiento y aire interior. También puede proporcionar información sobre gradientes temporales de temperatura para el aire del espacio intersticial, el suelo de observación e incluso la estructura general del telescopio. Puede estimar los límites de disipación de calor para componentes específicos. Finalmente, puede estimar el requerimiento de potencia de aire acondicionado durante el día debido a la radiación solar, la infiltración y las fuer

En 2011 se presentó por primera vez una versión 3D completa de este modelo para TIO, y la versión actual se incluye en [16]. El equivalente GMT se puede encontrar en [17].

El impacto es el siguiente: • Proporciona funciones de distribución acumulativa de temperaturas y flujos de los componentes: revestimiento exterior, estructura del recinto, aislamiento interior, piso de observación, aire interior del recinto y aire del espacio intersticial; • Validación de requisitos: pintura exterior y emisividad del aislamiento; • Proporciona la temperatura máxima esperada en el espacio intersticial; • Proporciona estadísticas de disipación de calor a través del aislamiento y el piso del observatorio; • Proporciona condiciones de contorno de entrada para simulaciones CFD del rendimiento de los observatorios.

4.2. Óptica

Aunque también existen modelos térmicos sólidos 3D para ciertos componentes ópticos, a menudo es útil desarrollar homólogos rápidos de masa concentrada (ej. [18]). El objetivo principal de estos modelos es la verificación de requisitos de la disipación residual permitida después del enfriamiento (si se re-

Machine Translated by Google

requerido) junto con la representación estadística del cumplimiento de un requisito de temperatura de la superficie (normalmente para fines de visualización térmica).

El impacto es el siguiente: •

Proporciona una diferencia de temperatura del vidrio con respecto a la ambiental en diversos entornos.
condiciones mentales;

• Validación/modificación de especificaciones térmicas para espejos primarios y secundarios.
sistemas de r.

5. Modelado CFD de sitios astronómicos

5.1. Selección del sitio

Muy temprano, en 2002, comenzó una campaña para identificar posibles sitios para la próxima generación de observatorios estadounidenses. Una parte integral de esta campaña fue el uso de simulaciones CFD para validación, caracterización de sitios y preselección, ya que no se pudieron implementar equipos en todos los sitios candidatos.

Fue necesario obtener y procesar mapas de elevación digitales (DEM) de sitios de interés para generar dominios y mallas computacionales. Los DEM cubrieron sitios de observatorios existentes, como Maunakea (Hawái, EE. UU.), Las Campanas (Chile), Paranal/Armazones (Chile), Tololo/Pachón (Chile), San Pedro Mártir (península de Baja, México) y La Palma (Islas Canarias, España), y algunas nuevas en el desierto de Atacama en Chile (Negro, Honar, Chajnantor, Tolonchar, Quimal) e incluso en la Antártida (Domo C).

Aunque las simulaciones fueron inicialmente isotérmicas y de estado estacionario, centrándose en la turbulencia mecánica inducida topográficamente [19,20], el alcance final incluyó la resolución y caracterización de la GL (turbulencia óptica), que es más complicada de medir experimentalmente. En 2007, también se habían logrado avances significativos en este frente, incluidos los esfuerzos iniciales de validación del modelo [21-24]. Se utilizó una dependencia funcional de la disipación turbulenta térmica εT y mecánica εM para estimar el parámetro de función estructural del índice de refracción, Cn 2~A εT εM −1/3, a partir de simulaciones de estado estacionario, mientras que la teoría de dispersión débil se usó durante el procesamiento de campos inestables. . Las simulaciones CFD produjeron energía cinética turbulenta y tasas de disipación que posteriormente se utilizaron para calcular las escalas de longitud de las turbulencias.

Las entradas requeridas incluyen lo siguiente:

• Condiciones de viento y temperatura en ceñida, que, junto con la temperatura de la topografía, dan como resultado un perfil GL realista entre 7 my 400 m del suelo. Las únicas variables son la velocidad y dirección del viento. Se eligió la temperatura del suelo para que fuera una cantidad calculada en lugar de una entrada, ya sea imponiendo el flujo de calor neto esperado o invocando un modelo de radiación térmica gris con una emisividad de 0,8 y una temperatura del cielo efectiva apropiada . La ubicación de referencia fue la del sistema de seguimiento del sitio correspondiente. • Presión de referencia única, que refleja la altitud promedio del sitio. Se utilizó una función definida por el usuario para el perfil vertical de densidad correspondiente, lo que resultó en la densidad de referencia esperada a la altitud promedio del sitio.

El impacto es el siguiente: •

Selección del sitio ELT candidato principal; •

Reducción de riesgos: validación del modelo GL (comparación con mediciones cuando estén disponibles); • Con los datos de

entrada adecuados, los perfiles GL modelados son realistas, mientras que las incertidumbres de medición y modelado de la turbulencia óptica resultaron comparables, lo que convierte el uso del modelado térmico en una alternativa económica y flexible a los experimentos y, en algunos casos, en la única opción.

5.2. Capa de Tierra

5.2.1. Maunakea, 13N

El sitio 13N en Maunakea (HI, EE. UU.) es el sitio seleccionado para la TIO. Para ello se obtuvo un DEM de Maunakea de 20 × 13 km2 con una resolución de 10 m. El límite topográfico

Machine Translated by Google

del dominio computacional está centrado en las coordenadas UTM-5Q [X, Y] de [241000, 2192500]. Debido a las suaves pendientes, se eligió que la altura del dominio computacional fuera de 8000 m para simulaciones a escala real y de 5000 m para simulaciones confinadas a 3,5 × 3,0 km2 .

Durante la campaña de selección del sitio TIO, se recopilaron registros temporales de velocidad, dirección y temperatura del viento sobre el sitio, junto con datos ópticos de turbulencia. Con base en esto y en el hecho de que 13N está en el lado norte, debajo de la cumbre, se realizaron simulaciones de estado estacionario para tres direcciones del viento (E, SE, W) con velocidades de viento medianas [25].

5.2.2. Las Campanas El

Pico Las Campanas (Chile) es el sitio seleccionado para el GMT. Para ello, se fusionó un DEM de 22 × 24 km2 con una resolución de 20 m con un DEM de alta resolución de 2 × 2 km2 (5 m) de la cumbre . El límite topográfico del dominio computacional está centrado en Las Campanas, con coordenadas UTM-19J [X, Y] de [336216, 6785453]. Se eligió que la altura del dominio computacional fuera de 5000 m.

Desde la estación de monitoreo ambiental de doble torre se recolectaron registros temporales de velocidad, dirección y temperatura del viento, junto con valores de escala interna turbulenta y C_n^2 . Se realizaron simulaciones CFD tanto estacionarias como inestables para las condiciones predominantes del sitio, vientos medianos del NNE. Se desarrolló un procedimiento para minimizar la incertidumbre de las condiciones de contorno topográficas [26].

5.2.3. La Palma, ORM El

Observatorio del Roque de Los Muchachos (ORM) en la isla canaria de La Palma (España) ha sido seleccionado como sitio alternativo para el TIO. Era necesario investigar varios lugares potenciales en la cumbre en términos de fuerza GL. Además, la presencia de observatorios existentes requería un estudio de la interacción entre estos observatorios y la TIO.

La falta de pruebas localizadas en el sitio y la naturaleza del terreno llevaron al uso de simulaciones CFD combinadas con un modelo visual para estimaciones de turbulencia óptica GL en 2016 [27].

La ubicación del ORM en la isla de La Palma, en combinación con un terreno accidentado y la falta de disponibilidad de perfiles de entrada realistas cerca de la cumbre, dictó un gran dominio computacional que puede abarcar casi toda la isla con una zona de amortiguamiento adicional al nivel del mar para desarrollo realista de GL. En los límites de dicho dominio, los perfiles de velocidad y temperatura se conocen con mayor certeza. A tal efecto, se fusionó un DEM de 40 × 40 km2 de la isla con una resolución de 50 m con un DEM de alta resolución de 4 × 3 km2 (10 m) de la cumbre del ORM. El límite topográfico del dominio computacional está centrado en el ORM, con coordenadas UTM-28R [X, Y] de [217900, 3185029]. Se eligió que la altura del dominio computacional fuera de 7500 m.

Se realizaron simulaciones en estado estacionario para cuatro direcciones diferentes del viento (NE, N, W, SW). Se realizaron dos estudios separados. El primero se centró en la comparación GL entre los cuatro sitios candidatos. Luego, para el sitio preferido con base en los resultados y para dos de estas direcciones del viento, también se consideró la presencia de observatorios cercanos como el GTC y el TNG, para determinar interferencias mutuas que podrían afectar el GL local [27]. En [28] se proporciona un informe más detallado sobre la variabilidad de ORM GL .

El impacto adicional es el siguiente:

- Selección de ubicación del sitio TIO candidato alternativo;
- Evaluación de la interacción entre el TIO y los observatorios existentes, requerida por el Instituto de Astrofísica de Canarias.

6. Modelado CFD del Observatorio

Se han desarrollado modelos CFD de fidelidad adecuados para los observatorios a partir de modelos CAD 3D de la montura y la carcasa del telescopio. Se utilizan para simular y analizar el entorno aerotérmico alrededor de los observatorios. Los modelos de elementos multimillonarios desarrollados representan los principales componentes del observatorio, como los conjuntos primario (M1) y secundario (M2), la armadura de soporte secundaria, otros subcomponentes de la montura del telescopio y el recinto junto con los edificios auxiliares.) en las cumbres.

Machine Translated by Google

Cuando se concibió la idea de un ELT, la objeción inmediata que surgió fue que el viento excesivo haría que el proyecto fuera inviable. El telescopio quedaría demasiado expuesto y no sería lo suficientemente rígido para funcionar dentro de las especificaciones deseadas. Fueron necesarios años de estudios exhaustivos para resolver el problema [29-32]. Mediciones de presión y velocidad del viento dentro de la cúpula del Gemini South, aún en construcción, estudios en túnel de viento de formas genéricas de ELT en Caltech, en el Instituto NRC de Investigación Aeroespacial en Canadá y en Europa, y simulaciones CFD y modelado integrado del La estructura, los controles y la óptica finalmente sugirieron que un ELT, que incorporara las estrategias adecuadas de mitigación de la carga del viento, no sería una causa inútil [33]. Armados con confianza adicional, se realizaron estudios heredados para converger hacia configuraciones de cerramiento aceptables mediante la simulación de diseños convencionales de contraventanas de domo, carrusel y Calotte y múltiples configuraciones de ventilación y mitigación del viento, así como opciones de construcción de instalaciones y c
Las mismas técnicas desarrolladas para TIO y GMT también se emplearon para optimizar el diseño del Observatorio Vera Rubin (Gran Telescopio de Rastreo Sinóptico en ese momento).
Las simulaciones CFD literalmente dieron forma a la arquitectura, el cerramiento, los deflectores de luz y los requisitos de las cámaras del edificio de las instalaciones [34–38].

Al otro lado del Atlántico, el E-ELT también ha realizado algunas simulaciones nocturnas a escala de observatorio, pero no están directamente relacionadas con el rendimiento óptico, sino que se centran en los niveles de velocidad alrededor del telescopio y las condiciones de supervivencia [39].

Se pueden encontrar informes detallados de la configuración de la simulación en [40,41]. Se necesitan actualizaciones/ modificaciones frecuentes debido a la evolución del diseño y las lecciones aprendidas de estudios, como los reportados en [28,42–45]. Los más importantes se resumen a continuación: • Las geometrías se actualizan para reflejar los últimos diseños y una mayor fidelidad. • Los presupuestos de disipación de calor se actualizan de manera similar y se establecen límites adicionales.
creado para dar cabida a las fuentes de calor resueltas.
• Se consideran los avances en metodologías de mallado, desarrollo de solucionadores y potencia computacional tanto para la configuración de la simulación como para el posprocesamiento de la salida. • Se han revisado las entradas del dominio de barlovento para reflejar condiciones GL más realistas. • Los modelos conservan el movimiento relativo entre las piezas teseladas y los correspondientes sistemas de coordenadas locales para soportarlo. De esta manera, las condiciones de contorno solo se pueden aplicar una vez y las plantillas del modelo se pueden usar para múltiples orientaciones y velocidades del viento. Sin embargo, para el mallado de volumen, las piezas se combinan para minimizar los errores numéricos generados en las interfaces de volumen, a las que el cálculo de PSSn de visión térmica es muy sensible. El procedimiento aún se puede automatizar mediante secuencias de com

6.1. Diurno (Aire Acondicionado)

Se informaron simulaciones de CFD diurnas en [16,46] entre 2010 y 2024 para el TIO y en [47] para el GMT. Las simulaciones realizadas se seleccionaron para demostrar que el sistema de calefacción, ventilación y refrigeración (HVAC) del recinto puede funcionar como se esperaba al menos el 90 % del tiempo. Esto se basa en el balance de calor diurno esperado y la variación de temperatura entre la temperatura del amanecer y la temperatura objetivo. La geometría corresponde a un telescopio estacionario y un recinto en sus posiciones nominales de estacionamiento.

El impacto es el siguiente: • Registros horarios de las temperaturas del aire del recinto a varias alturas desde el piso del observatorio y perfiles verticales de temperatura en momentos específicos durante el día; • Validación/ verificación del diseño de HVAC (capacidad de caudal máximo, división entre suministro primario y tasas de recirculación, ubicación de las boquillas, estrategia operativa); • Temperatura óptima de la boquilla HVAC en función de la temperatura objetivo para cumplir requisitos de desempeño;
• Proporciona coeficientes de transferencia de calor para cálculos de convección a modelos térmicos de componentes.

6.2. Noche

Los LUT de rendimiento aerotérmico actuales consisten en resultados para 3 ángulos cenital del telescopio diferentes (0◦ , 30◦ 90◦ , 60◦–65◦), 5 ángulos de azimut relativos al viento del telescopio (0◦ , 45◦ , ,

Machine Translated by Google

135°, 180°), 5 a 6 velocidades del viento (2 a 3 para respiraderos abiertos, 2 a 3 para cerrados) y hasta 3 conjuntos diferentes de condiciones de contorno térmico, correspondientes a diferentes partes de la noche (nominalmente ~1 h después del atardecer, media noche y con salida del sol). Un uso eficaz del modelo implica colocar la malla en una orientación particular y luego ejecutar una simulación variando la velocidad del viento de entrada entre cero y algún umbral con respiraderos abiertos. La transición de respiraderos abiertos a cerrados se produce para una velocidad del viento de entrada de ~5 a 7 m/s. Luego, se realiza una simulación separada correspondiente a velocidades del viento de hasta 17–18 m/s con respiraderos cerrados para esa orientación. De esta manera se cubre la mayor parte del rango de velocidad del viento de rendimie
La función de velocidad del viento de entrada se define de modo que se dedique suficiente tiempo a las velocidades del viento de referencia del LUT para eliminar los efectos transitorios y acumular suficiente tiempo para las estadísticas. Esto es particularmente importante para ver el domo debido a las escalas de tiempo más largas asociadas con la difusión de las condiciones de contorno térmicas al aire interior del recinto. Aunque este enfoque se ha utilizado para estimar el rendimiento aerotérmico de TIO en el pasado [45], se discutirá una alternativa en una sección posterior.

Las entradas adicionales requeridas son las siguientes:

• Condiciones de contorno térmicas actuales en las superficies de los observatorios. Los valores se agrupan en tres categorías: estándar (como adiabático, simetría, etc.), estimado y asumido . Los valores estimados son el resultado del modelado. Los valores supuestos son para componentes que tienen temperatura controlada y tienen una especificación de requisitos o no tienen información suficiente para un modelado térmico preciso. Muy pocos límites entran en esta categoría ya que al menos un modelo de red térmica puede proporcionar alguna estimación para la mayoría de los componentes. Para muchos subsistemas, ya existen modelos conjugados de transferencia de calor que proporcionan temperaturas superficiales. Estos incluyen conjuntos ópticos, instalaciones de óptica adaptativa y algunos instrumentos de “primera luz”, con un diseño suficiente
La mayoría de las condiciones límite se aplican como diferencias de temperatura con respecto a la temperatura ambiente de referencia. En algunos casos, se supone el equilibrio entre convección y radiación, ignorando la conducción. Corresponden principalmente a componentes de baja inercia térmica, como son la estructura de soporte y extremo superior del conjunto del espejo secundario, el exterior del edificio de cerramientos e instalaciones y los revestimientos superficiales interiores. Los modelos correspondientes proporcionan temperaturas de inercia térmica más elevadas , como por ejemplo los componentes de hormigón de la carcasa y la estructura inferior telescópica. Tenga en cuenta que la implementación adecuada de las condiciones de contorno requiere en última instancia el conocimiento del equilibrio térmico del observatorio [48].

Las salidas incluyen lo siguiente: • Campos de

temperatura tridimensionales dentro del volumen óptico desde el vértice M1 hasta el final de la capa límite del recinto a una velocidad de muestreo temporal especificada. Estos se utilizan como entradas en el postprocesador de visión térmica [49,50]. Por lo tanto, un subproducto de estas simulaciones es también un registro de tiempo de los mapas de diferencia de trayectoria óptica (OPD). Para obtener una descripción histórica de los primeros modelos de visión térmica, el lector puede consultar [51,52]. • Registros temporales de mapas de presión sobre

superficies ópticas. Estos se utilizan como entradas para el cálculo del desenfoque de la imagen inducido por el viento [53,54]. Los mapas de presión también están disponibles a pedido para cualquier otro componente resuelto. • Registros de tiempo de los componentes de

momento alrededor del sistema de coordenadas del telescopio que se originan a partir de las fuerzas del viento en todo el telescopio. Las fuerzas y momentos sobre componentes aislados del telescopio están disponibles a pedido. Estos se utilizan como entradas para el cálculo de la fluctuación de la imagen [9,42]. • Coeficientes de transferencia de calor por convección en

superficies seleccionadas para usar como entradas en sólidos y
Modelos conjugados de transferencia de calor de componentes.

La Figura 5 presenta instantáneas representativas del contorno del gradiente espacial del índice de refracción, una medida de la turbulencia óptica, a lo largo del plano normal al eje de elevación del telescopio para TIO y GMT. De manera similar, en la Figura 6 se muestran mapas OPD instantáneos representativos .

Machine Translated by Google

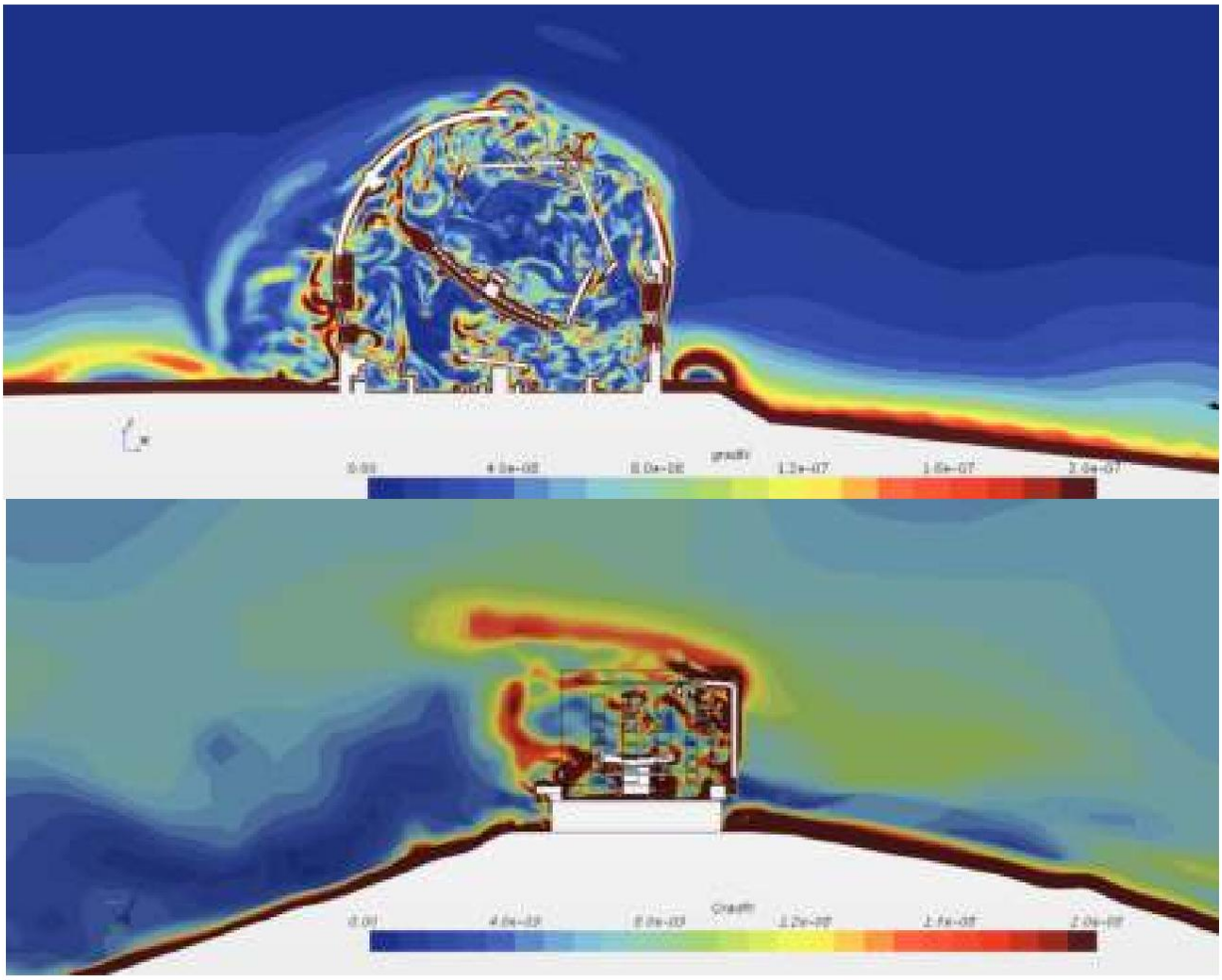


Figura 5. Instantáneas de contorno representativas del gradiente espacial del índice de refracción a lo largo del plano normal al eje de elevación del telescopio: (arriba) TIO, 30◦ cenit y 45◦ acimut en relación con el viento, y (abajo) GMT, 0◦ cenit y 180◦ azimut relativo al viento. Las velocidades del viento son medianas (6–7 m/s) y la configuración de ventilación es “abierta”.

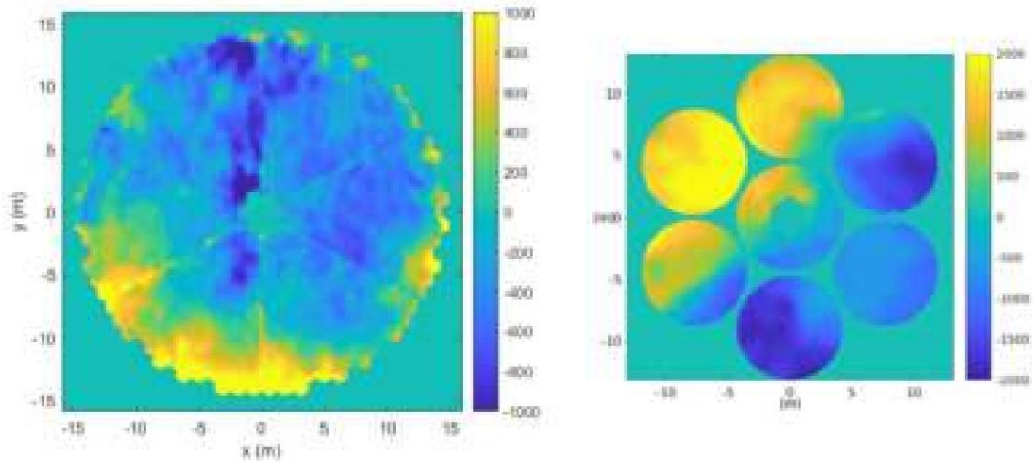


Figura 6. Mapas OPD representativos (en nm) para TIO (izquierda) y GMT (derecha).

El impacto es el siguiente:

- Optimización aerodinámica en todo el observatorio y desarrollo de estrategias operativas del recinto a través de un equilibrio entre la fluctuación del viento y la visión térmica;

Machine Translated by Google

• Estimación de los términos del rendimiento del observatorio y del presupuesto de errores: visión térmica, fluctuación de la imagen y desenfoque de la imagen inducido por el viento; • Proporciona sensibilidad de visión térmica a fuentes de calor: actualización del presupuesto de disipación de calor y opciones de diseño;

• Proporciona sensibilidad del sistema de metrología al entorno del gabinete: medidas esperadas. error de mención;

• Proporciona coeficientes de transferencia de calor para convección y factores de vista de componentes para cálculos de radiación para modelos térmicos de componentes.

6.3. Diurno (Solar)

Sería negligente no mencionar la categoría especial de observatorios donde las observaciones se realizan durante el día: los observatorios solares. Estas técnicas de estimación del rendimiento se han ampliado recientemente para incluir la optimización del recinto y la plataforma del telescopio y la validación de los requisitos sobre escudos térmicos y control térmico activo para el Observatorio Solar Europeo (EST) [55].

6.4. Validación

En 2010, se habían logrado avances significativos, incluidos los esfuerzos iniciales de validación del modelo, para resolver y caracterizar el GL [21,25]. En 2018, se presentó un esfuerzo de validación adicional, esta vez utilizando simulaciones inestables [26]. Con el conocimiento adecuado de las condiciones ambientales, las metodologías de modelización actuales pueden producir resultados realistas y útiles . Un ejemplo ilustrativo se muestra en la Figura 7 para Las Campanas [28]. El GL se compara con el medido en Paranal, el sitio del Very Large Telescope (VLT) de ESO. Paranal también está muy cerca del sitio del E-ELT. Estos perfiles son utilizados tanto por el GMT como por el E-ELT para entrenar sus modos de operación de Óptica Adaptativa de Capa Terrestre (GLAO). Se han realizado estudios similares para Maunakea y ORM, como se mencionó anteriormente.

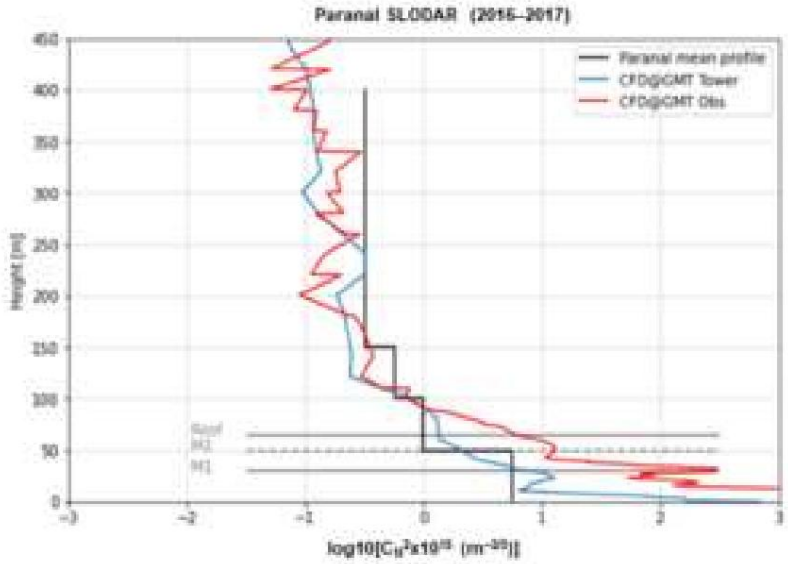


Figura 7. Se ^{2} Perfil en Las Campanas en la torre de monitoreo y dentro del recinto GMT. El superpone un perfil medido con SLODAR aproximado del sitio cercano a Paranal.

El procedimiento para simulaciones del rendimiento de los observatorios nocturnos centrados en la visión térmica ha sido validado por estudios realizados en 2011 y reportados en [56,57]. Implicaron mediciones y simulaciones en dos observatorios, Keck II y el CFHT (Telescopio Canadá-Francia-Hawái), que comparten el sitio de referencia del TIO y, por tanto, el dominio computacional y las condiciones contra el viento.

El objetivo de los estudios desde la perspectiva TIO fue validar el procedimiento de modelado necesario para capturar la visión local: el método numérico (configuraciones y modelos del solucionador),

Machine Translated by Google

tamaño de dominio requerido, fidelidad geométrica requerida del observatorio, resolución espacial y temporal , condiciones de contorno y representación de fuentes de calor en las superficies del observatorio.

Los observatorios Keck estaban interesados en optimizar el uso de su sistema de ventilación activa para mejorar el rendimiento y minimizar los costos operativos.

El CFHT se interesó por el rendimiento diferencial de una ventilación pasiva sistema antes de decidir seguir adelante con su aprobación.

Se instaló un centelleómetro láser en Keck II que proporcionó valores integrados de C_n^2 y de escala interna de turbulencia óptica promedio en un recorrido de 63 m entre M1 y M2, junto con anemómetros sónicos en el anillo de soporte del extremo superior para capturar la turbulencia mecánica. El sistema de ventilación activa funcionó a diferentes velocidades. Una cámara infrarroja proporcionó diferencias de temperatura con respecto al ambiente para todas las superficies del observatorio. En el CFHT se registraron temperaturas similares . Una combinación de datos de CFHT MegaCam entregó IQ; un DIMM instalado en la base de la apertura y uno instalado en la torre de monitoreo CFHT proporcionaron estimaciones de la visibilidad aparente de la cúpula.

Para todos los subconjuntos medidos, las orientaciones del telescopio, la velocidad, dirección y temperatura del viento externo se extrajeron de los datos de la torre CFHT y del Centro Meteorológico de Maunakea. Se simularon cuatro orientaciones distintas durante un largo período de tiempo para Keck II y tres para CFHT, con y sin ventilación pasiva. En el caso de Keck II, se muestrearon 240 combinaciones de orientación, velocidad del viento externo y velocidad del ventilador.

Las salidas del Keck II son las siguientes:

• Variación del índice de refracción a lo largo del recorrido del centelleómetro, C_n^2 ment: acuerdo razonable- integrado con las mediciones;

• Tasa de disipación de energía turbulenta y escala interna: concordancia razonable con las mediciones; • Escala de longitud integral: ancho de apertura coincidente como se esperaba;

• Comportamiento coincidente de C_n^2 vs. velocidad del viento externo;

• Comportamiento igualado de Cn vs. ^{2} velocidad del ventilador; • Velocidad óptima del ventilador identificada; la mitad de lo que Keck usaba anteriormente.

Los resultados de CFHT son los siguientes:

• Función de dispersión de puntos (PSF) del domo que ve a lo largo de la trayectoria óptica, PSF de ancho medio máximo (FWHM): concordancia razonable con las mediciones; • Reducción significativa en el domo viendo FWHM con ventilación pasiva: al menos 25% sin incluir la mejora del diferencial de temperatura de la superficie (resultó estar más cerca del 50%).

El impacto es el siguiente: • Reducción del riesgo: validación del modelado de visión del domo; • Selección óptima de la velocidad del ventilador Keck: reducción de costos operativos; • Apoyo a la recomendación de ventilar el domo CFHT: mejora diferencial del coeficiente intelectual; • Comentario general como en el caso del CFD del sitio: el modelado y las incertidumbres medidas fueron comparables.

Como primera aproximación, se podría imaginar que el volumen óptico de visión térmica exhibe un comportamiento OPD similar al atmosférico con un espectro de von Karman de escala exterior y pendiente espectral prescritas. Las simulaciones han demostrado que la pendiente espectral converge rápidamente hacia Kolmogorov a medida que aumenta la resolución. La longitud del camino óptico de los telescopios grandes y extremadamente grandes actuales y en diseño/construcción es de varias decenas de metros, lo suficientemente largo como para ser considerado un "buen caso" del GL. En estas condiciones, el PSSn podría aproximarse de la siguiente manera:

$$\frac{FWHMP_{\text{cajero automático}}}{FWHMP_{TOTAL}}$$

En general, esta es una forma rápida y sucia (con algún margen de error asociado) de convertir FWHM a PSSn para la mayoría de las aberraciones con el fin de presupuestar errores. Nótese que el PSSn es la integral del cuadrado del PSF, normalizado con el de la atmósfera de referencia,

Machine Translated by Google

incorporando también información de las alas del PSF, mientras que el FWHM solo se refiere al ancho del PSF donde su fuerza es la mitad de su máxima. Por tanto, la aproximación puede no ser válida para todos los tipos de errores ópticos. Se puede encontrar más información sobre esto en [11-13]. Normalmente, se utiliza p = 2 (equivalente a una operación de suma cuadrática entre el error y la atmósfera de referencia). Sin embargo, para el término de visión térmica específico, dado que el volumen óptico de visión térmica es parte de la columna de visión total, se debe utilizar el valor de 5/3:

$$\frac{\text{FWHM5/3}_{\text{cajero automático}}}{\text{FWHM5/3}_{\text{cajero automático}} + \text{FWHM5/3}_{\text{TS}}}$$

Con la campaña de validación de Keck y CFHT y el hecho de que los autores participaron en la ingeniería de sistemas para tres observatorios grandes y extremadamente grandes en diseño, los mapas PSF para cinco observatorios están disponibles. La Figura 8 resume los resultados de la observación térmica (múltiples conjuntos de datos, velocidades del viento y orientaciones por punto). Los resultados se han reescalado para que correspondan a la misma atmósfera del sitio de referencia con el parámetro de Fried r0 = 18 cm y una longitud de onda de 0,5 µm. Las PSF simuladas confirman que la expresión anterior para la conversión entre FWHM y PSSn es válida. Además, los valores para Keck y el CFHT se han estimado de forma independiente como realistas, lo que hace que el rendimiento previsto de los observatorios en diseño también sea realista, mientras que el observatorio Vera Rubin (LSST) se encuentra en sus etapas finales de construcción y se esperan las primeras luces en 2025. Tenga en cuenta que el presupuesto de error total nominal para un ELT en el PSSn es ~0,85.

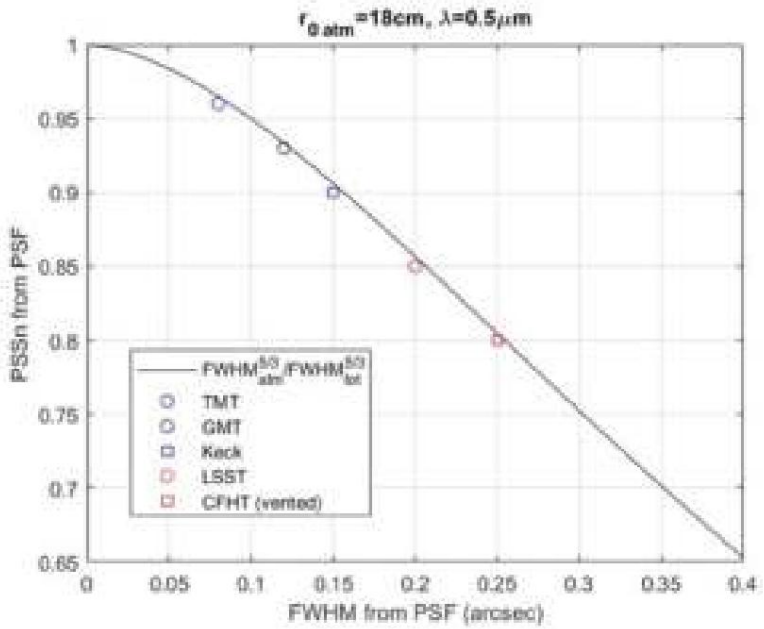


Figura 8. Simulaciones de observatorio: PSSn vs. FWHM.

7. Transferencia de calor conjugada y modelado térmico de sólidos

Como se explicó, el propósito de este tipo de modelos no es solo estimar el comportamiento de la inercia térmica de los componentes en el tiempo sino también la variabilidad espacial de la temperatura y la deformación resultante. Por lo tanto, las entradas típicas requeridas incluyen lo siguiente: • Propiedades materiales y térmicas de los componentes, incluida la emisividad; • Perfil de temperatura ambiente (ya sea diurno típico definido por el usuario o subconjuntos del marco estocástico);

• Cargas de calor activas (generadas por componentes, registros temporales si es posible); • Coeficientes de transferencia de calor por convección (de CFD) para superficies en contacto con el volumen del aire. umes no modelados;

• Resistencia térmica entre componentes conductores.

Machine Translated by Google

Las salidas incluyen lo siguiente: • Registros de tiempo (y espacio si se desea) de diferencial de temperatura en masa y/o superficie. del ambiente para cada componente del ensamblaje; • Registros temporales y espaciales de desplazamientos de nodos a partir de una geometría de referencia.

7.1. Conjuntos de espejos

El primer y más característico ejemplo de esta categoría de modelo fue el modelo TIO Segment Support Assembly (SSA). Se trata de un modelo transitorio que incorpora transferencia de calor conductiva, convectiva y radiativa entre el segmento, el marco de montaje, los doce sensores de borde, los tres actuadores, las correspondientes cajas electrónicas y el entorno.

Una versión anterior de este modelo no incorporaba componente fluido. El inconveniente fue que, dado que no había un patrón de flujo real fuera del segmento, la transferencia de calor por convección solo se trató como un parámetro. Desde entonces, el modelo evolucionó hacia su versión intermedia, presentada en [58]. Aquí, la diferencia fundamental es que tanto la temperatura del sólido como la del aire se resuelven detrás del segmento, lo que elimina la necesidad de información sobre el coeficiente de transferencia de calor o "simulación de circuito de retroalimentación" entre CFD y FEA.

Por lo tanto, las columnas de humo de fuentes de calor, como actuadores y cajas electrónicas, están representadas con precisión. Para el segmento superior, se utilizan los coeficientes de transferencia de calor superficial de las simulaciones del modelo CFD del observatorio. Para el propio segmento se utilizan las propiedades correctas del material , pero para algunos componentes del conjunto que no son 100% sólidos se ajusta la densidad para que, dado el volumen que ocupan, la masa resultante sea la correcta. La Figura 9 muestra la geometría resuelta junto con la desviación de la temperatura de la superficie al final de la noche con respecto a la ambiental, para la versión final del modelo con mayor fidelidad geométrica.

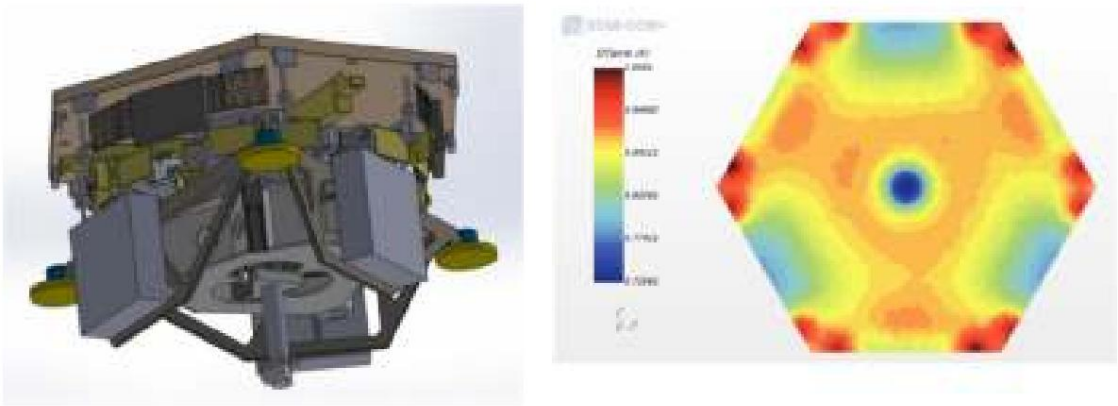


Figura 9. Componentes resueltos del conjunto de soporte del segmento TIO (izquierda) y distribución representativa de la temperatura de la hoja frontal (derecha).

El segmento del espejo GMT M1 está hecho de vidrio de borosilicato con una superficie trasera plana, una superficie superior parabólica y núcleos en su mayoría hexagonales (bolsas de aire) que conectan los dos lados. Se requiere que el sistema de control térmico M1 (M1TCS) enjuague los núcleos con la temperatura del aire ambiente (ligeramente por debajo) para rastrear el aire ambiente nocturno lo más cerca posible. Se desarrollaron modelos de transferencia de calor conjugada de un solo núcleo para varias alturas de núcleo y longitudes de boquilla y se simularon para varios caudales de boquilla. El objetivo era producir un coeficiente de transferencia de calor por convección (HTC) en las superficies del núcleo que sea uniforme y comparable al de la superficie frontal del espejo, dictado por la velocidad del viento externo, la orientación del telescopio y la estrategia de ventilación y obtenido del observatorio nocturno CFD. simulaciones.

De esta manera, la deformación de la lámina frontal del segmento también debería ser mínima. El aire es acondicionado por Unidades de Tratamiento de Aire (AHU) en el pleno inferior de la celda M1 y es guiado a los núcleos por un bosque de boquillas. El flujo central sale a un volumen del pleno superior (UP), separado del pleno inferior (LP) por una placa de acero aislada. El aire del pleno superior se puede dirigir de regreso a las UTA a través de tomas en la placa (ciclo cerrado)

Machine Translated by Google

o salir radialmente, en cuyo caso las UTA utilizan el aire del recinto (ciclo abierto). El pleno superior también se puede sellar o permitir que se comunique con el aire del recinto a través de un espacio en el borde del segmento.

Se desarrollaron modelos de transferencia de calor conjugada de un solo núcleo para varias alturas de núcleo y longitudes de boquilla y se simularon para varios caudales de boquilla, para generar una tabla de consulta de HTC de la hoja frontal y eficiencia de lavado del núcleo. Sin embargo, el HTC en la hoja posterior depende del patrón de flujo del pleno superior. Entonces, a continuación, se desarrolló el modelo UP CFD, resolviendo todas las entradas y salidas de la ruta de aire, junto con el bosque de esparcidores de carga de espejos (LS) y boquillas de núcleo.

Al mismo tiempo, se hizo evidente que, para obtener las deformaciones correspondientes a las distintas opciones de diseño, se necesita un modelo sólido 3D de un segmento completo, que toma la temperatura ambiente esperada del aire y la superficie del HTC, mapea e informa la temperatura del vidrio resultante y los consiguientes campos de deformación. , era requerido. Tenga en cuenta que el segmento en el eje varía de los segmentos fuera del eje, lo que significa que aunque la estrategia sea idéntica, todo el esfuerzo manual y computacional se duplica.

Finalmente, para confirmar que el nivel de presión y el patrón de flujo creado por las AHU en el pleno inferior aseguran la velocidad y la uniformidad de temperatura deseadas a través de las boquillas, se desarrolló el modelo LP, que incorporó todos los componentes estructurales de influencia, las AHU y sus conductos. armarios eléctricos y tuberías de refrigeración, los actuadores y sus fuentes de calor y, por supuesto, las boquillas.

Los detalles del marco GMT se pueden encontrar en [18]. La Figura 10 muestra el M1TCS
Diagrama de flujo de modelado con representaciones de modelos representativos y mapas resultantes.

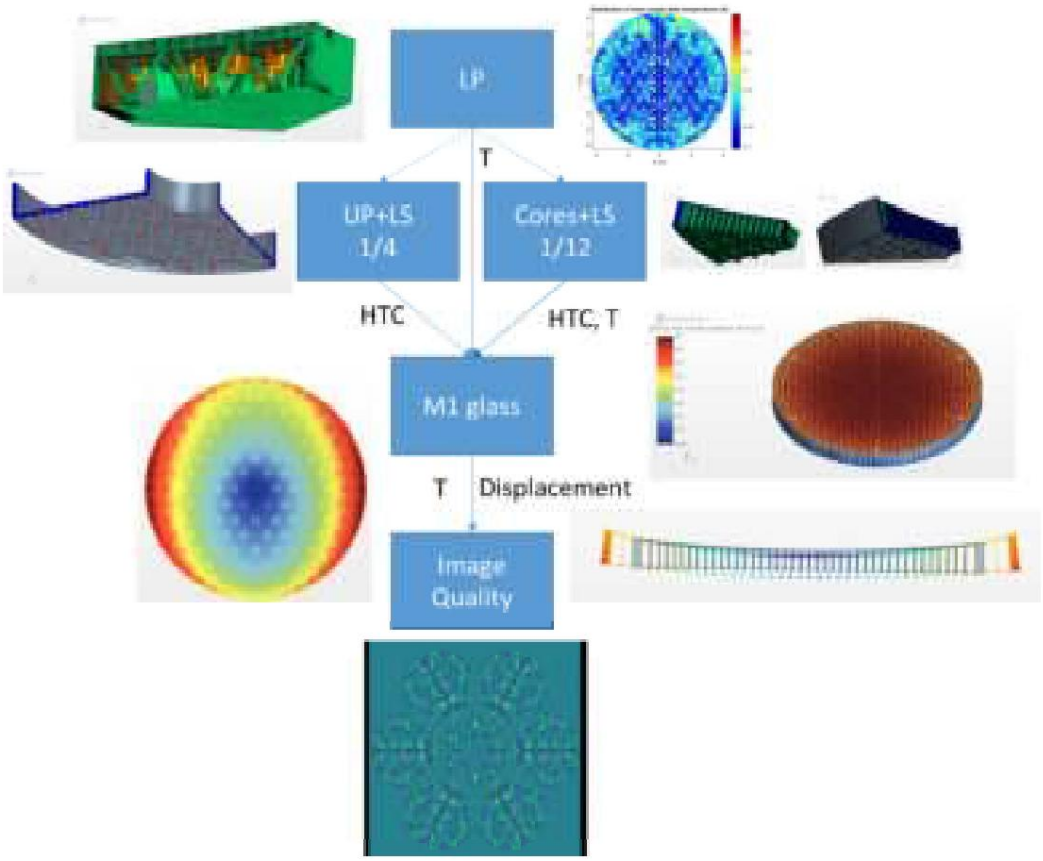


Figura 10. Diagrama de flujo de modelado GMT M1TCS.

El sistema de espejo secundario adaptativo (ASMS) GMT consta de siete segmentos de espejo deformables de 1 m de longitud que están diseñados para funcionar como un espejo único y siete posicionadores hexápodos. Cada espejo se deforma mediante 675 actuadores cuyo calor disipado se controla térmicamente mediante una placa de refrigeración. También se incluyen las siete cajas de las placas electrónicas reque

Machine Translated by Google

se enfrían activamente, mientras que los cuarenta y dos actuadores hexápodos no. También hay concentradores de interruptores de alimentación y baterías que ocupan el espacio superior entre las vigas de soporte.

Se construyó un modelo térmico sólido de alta resolución de un segmento, que incluía el hexápodo, el marco, la caja de la electrónica, la placa de enfriamiento, el cuerpo de referencia, el faldón contra el viento y el espejo [59]. El modelo se adjuntó como segmento en el eje a una versión reducida del modelo de montaje (estructura superior, segmentos M1, "cielo") para tener en cuenta adecuadamente los efectos de conducción y radiación. Los seis segmentos restantes y los treinta y seis actuadores se representaron como formas de resolución más gruesa que se incluirán en el modelo del observatorio, y sus densidades se ajustaron para que la temperatura de su superficie se comportara de manera similar al modelo en el eje en el transcurso de una noche. .

La necesidad de información adicional, como la variabilidad del índice de refracción en las ubicaciones de los sensores del borde del segmento y la presión diferencial esperada en el espejo deformable, resultó en modificar el modelo ya fino para resolver adecuadamente la brecha de 100 nm entre el espejo y la referencia. cuerpo, los propios actuadores como cilindros, y también los espacios entre ellos y el cuerpo de referencia.

Después de inspeccionar las 60 cajas CFD del observatorio en existencia, se realizaron simulaciones para varias velocidades del viento en el ángulo de incidencia esperado entre el viento y el segmento, y se obtuvieron los mapas de presión diferencial. Luego, las simulaciones se realizaron con los segmentos de resolución más gruesa incluidos en el modelo del observatorio, que solo proporcionan mapas de presión frontal. Se formuló una función de conversión para poder generar mapas de presión diferencial de los 60 casos, que cubren todo el rango de velocidades y orientaciones del viento de interés.

En cuanto al entorno del sensor de borde, se extrajeron registros de presión y temperatura a 20 Hz de 120 s de duración en las ubicaciones del sensor de los 60 casos, y se calcularon estadísticas espaciotemporales del índice de refracción. Estos resultados son insumos valiosos para el modelo de fase conjunta del segmento.

La Figura 11 muestra una distribución representativa del coeficiente de presión bajo vientos medios. en las superficies de un segmento ASMS (vista de media sección).

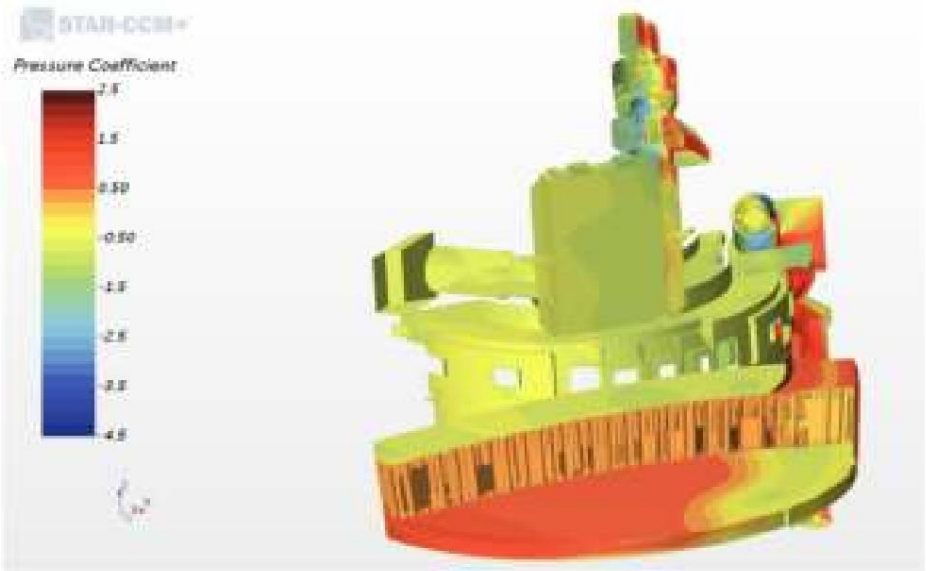


Figura 11. Modelo GMT ASMS y distribución representativa del coeficiente de presión.

El impacto es el siguiente:

• Validación de requisitos térmicos en conjuntos ópticos; • Estimación de los términos del presupuesto de error: visión en espejo, deformación térmica del segmento y visión en domo; • Proporciona formas de espejo realistas esperadas (deformación térmica, inducida por presión) para la corrección y puesta en fase del actuador.

Machine Translated by Google

7.2. Sistemas de

cerramiento El diseño del cerramiento TIO consta de una geometría de doble carcasa, que crea un espacio intersticial entre el revestimiento externo y el aislamiento interior. En este volumen reside la mayor parte de la masa térmica estructural del recinto y las fuentes de calor asociadas a su funcionamiento. Es posible que no se pueda lograr el nivel requerido de aislamiento en todas partes (p. ej., puertas de ventilación) y los sellos y espacios pueden provocar una infiltración no deseada. Los motores de azimut del telescopio se encuentran encima del suelo de observación. Por el contrario, el diseño del recinto GMT emplea una geometría de una sola carcasa, con toda la masa térmica estructural residiendo dentro del volumen del recinto. La mayoría de las fuentes de calor del recinto están detrás del aislamiento y los motores de acimut del telescopio están debajo del piso de observación.

Se han desarrollado modelos transitorios para evaluar el ambiente térmico en estos espacios intersticiales e investigar posibles estrategias de mitigación. Los modelos incluyen todos los componentes principales y las fuentes de calor esperadas involucradas, como la inercia térmica de las estructuras de acero y hormigón, las cargas térmicas de los paneles eléctricos y las interacciones con el entorno exterior y el suelo. Se da especial énfasis a los pasillos azimutales del recinto, debido a la gran potencia de salida del propulsor y la masa térmica del bogie en un ambiente confinado con opciones de ventilación limitadas y/o costosas. El objetivo es mantener la temperatura por debajo de un límite especificado dadas las especificaciones de aislamiento y la presión a un nivel que evite fugas a la cámara de observación, ya sea a través de los sellos o de las ventilaciones del recinto, cuando esté abierto.

Más específicamente, el modelo TIO [16] consta de lo siguiente: revestimiento exterior del cerramiento, aire intersticial en volúmenes aislados (tapa, corredor azimutal, base fija, espacio de ventilación) y aislamiento. Aproximadamente 100 paneles eléctricos principales se resuelven en bloques. Las fuentes de calor importantes se resuelven como sólidos con disipación de calor interna y el resto como límites con flujo de calor superficial prescrito. Aunque en el modelo de ensamblaje la disipación de calor del accionamiento del gabinete se trata como una fuente volumétrica, la magnitud de esa fuente como transferencia de calor por convección se obtiene de modelos individuales de acimut y bogie de tapa, como el que se muestra en la Figura 12.

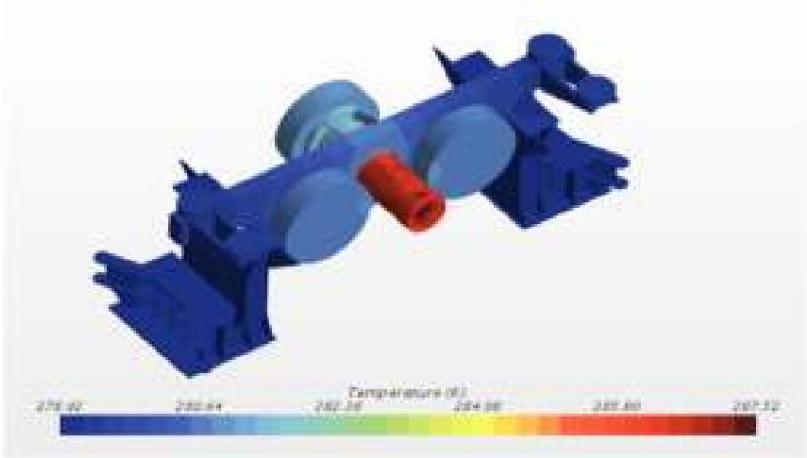


Figura 12. Bogie azimutal del recinto TIO con motor de accionamiento: distribución típica de la temperatura de la superficie durante la noche.

El modelo GMT consta de dos partes, el modelo del Sistema de Ventilación del Muelle (PVS) (anillos de base fijos exterior e interior, muelle, envoltura de cable, pista de azimut telescópica, disco de azimut telescópico, aislamiento, aire intersticial) y el modelo de Corredor Mecánico (aislamiento, pista de acimut , bogies, masas de freno, cuatro conjuntos motrices y cuadros eléctricos). En la Figura 13, se presentan el modelo PVS y una distribución representativa de la temperatura del aire en estado estacionario.

Machine Translated by Google

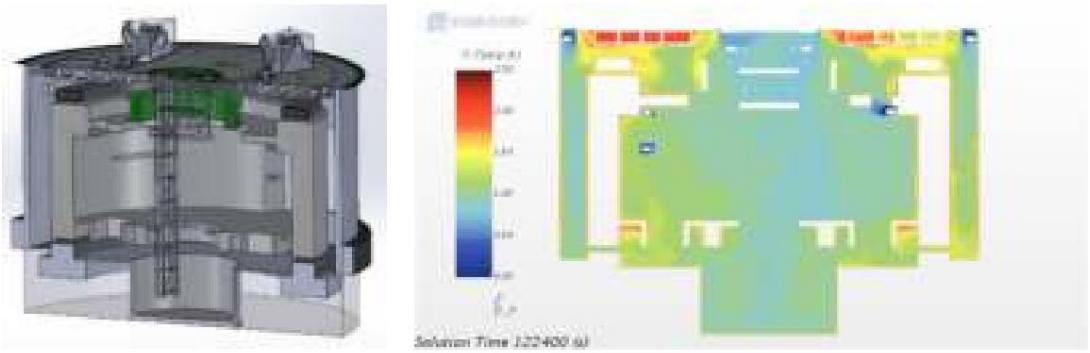


Figura 13. Modelo PVS GMT (izquierda) y contornos de temperatura del aire en el plano medio en estado estacionario (derecha).

El impacto es el siguiente:

• Validación de los requisitos de disipación de calor del gabinete y desempeño del aislamiento; • Elección de diseño: opción de refrigeración activa/pasiva para variadores de gabinete y gabinetes eléctricos y caudal.

7.3. Estructura del

telescopio El comportamiento térmico de la estructura de un telescopio ELT (STR) y de los subsistemas montados en el STR depende de la carga térmica del sistema y de las propiedades térmicas de los materiales componentes y del medio ambiente, así como de sus interacciones mediante convección, conducción y radiación.

Un modelo TIO heredado de 2010 [60] se basó en elementos FEA unidimensionales. Los desplazamientos resultantes se incorporaron a la rutina de función de mérito (MFR) de TIO, que los convirtió en traslaciones y rotaciones de las superficies ópticas. Estos, a su vez, fueron multiplicados por la matriz de sensibilidad óptica TIO que genera el error de orientación correspondiente . Por lo tanto, se podría evaluar el rendimiento térmico de la estructura para determinar el cumplimiento de los requisitos y se podría proporcionar orientación para el diseño. Además, se podrían desarrollar estrategias de corrección de la deriva térmica y LUT.

El último modelo desarrollado de 2014 rastrea la variación de temperatura diurna en el STR y las deformaciones correspondientes [61]. Este modelo es tridimensional, resolviendo el espesor de los miembros estructurales. Se adapta a simulaciones diurnas y ángulos de elevación variables. También incorpora todos los subsistemas y componentes que están acoplados térmicamente a la estructura y también calcula su temperatura. Finalmente, introduce un cuerpo “cielo” del tamaño de la apertura, que permite calcular correctamente el acoplamiento de la radiación al STR. El modelo consta de la celda M1, la torre M3 y el tubo inferior como un solo cuerpo, los muñones de elevación, y el tubo superior y la araña como un solo cuerpo.

Como incorporación posterior, también incorpora la estructura de azimut debajo de la plataforma Nasmyth, motores e imanes de elevación y almohadillas hidrostáticas. Las interfaces de contacto entre los distintos cuerpos equivalen a superficies soldadas. Se han omitido los sistemas de manipulación y limpieza de segmentos , así como varias plataformas finas de rejilla. También se incluyen componentes adicionales, que sólo se acoplan a la estructura mediante radiación: las cajas de nodos del sistema de control M1, el SSA como un solo bloque de volumen equivalente, el M1 como un solo cuerpo (sin espacios entre segmentos), el M3 y el M2. ensamblajes, los gabinetes electrónicos LGSF, M3 y de alta gama, la sección del conducto óptico de transferencia de haz sobre la araña y el telescopio de lanzamiento láser. El nivel apropiado/deseado de resistencia térmica de contacto entre estos componentes y la estructura es un parámetro. La Figura 14 ilustra la deformación térmica de la estructura del telescopio al final de la noche en las condiciones medianas esperadas.

Este modelo se revisará en el futuro y el estudio se actualizará para reflejar el último diseño.

Recientemente se desarrolló un marco de modelado de fidelidad y funcionalidad similar para la montura GMT [62]. El modelo del telescopio consta de las celdas del segmento M1, los muñones de elevación (anillos C) y las almohadillas hidrostáticas, el rotador de instrumentos gregoriano (GIR), el

Machine Translated by Google

tres vigas de soporte secundarias y el extremo superior del telescopio con el espejo secundario adaptativo . También incorpora gabinetes electrónicos, actuadores, deflectores ópticos y otros equipos que pueden acoplarse térmicamente a la estructura mediante radiación o conducción. Sin embargo, el marco consta de dos modelos separados: uno térmico para el cálculo de la temperatura inestable y un FEA para el cálculo de la deformación en estado estacionario. Los campos de temperatura instantáneos tridimensionales del modelo térmico, correspondientes a varias partes de la noche, se mapean en el modelo FEA para estimar la deformación resultante en relación con una condición inicial de deformación cero, nominalmente en el momento de la alineación del telescopio alrededor d La deformación de toda la estructura está disponible, pero los desplazamientos en los puntos duros, la interfaz entre la estructura y la óptica, son procesados adicionalmente por el modelo óptico GMT para proporcionar la desalineación óptica resultante. El objetivo es eventualmente correlacionar la información del sensor de temperatura de la estructura a través de un gradiente espacial con la desalineación óptica y desarrollar un LUT de ajustes correctivos en función de las condiciones ambientales externas. La Figura 15 muestra los modelos térmicos y FEA.

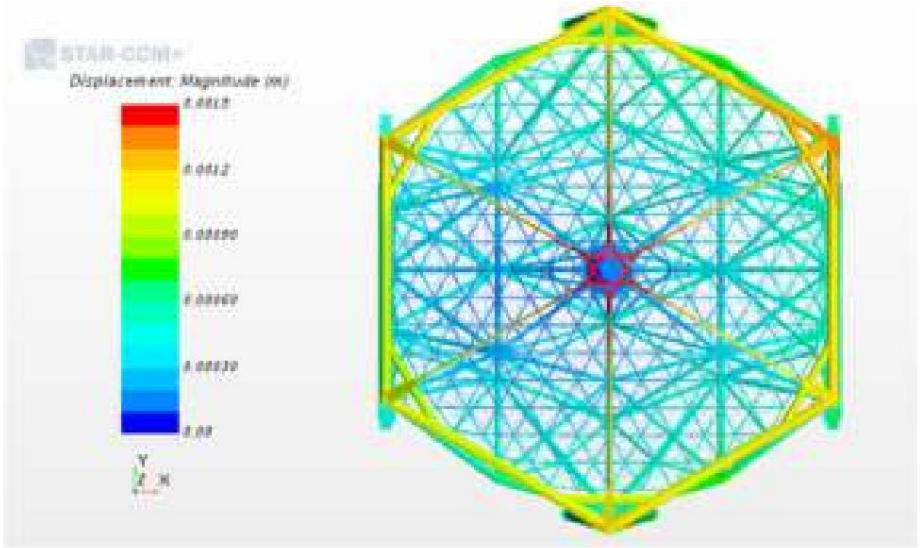


Figura 14. Magnitud de la deformación térmica de la estructura del telescopio TIO (m) 12 h después de la puesta del sol.

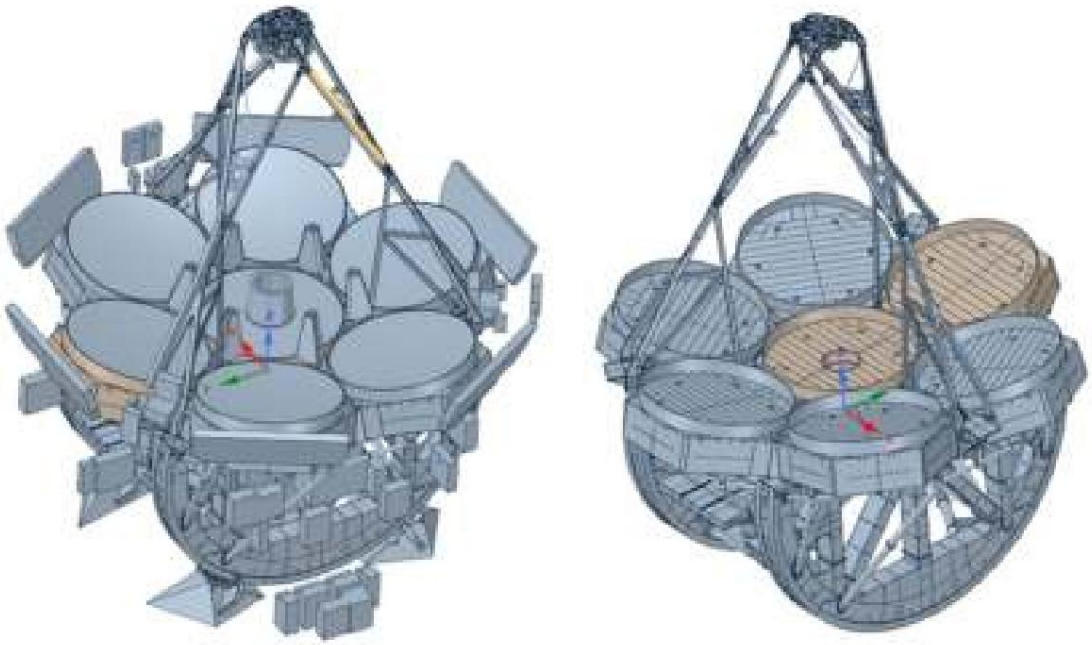


Figura 15. Modelos térmicos (derecha) y de deformación (izquierda) de la estructura del telescopio GMT.

Machine Translated by Google

El impacto es el siguiente: •

Verificación de requisitos: distancia mínima de separación del segmento, error residual de seguimiento en el cielo , error de orientación del telescopio, carrera máxima del actuador y desplazamiento máximo de la distancia focal hacia atrás;

• Proporciona desalineaciones térmicas esperadas realistas para pruebas de estrategias de corrección; • Proporciona condiciones de contorno de entrada para simulaciones CFD del rendimiento de los observatorios.

7.4. Subsistemas/Componentes

7.4.1. Unidades de elevación

El modelado de los impulsores de elevación comenzó en 2014 con un modelo independiente para estimar el caudal de enfriamiento requerido para que las superficies del impulsor no excedan una temperatura perjudicial para la vista del domo y las bobinas del impulsor no excedan la temperatura máxima permitida.

Consta de cuatro componentes principales: la estructura de soporte, bobinas, fuerzas e imanes. Es un modelo transitorio que incorpora transferencia de calor conductiva, convectiva y radiativa entre los componentes y el medio ambiente. Posteriormente, el modelo se incorporó al modelo de estructura del telescopio TIO, como se muestra en la Figura 16.

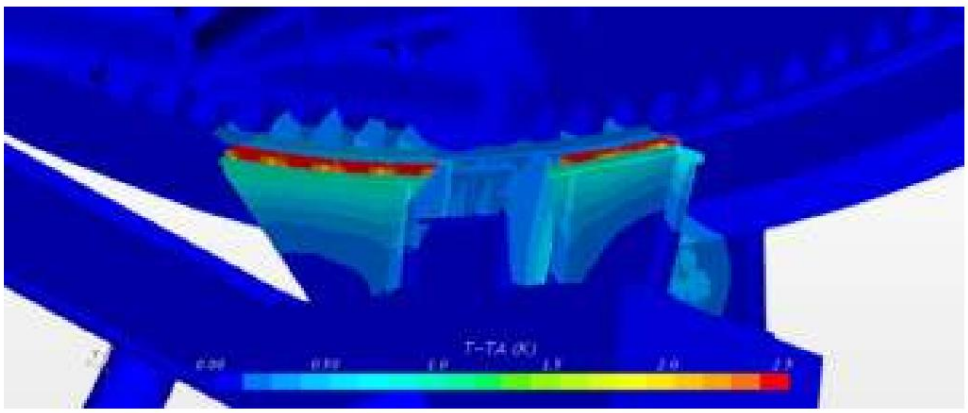


Figura 16. Detalle del modelo de unidad de elevación TIO y desviación de la temperatura de la superficie con respecto a la ambiente.

El impacto es el siguiente:

• Validación del caudal de enfriamiento de los variadores EL y los requisitos de temperatura máxima del serpentín; • Proporciona condiciones de contorno de entrada para simulaciones CFD del rendimiento de los observatorios.

7.4.2. Instalación de estrella guía láser TIO (LGSF)

En 2013 se desarrolló un modelo del conducto óptico de transferencia de haz (BTD) LGSF [63]. Resolvió el espesor del conducto y los espejos de transferencia del rayo láser y su estructura de soporte para la mayor parte de la trayectoria del rayo láser que está sujeta a gradientes de temperatura significativos y/o grandes cambios verticales. También resolvió el aire dentro del conducto y su interacción térmica con los componentes anteriores mediante transferencia de calor conjugada. También se capturó la interacción térmica del rayo láser con la óptica. No incluía el camino desde los ocho láseres hasta el truss pointing array (TPA) ni el camino dentro del telescopio de lanzamiento láser (LLT).

El modelo proporcionó orientación al equipo de diseño de LGSF y una primera estimación del rendimiento de estabilidad del rayo láser y el cumplimiento de los requisitos.

A medida que el diseño de la estructura del telescopio evolucionó a lo largo de los años, se propuso una nueva trayectoria óptica para el LGSF. Tanto la trayectoria óptica original como la nueva se compararon con criterios ópticos, mecánicos y otros criterios relacionados con el rendimiento del telescopio. Los criterios de rendimiento óptico incluyeron un análisis de primer orden de la turbulencia óptica generada dentro de los conductos. La nueva ruta propuesta exhibió un comportamiento térmico similar pero redujo significativamente la turbulencia óptica y fue adoptada. Las modificaciones de diseño como resultado del estudio incluyeron distancias cada vez mayores entre ciertas ópticas y la remodelación aerodinámica de las envolturas alrededor de la óptica de transferencia. La estimación inicial de la fluctuación del haz estuvo dentro de los valores presupuestados.

Machine Translated by Google

Entre 2021 y 2023, el modelo se actualizó para incluir la matriz de banco láser (LB), el conjunto de gama alta (TE) y el LLT [64]. También se logró una mayor fidelidad geométrica con equipos adicionales y una estructura de soporte. El modelo se dividió en cinco submodelos (LB array, TPA, BTD, TE, LLT), cada uno alimentando al siguiente en términos de caudal y temperatura del aire. La trayectoria óptica se dividió en múltiples segmentos para identificar los principales contribuyentes a la fluctuación del haz y al error de enfoque debido a la deformación térmica de la óptica, especialmente de las lent La fluctuación del haz se calculó en función del tiempo a lo largo de la noche, tanto en frecuencia temporal baja como alta. Se desarrollaron modelos independientes adicionales de gabinetes de cabezal láser (LH), electrónica láser estándar (LE) y electrónica de alta gama (TE.EL) para verificar la eficiencia de enfriamiento esperada y la temperatura de la superficie exterior. La Figura 17 ilustra el flujo de información del modelado con representaciones de modelos representativos y los contornos de turbulencia óptica resultantes.

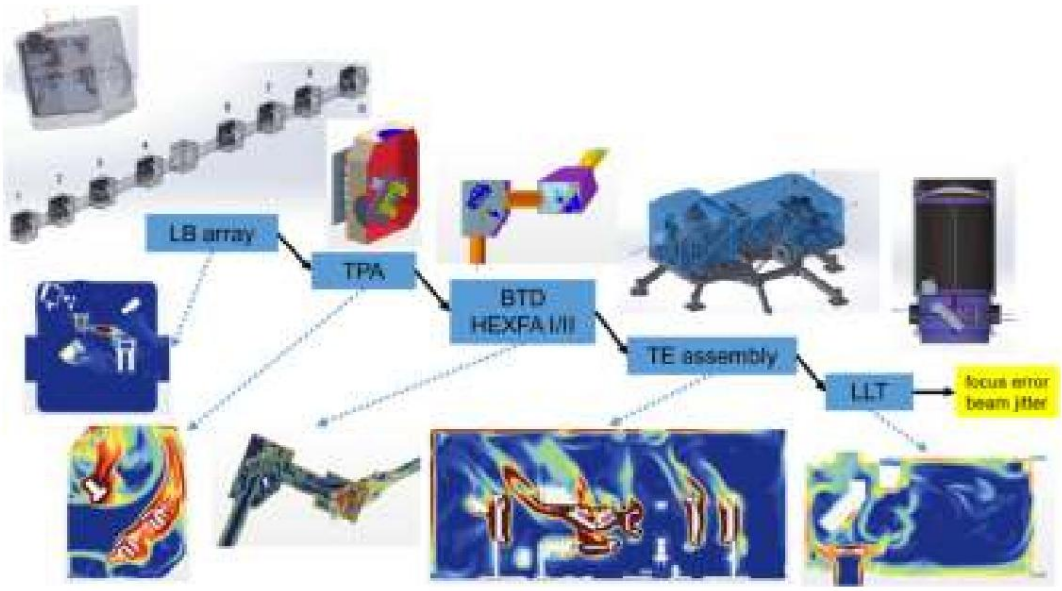


Figura 17. Diagrama de flujo de modelado TIO LGSF.

El impacto es el siguiente:

• Modificaciones de diseño para minimizar la turbulencia en el camino y mejorar el enfriamiento de la lente; • Estimaciones de los términos de fluctuación del haz y presupuesto de error de enfoque.

7.4.3. Gabinetes electrónicos/eléctricos

Se trata de modelos transitorios que se centran en la forma y el volumen de un componente particular, que normalmente abarca una fuente de calor interna. El volumen puede incluir múltiples partes de diferentes materiales, así como aire. Por lo tanto, sólo se requiere la masa total y una capacitancia térmica promedio para capturar su inercia térmica. Su objetivo principal es proporcionar la distribución de la temperatura superficial resultante y el tiempo que tarda el calor disipado internamente en llegar a la superficie dada una fuente de calor variable y un entorno extern

Inicialmente, se desarrollaron como modelos independientes para unos pocos componentes determinados, pero recientemente se han incluido de forma rutinaria en todos los modelos de ensamblaje; es la forma típica de tratar el componente medio de la fuente de calor.

8. Soporte de modelado CFD Los

modelos CFD de soporte son modelos de alcance limitado desarrollados para responder preguntas específicas de diseño y/o modelado. Pueden ser estacionarios o inestables y normalmente corresponden a componentes aislados.

Machine Translated by Google

8.1. Deflectores de apertura de la carcasa

TIO Los deflectores de apertura TIO son una característica única desarrollada para proteger el extremo superior del telescopio del viento como resultado de reducir el diámetro de la carcasa al mínimo necesario, pero también actúan como un sello entre la carcasa y el obturador de apertura. .
La Figura 18 ilustra el efecto de los deflectores en los niveles de velocidad alrededor del extremo superior del telescopio a través de esta simulación inicial de estado estacionario durante la fase de diseño conceptual en 2006. Esto fue equivalente a un aumento de ~2,5 m en el diámetro del recinto. Los deflectores tienen un radio de ~5 m, una cuerda de ~5 m (de punta a bisagra) y una longitud proyectada normal al plano de apertura de ~3,5 m. Cuando se despliega, el ángulo entre la cuerda y el plano de apertura es de
Durante la fase de diseño detallado, el modo estructural más bajo se estimó aproximadamente en 5 Hz. Tanto para consideraciones de fatiga como de supervivencia, en 2011 se evaluaron la frecuencia natural de formación de vórtices y su proximidad a los modos estructurales más bajos.

Figura 18. Impacto del diseño del deflector TIO en los niveles de velocidad alrededor del extremo superior del telescopio (escala de velocidad normalizada con el valor a barlovento).

Se desarrolló un modelo CFD detallado de un deflector único aislado en un ángulo de ataque de 30° (el ángulo que se espera que determine la frecuencia máxima de desprendimiento), y se realizaron simulaciones inestables para condiciones de viento medio y de supervivencia [58]. Se calculó el número de Strouhal, junto con los componentes de fuerza media y dinámica.
En condiciones de supervivencia, la frecuencia de desprendimiento se acerca al primer modo estructural. Los resultados podrían usarse como entradas para el modelo FEA del deflector para determinar los efectos de la carga del viento e investigar modificaciones de diseño si fuera necesario.

8.2. Rayos de araña

El término “araña” se refiere a la estructura delgada de varios miembros que soporta el conjunto del espejo secundario de un telescopio y está presente en muchos observatorios existentes.

En 2012, se utilizó un modelo de haz de araña único y aislado, que en ese momento medía 0,25 m × 0,6 m × 20 m. desarrollado para investigar varios supuestos de modelado.

El modelo paramétrico original utilizado para estimar la fluctuación del viento basado en entradas constantes de CFD tenía suposiciones sobre el coeficiente de arrastre del haz, la pendiente del espectro de fuerzas y la escala de longitud de descorrelación de fuerzas a lo largo del haz. Las simulaciones proporcionarían estimaciones precisas de estos valores supuestos, así como la resolución espacial y temporal necesaria para resolver adecuadamente la física.

Se realizaron simulaciones inestables utilizando varias resoluciones de superficie, velocidades del viento, intensidad turbulenta contra el viento y escala de longitud integral y tasa de muestreo, para flujos perpendiculares a los lados ancho y estrecho del haz, así como flujo en ángulo a 30◦ (combinación).
Los resultados recopilados incluyeron registros de presión en ubicaciones seleccionadas y registros de fuerza integrados, así como coeficientes de resistencia y sustentación medios y RMS.

Los resultados indicaron que el modelo paramétrico no era válido para velocidades de viento locales superiores a 1 m/s. También confirmó la suposición de que el espectro de fuerzas integrado alrededor de un objeto sólido tiene una pendiente más pronunciada que la de la presión puntual debido al efecto de atenuación aerodinámica. Se determinó y adoptó para todo el telescopio TIO la resolución de superficie adecuada que captura la formación de vórtices en las frecuencias esperadas.

Machine Translated by Google

estructura sobre el anillo hexagonal, el conjunto M2 y el telescopio de lanzamiento láser (LLT). La resolución del tubo inferior también se amplió en consecuencia. Las simulaciones inestables proporcionarían directamente registros de fuerza para las estimaciones de fluctuación de la imagen en el futuro. La estructura superior del telescopio GMT está modelada de manera similar.

8.3. Vibración de tubería inducida por el flujo

El fenómeno de la vibración inducida por el flujo es bien conocido y potencialmente problemático para los ELT, especialmente en el modo AO, ya que el sistema de refrigeración comprende numerosos tubos y curvas.

Para respaldar la presupuestación de errores de vibración, entre 2013 y 2021 se desarrollaron varios modelos simples de flujo de tuberías y válvulas en un esfuerzo conjunto de TIO-GMT para investigar la magnitud de la fuerza dinámica que el flujo turbulento impone sobre la tubería debido a la fricción o separación. así como su espectro. Primero se consideró un caso de flujo de tubería recta turbulento completamente desarrollado y proporcionó las condiciones de entrada para el resto de las simulaciones. Estos incluían un codo de 90° y un tubo en forma de S, dos codos consecutivos de 90°. También se consideraron diferentes diámetros de tubería, ángulos de válvulas de bola, radios de curvatura y caudales.

Los resultados indicaron que una sola válvula podría causar vibraciones mayores que muchos pies de tubería. La red de tuberías debe diseñarse para garantizar que los ángulos de las válvulas se mantengan dentro de un límite umbral (<30◦). Aunque las frecuencias de separación del flujo turbulento más allá de una curva de 90° pueden ser tan altas como 200 Hz, la magnitud absoluta de la fuerza dinámica resultante es mucho menor que las fluctuaciones esperadas de la presión de la bomba.

8.4. Escape de las instalaciones de la Cumbre

Los observatorios emplean varios sistemas de refrigeración utilizados para el aire acondicionado diurno del recinto y el enfriamiento de instrumentación, óptica, cojinetes hidrostáticos de telescopios, etc. La gestión del rechazo de calor del ciclo de refrigeración puede ser importante para IQ. A menudo, la expulsión de calor se produce en un edificio de instalaciones adyacente al recinto del telescopio. La ubicación y orientación de los conductos de ventilación se seleccionan teniendo en cuenta la dirección del viento predominante. Este enfoque se basa en estadísticas y podría no ser muy eficaz para entornos eólicos bimodales o multimodales. Una solución más costosa implica construir un túnel para desviar el aire caliente lejos del observatorio y del camino óptico. Tanto el sitio TIO como el GMT son bimodales, con orientaciones de viento aproximadamente NE/SW.

Por lo tanto, el enfriador del edificio de instalaciones de la cumbre de TIO está ubicado en la esquina noroeste, pero se espera que descargue aire caliente muy cerca del observatorio. Con vientos de baja velocidad y para ciertas orientaciones del viento, se espera que esta columna se eleve lo suficiente e interfiera con la trayectoria óptica antes de que tenga tiempo de difundirse en el aire.

Sin embargo, se espera que la columna sólo pueda ser un problema con vientos del oeste y con ángulos de elevación bajos. Con vientos del este, la columna se disipa antes de cruzar la trayectoria óptica de TIO, incluso con vientos de baja velocidad (aunque nunca se ha simulado la ausencia total de viento).

En 2010 se realizó un estudio para evaluar el impacto de la pluma en la visión atmosférica de referencia. Se procesaron tres casos estables de CFD para velocidades de viento bajas (2,5 m/s), medianas (6,5 m/s) y altas (10 m/s) procedentes del oeste (270 ◦). Se supone que los resultados también son válidos para vientos del oeste entre 225◦ (más común) y 315◦ (menos común). El ángulo cenital del telescopio se fijó en 33◦ . El caudal nominal de 150.000 CFM dio como resultado una velocidad de escape de 2,5 m/s y una temperatura de ~10,5 K por encima de la ambiente. Los valores corresponden a una unidad refrigerada por aire.

Se procesaron varios caminos ópticos para estimar el r0 equivalente de los primeros 50 m más allá del recinto. Se consideraron tres ángulos de telescopio en acimut (315◦ , 0◦ , 45◦) y tres cenits (65◦ , 55◦ , 45◦) . Para cada orientación específica del telescopio, se consideraron tres trayectorias, en X = 0 m e Y = −15 m, Y = 0 e Y = +15 m en el sistema de coordenadas del telescopio. Los resultados iniciales indicaron que se detecta un impacto considerable sólo para el ángulo cenital de 65° y sólo para la trayectoria Y = −15 m.

A medida que el diseño evolucionó, la potencia total requerida para ser agotada aumentó dramáticamente y fue necesario un equilibrio entre temperatura y caudal. Se realizó un nuevo estudio.

Machine Translated by Google

formado en 2020 [16] considerando varias combinaciones de diferenciales de temperatura de escape y caudales. Se implementaron dos cambios importantes para este estudio. Las simulaciones fueron inestables, ya que los avances en el modelado GL, como se explicó en secciones anteriores, permitieron estimaciones más precisas del FWHM esperado a lo largo de un camino. Se espera que el escape tenga rejillas que puedan disponerse de manera óptima para minimizar el efecto de la columna. Por lo tanto, se seleccionó un ángulo descendente de 45° . Basado en experiencias previas, el estudio se centró en vientos del oeste de 2 m/s y el procesamiento del sector de azimut 315◦ –45◦ .

El nuevo estudio verificó que sólo la parte más baja de la trayectoria óptica se ve afectada significativamente en un ángulo cenital de 65◦ . También verificó que no se espera que la columna ingrese al observatorio a través de los respiraderos. Se seleccionó un diferencial de temperatura aceptable de 15 K por encima de la temperatura ambiente. Sin embargo, para esa temperatura, la visión se degrada a medida que aumenta el caudal, lo que sugiere un posible ángulo de escape y otros ajustes geométricos. En promedio, con vientos bajos del oeste y en elevaciones bajas, la peor visibilidad ocurrirá cuando apunte al NE.

En general, parece que la columna cruza de alguna manera la trayectoria óptica del telescopio cuando (a) la dirección del viento está entre 225◦ y 315◦ , (b) la velocidad del viento es inferior a 4,5 m/s nominales, y (c) el ángulo acimutal del telescopio está entre 300◦ y 60◦ y el ángulo cenital del telescopio es superior a los 50◦ nominales . Desde el marco estocástico, concluimos que esto ocurre en ~0,4% del tiempo de observación.

Los aerorrefrigeradores GMT están ubicados al E-SE del recinto, más alejados y cuesta abajo. Su flujo de escape también se ha incorporado en el modelo CFD del observatorio. Aunque rechazan el calor verticalmente y a mayor velocidad (5 m/s), es aún menos probable que afecte la trayectoria óptica. Ninguna de las 60 simulaciones de referencia utilizadas en la evaluación del desempeño sugiere ninguna interacción entre la trayectoria óptica y el penacho.

El impacto es el siguiente: •

Validación de requisitos: diferencia de temperatura de escape de la enfriadora respecto a la ambiental, caudal, orientación y posibles modificaciones geométricas cerca de la zona de escape de las instalaciones.

8.5. Sala mecánica y túnel de servicios TIO

En 2015, se desarrolló una ampliación del modelo CFD del observatorio que incluía la abertura para enrollar cables en el piso de observación y el túnel de servicios públicos, así como las salas de servicios públicos y mecánicas.

El alcance de este estudio fue investigar la dirección del flujo en la abertura de la envoltura del cable y dentro del túnel de servicios públicos, las temperaturas esperadas dentro del túnel y las salas de servicios públicos y mecánicas, y la idoneidad del caudal de diseño dentro del túnel para gases peligrosos. eliminación.

Se realizaron simulaciones para una configuración que produciría niveles de presión dentro del recinto lo suficientemente bajos como para causar una posible inversión del flujo en el túnel o localmente en la abertura de la envoltura del cable (velocidad del viento media a alta, ventilación cerrada, apuntando al cenit).

En condiciones normales de observación, sólo hay difusión térmica a través de la envoltura del cable que realmente no afecta la trayectoria óptica. Sin embargo, con vientos de alta velocidad, hay flujo desde la abertura para enrollar el cable hasta el interior del recinto. La tubería de extracción de gas del túnel no debe descargar en el cuarto de servicio, sino que debe estar conectada al conducto de escape del cuarto de servicio. Para evitar fugas térmicas a través de las habitaciones y hacia el túnel, el caudal de escape de la sala de máquinas debe ser un 15% mayor que el caudal de entrada del cuarto de servicio.

En 2021, el modelo fue revisado y ampliado significativamente para reflejar cambios de diseño e incorporar una mayor fidelidad [16]. Las adiciones incluyeron una puerta de mamparo que divide el volumen del túnel durante una emergencia de incendio, las obstrucciones de pivotes y envolturas de cables, y concreto de cimientos y muelles. Los objetivos adicionales eran evaluar el impacto de cerrar la puerta del mamparo en el patrón de flujo del túnel y el impacto de dirigir el aire agotado del túnel a la sala de máquinas (en lugar de desviarlo directamente al sistema de refrigeración por líquido; ya habíamos decidido no descargarlo). en el lavadero).

El estudio comprobó que cerrar la puerta del mamparo no tendrá impacto (el flujo del túnel no llega al lavadero). También demostró que dirigir el aire del túnel hacia la sala de máquinas puede reducir la temperatura de escape entre 2 y 4 K. Finalmente, verificó la

Machine Translated by Google

nivel esperado de temperatura de escape nocturna, aunque en las primeras dos horas después de la puesta del sol este nivel será significativamente mayor debido a la inercia térmica y al tiempo de respuesta de la descarga de volumen (la carga diurna es mucho mayor).

El impacto es el siguiente: •

Validación de requisitos: señal de flujo en la abertura de la envoltura del cable, caudales de escape del ventilador y de los servicios públicos del túnel, ubicación de descarga de gas del túnel, temperatura de escape de la sala de máquinas y temperatura ambiente alrededor del equipo.

8.6. Calcular el segmento del haz de iones

Varios telescopios de espejos segmentados (por ejemplo, E-ELT, TIO) utilizan Ion Beam Figuring (IBF) para llevar los segmentos M1 a sus especificaciones de figura finales. Durante este proceso, que puede durar muchas horas, la temperatura del segmento aumenta considerablemente. Las uniones pegadas en la parte posterior del segmento pueden debilitarse si su temperatura excede un cierto valor.

En 2020 se desarrolló un modelo térmico transitorio del proceso IBF para el TIO con el objetivo de poder probar de forma económica varios patrones de escaneo para optimizar el proceso y minimizar el aumento de temperatura [65]. Para validar el modelo se utilizaron mediciones de temperatura durante los experimentos IBF para el TIO. Las mediciones consistieron en una prueba de calibración en un pequeño disco de muestra (simulado) y tres ejecuciones de segmentos (dos de los cuales fueron simulados) correspondientes a diferentes patrones y velocidades de escaneo.

Uno de los aspectos clave del modelo es la implementación del flujo del haz de iones que llega a la superficie del segmento. Esto se logra mediante una función de distribución gaussiana ya sea en la superficie o en un volumen de espesor específico. Otros fenómenos físicos importantes a considerar son la irradiación difusa de la pistola de haz de iones como fuente infrarroja, la transmisividad a través del vidrio y la posible reflexión de la radiación en las superficies de soporte circundantes. A pesar de varias incertidumbres, se ha identificado un conjunto inicial de datos que podrían predecir satisfactoriamente la temperatura máxima esperada en la parte posterior del segmento.

8.7. Perfilómetro de segmento hexagonal

Varios observatorios existentes y futuros emplean espejos primarios segmentados que constan de segmentos hexagonales. Para verificar las especificaciones de las cifras finales de estos segmentos, se deben realizar mediciones de metrología óptica. Para un tipo particular de medición, un perfilómetro láser, un proveedor de TIO había propuesto una cámara específica.

En 2012, se desarrolló un modelo para investigar la magnitud relativa de los efectos térmicos, como la deformación del segmento debido a la distribución no uniforme de la temperatura en la cámara de prueba y el índice de refracción variable a lo largo de la trayectoria del láser.

Consta de los siguientes componentes: sonda láser, cámara de prueba exterior, barreras de vidrio, segmento, estructura de soporte y aire dentro de la cámara de prueba. Es un modelo transitorio que incorpora transferencia de calor conductiva, convectiva y radiativa entre los componentes y el medio ambiente. Se consideraron dos configuraciones de ventilación activa de la cámara de prueba (paralela y contraflujo), se obtuvieron resultados y se sugirieron posibles estrategias de mitigación de errores.

8.8. Pruebas de aceptación en fábrica

La mayoría de las veces, el entorno dentro de una fábrica o laboratorio, donde se llevarán a cabo las pruebas de aceptación finales de un componente del observatorio, se desvía del entorno real del observatorio. A veces se debe establecer un conjunto separado de requisitos: si el rendimiento durante una prueba de fábrica es X, entonces el rendimiento en la montaña debería ser Y.

En tales casos se utiliza un modelo para conectar los dos. Tomemos como ejemplo el conjunto de “cuchilla de aire” del Telescopio Daniel K. Inouye Solara (DKIST). Es un componente clave de los sistemas térmicos que cumple el doble propósito de ventilar el techo del laboratorio Coude y como interfaz entre el laboratorio y los ambientes ambientales mediante una cortina de aire.

Durante las pruebas de aceptación en fábrica, la visualización del flujo de la cortina de aire reveló que el flujo se desviaba hacia arriba, lo que sugiere un gradiente de presión inesperado, que fue confirmado por sensores de presión entre la parte inferior del conjunto y el piso de la fábrica. Fue

Machine Translated by Google

Se planteó la hipótesis de que los remolinos a gran escala, generados por la inversión del flujo de salida de la cuchilla de aire debido a la proximidad del piso, pueden haber inducido el aumento de presión en los lugares medidos. El modelo CFD real del conjunto en la configuración de instalación de un observatorio sugería que la cuchilla de aire cumpliría o superaría todos los requisitos de rendimiento [66].

9. Visión del CFD para 2030

De las secciones anteriores se desprende claramente que la capacidad de simular flujos aerotérmicos utilizando CFD ha progresado rápidamente durante las últimas dos décadas y ha cambiado fundamentalmente el proceso de diseño aeroespacial. Las capacidades de simulación avanzadas no solo permiten reducir los requisitos de pruebas en tierra (y en vuelo), sino que también brindan información física adicional y permiten diseños superiores a un costo y riesgo reducidos. A pesar del considerable éxito, el uso confiable de CFD se ha mantenido confinado a una pequeña región de la envolvente operativa debido, en parte, a la incapacidad de los métodos actuales para predecir de manera precisa y/o eficiente flujos turbulentos y separados. Como ejemplo relevante, mencionemos el esfuerzo que comenzó en 2015 para predecir el valor asintótico de alta resolución del PSSn en el contexto de la visión térmica [43]. Aunque finalmente se realizó un estudio de cuantificación de la incertidumbre con resultados satisfactorios [28] y los esfuerzos recientes del E-ELT para efectos localizados, sin resolver el observatorio completo, también arrojan resultados realistas [67], el estado aún se puede resumir en las siguientes líneas: “La estimación de la visión térmica local expresada en la métrica PSSn no parece converger con la resolución espacial en el límite de la potencia informática factible, o más bien, razonable. Aún se está investigando hasta qué punto este fenómeno es numérico y hasta qué punto se pueden parametrizar y contabilizar las contribuciones a escala fina. Se han desarrollado metodologías para predecir el valor asintótico más allá del lí
Sin embargo, el margen de error dentro del cual esto podría lograrse es probablemente mayor que la precisión deseada para realizar análisis de sensibilidad de fuentes de calor moderadas individuales. Además, la variabilidad temporal de la métrica también es mayor que la precisión deseada”.

Se convoca a los científicos computacionales para que respondan si el CFD ha llegado a sus límites o si se deben realizar más inversiones en investigación para que el CFD sea lo suficientemente preciso, eficiente y confiable como para permitir futuras ganancias revolucionarias en el rendimiento del sistema aeroespacial (en nuestro caso, el observatorio) y garantizar la verificación mediante análisis. Bajo el patrocinio de la NASA, Boeing, Pratt & Whitney, la Universidad de Stanford, el Instituto de Tecnología de Massachusetts, la Universidad de Wyoming y el Centro Nacional de Aplicaciones de Supercomputación llevaron a cabo recientemente el estudio CFD Vision 2030 [68].

El estudio constituye una hoja de ruta para el desarrollo de tecnologías habilitantes como la Computación de Alto Rendimiento (HPC), modelado físico, algoritmos y métodos numéricos, generación de geometría y mallas, extracción de conocimiento, Análisis y Optimización Multidisciplinarios (MDAO) con incertidumbres cuantificadas. y pruebas experimentales para campañas de validación computacional. Se estableció un Comité de Integración CFD Vision 2030 dentro del Instituto Americano de Aeronáutica y Astronáutica (AIAA) [69], pero su alcance de promover avances revolucionarios en tecnologías de simulación computacional para el análisis, diseño, certificación y calificación de sistemas aeroespaciales es limitado. muy relevante también para los ELT. La hoja de ruta consta de varios hitos para abordar y superar ciertos desafíos con el objetivo final de simular un sistema operativo completo dentro de un período de tiempo suficiente para evaluar el éxito de la misión. La realización de la simulación y el posprocesamiento, junto con la estimación de los parámetros de rendimiento y sus incertidumbres, deberían ser uno de muchos, y el plazo de entrega debería ser de semanas, si no días. En la comunidad aeroespacial, esto significa, por ejemplo, un avión de maniobras con un motor completamente resuelto y en funcionamiento, así como subsistemas críticos como el suministro de combustible.
Una base de datos de 1.000 simulaciones creará una herramienta de retroalimentación de fidelidad múltiple en tiempo real durante el funcionamiento del sistema. En las siguientes subsecciones, revisaremos cómo esto puede traducirse en el caso de un observatorio terrestre.

Machine Translated by Google

9.1. Generación de geometría y malla

El primer paso en un proceso de modelado es establecer la fidelidad geométrica deseada de la simulación. Por supuesto, esto depende de los fenómenos físicos involucrados y del alcance de la simulación (resultados). En el caso de estudios comerciales entre múltiples opciones de diseño, las diferencias geométricas deben resolverse bien. Desafortunadamente, la definición geométrica de un componente, su representación digital (modelo CAD) y el producto fabricado real no son todos iguales debido a tolerancias y errores de traducción entre formatos de software. En ocasiones, esto puede tener implicaciones para las predicciones de rendimiento. Sin embargo, el principal desafío actual es la incompatibilidad de los modelos CAD con los requisitos de simulación. Hay varias razones para esto, la primera son los errores de tolerancia antes mencionados. Los componentes del subsistema reunidos para crear un modelo de sistema completo no siempre se combinan para crear una superficie cerrada que pueda mallarse ya sea para aire (externamente) o sólido (internamente). Los requisitos de simulación aerotérmica también podrían excluir pequeñas características que no se espera que afecten el entorno aerotérmico, pero su eliminación es engorrosa y deja huecos y agujeros que nuevamente interrumpen la continuidad de la superficie. Los desarrolladores de software moderno, tanto CAD como de simulación, están trabajando activamente en la implementación de técnicas de reparación automatizadas, pero dividir el esfuerzo entre ellos es una fuente activa de discordia. . . En lo que respecta a la simulación, pocos paquetes de software son capaces de “envolver” la geometría, dentro de cierta tolerancia, y eliminar espacios y características no deseadas. Sin embargo, esta técnica puede alterar significativamente otros detalles importantes que afectan el flujo, y la intervención manual del usuario es tediosa y requiere mucho tiempo. Como resultado, tanto TIO como GMT mantienen actualmente modelos CAD de simulación separados para subsistemas. Generar y actualizar estos modelos para que coincidan con el progreso del diseño ha sido una tarea que requiere mucha mano de obra. Para dar cabida a un número cada vez mayor de modelos y configuraciones, se deben implementar las mejores prácticas tanto de los equipos de ingeniería de sistemas como de los proveedores. Los modeladores de CAD deben comprender los requisitos de simulación y crear ensamblajes que puedan convertirse en modelos de simulación con un mínimo esfuerzo, maximizando la interoperabilidad del modelo. Los modeladores de simulación deben continuar siguiendo los avances de la metodología de reparación, especialmente en el campo del mallado de superficies.

Con una representación geométrica implementada, el siguiente paso es la generación de la malla computacional. Hay dos categorías principales de malla: superficie/normal a la superficie y volumen.
El primero dicta la precisión de las fuerzas calculadas sobre las estructuras y la disipación de calor. Este último es responsable de resolver adecuadamente los vórtices en capas de corte y estelas. La comunidad aeroespacial está trabajando activamente para lograr la adaptación automática de la malla en regiones con gradientes de alta velocidad , ya sea mediante realineación, transformación o refinamiento. Las geometrías complejas o piezas móviles se resuelven con múltiples mallas superpuestas (desbordadas) que intercambian información mediante interpolación. Minimizar el error de interpolación es otro campo activo de investigación. En este punto, definamos el objetivo de nuestra simulación de funcionamiento del observatorio: el telescopio realiza un seguimiento, luego se desplaza hacia otro objetivo con una orientación diferente y continúa el seguimiento, mientras opera las rejillas de ventilación y el parabrisas (cuando corresponda) en condiciones de viento variables.

En 2014 [70], se intentó desarrollar un modelo CFD de observatorio que acomodara todas las configuraciones, orientaciones y modos de operación con una sola malla, basada en regiones deslizantes. Tenía la capacidad de girar, abrir y cerrar las rejillas de ventilación y convertirlas a una configuración diurna para simulaciones de aire acondicionado. Sin embargo, esto se logró con ciertos compromisos geométricos y físicos. La operación de ventilación dependía de la porosidad, mientras que partes del acimut del telescopio y la estructura de elevación se eliminaron para acomodar su movimiento relativo. Además, se ha demostrado [71] que las mallas hexaédricas uniformes alineadas con el volumen óptico minimizan los errores en la estimación de la visión térmica. Por lo tanto, el overset es el único camino a seguir para una simulación transitoria de configuración variable y múltiples objetivos.

La operación de ventilación se puede lograr con morphing, ya que el movimiento es unidimensional. También podría ser necesaria una adaptación de la malla alrededor de la apertura del recinto y a la estela, especialmente cuando el telescopio apunta en dirección opuesta al viento en ángulos de elevación bajos.

Machine Translated by Google

9.2. Modelado físico, algoritmos y métodos numéricos.

El foco de la década es la representación precisa de flujos separados turbulentos e inestables , una condición común también dentro de un recinto. Se ha demostrado [45] que los modelos Reynolds-Averged Navier-Stokes (RANS) no son capaces de resolver la turbulencia óptica y que se necesitan simulaciones de remolinos separados (DES) o simulaciones de remolinos grandes (LES). Actualmente, se están realizando grandes esfuerzos hacia LES modelado y resuelto en paredes. Los vórtices, como los que observamos en la Figura 5, se resuelven mejor junto con esquemas de discretización espacial y temporal de alto orden. Los esquemas de segundo orden están siendo reemplazados por otros de tercer, cuarto o quinto orden. Los científicos computacionales deberían monitorear los avances en la implementación de estos modelos en el software disponible y emplearlos. Actualmente, los ELT emplean modelos de tercer orden.

Continúan los esfuerzos para predecir el valor asintótico de alta resolución del PSSn para la visión térmica. En el caso del TIO, con una resolución OPD nominal de ~16 mm, resolver solo el volumen óptico requiere 10 mil millones de elementos. Como resultado, ahora se consideran enfoques novedosos para caracterizar el comportamiento de visualización local de PSF a partir de un análisis espectral de mapas OPD más grueso [31,47,69]. Para ello se contará con la ayuda de estudios de validación e inteligencia artificial (ver apartados siguientes).

9.3. HPC

Las organizaciones industriales y gubernamentales invierten anualmente importantes recursos financieros en la compra de sistemas HPC a petaescala y el desarrollo de sistemas HPC a exaescala, capaces de realizar 1015 y 1018 operaciones de punto flotante por segundo (FLOPS), respectivamente. Estos esfuerzos también están transitando hacia la computación cuántica y la biocomputaci
De manera similar, se gastan importantes fondos y esfuerzos para permitir que los códigos CFD utilicen eficientemente las nuevas arquitecturas. Hay varias razones que dictan el uso de sistemas HPC para simulaciones CFD de observatorios:

- Gran volumen de simulaciones. La resolución LUT necesaria para caracterizar el rendimiento aerotérmico del observatorio (ángulos cenital y azimutal, velocidades y direcciones del viento, escenarios de liberación de calor) puede dar lugar a cientos de simulaciones y decenas de mallas. Estos LUT de rendimiento deben actualizarse cada vez que se produzca un cambio importante en el diseño y es necesario actualizar subconjuntos de ellos periódicamente para dar cabida a los estudios comerciales; por lo tanto, el plazo de respuesta requerido es de meses. • Grandes mallas
computacionales. La fluctuación del viento y la visualización térmica precisas requieren una resolución suficientemente alta, lo que da como resultado un mínimo de varias decenas de millones de elementos. Además, para estimar con precisión la transferencia neta de calor en las superficies del recinto y del telescopio, se debe habilitar el análisis de transferencia de calor conjugado, con la estructura del recinto, la estructura del telescopio y otros componentes importantes que también deben combinarse en la misma simulación. Esto duplicará el tamaño de malla requerido. Finalmente, la caracterización adecuada de GL y la interacción con el recinto requieren una malla de resolución relativamente alta que se extienda en los primeros 100 m sobre la topografía.
- Gran número de pasos de tiempo. El cálculo de PSSn de visión térmica requiere simulaciones de más de 10 minutos de tiempo virtual a una frecuencia de muestreo de 20 Hz o más, especialmente si se va a evaluar adecuadamente la respuesta de un espejo secundario adaptativo. Además, las simulaciones de transferencia de calor conjugada requieren tiempos de integración mucho más largos, lo que aumenta drásticamente el número de pasos de tiempo, donde también se desea una solución de alta fidelidad del flujo de aire

Los equipos de modelado integrado de ELT están trabajando para automatizar la generación de mallas y la configuración de la simulación mediante secuencias de comandos, una práctica que también emplean los principales fabricantes aeroespaciales . Las ejecuciones de CFD de producción se implementan en un sistema en la nube de Amazon Web Services (AWS), un grupo de nodos. La configuración del clúster de AWS depende de la cantidad de memoria y procesadores de cada nodo, el rendimiento del procesador y el ancho de banda de datos necesarios para las comunicaciones entre nodos. Después de realizar un análisis de escalabilidad, podemos decidir la cantidad de nodos del tipo específico de instancia que proporciona la memoria, los núcleos y el ancho de banda de red necesarios. El proceso automatizado configurará y creará el clúster, cargará el archivo de simulación e iniciará la ejecución del CFD. Un barrido del espacio de parámetros CFD que generalmente requie

Machine Translated by Google

realizar aproximadamente 100 ejecuciones de CFD podría fácilmente llevar a la necesidad de un clúster HPC de 500 nodos , si quisiéramos lanzar todas las ejecuciones a la vez.

Examinemos el ejemplo de una simulación GMT AWS CFD [59]. Tras el lanzamiento de una simulación, se inicia un proceso local que sincroniza los datos producidos localmente con un repositorio S3 remoto. Algunos archivos, una vez cargados en S3, activan funciones Lambda que transforman los datos de los archivos en nuevos productos de datos que son compatibles con los archivos de entrada de mensajería instantánea. Cada simulación CFD genera (actualmente) ~1 TB de datos que requieren que el disco duro local esté configurado con el mayor rendimiento de E/S de lectura/escritura disponible. Al final de cada simulación, se ejecuta un script de posprocesamiento que extrae y consume datos que solo están disponibles una vez que se completa la simulación.

Los pasos involucrados en un barrido de espacio de parámetros CFD son los siguientes: • Configurar y crear el clúster HPC con ParallelCluster (los nodos se solicitan como Instancias puntuales); • Cargue los archivos de configuración CFD al clúster; • Lanzar las simulaciones CFD en el cluster; • Para cada simulación, iniciar el proceso de sincronización; • Para cada simulación completa, postprocesar los datos de salida; • Para cada simulación completa y postprocesada, finalizar el proceso de sincronización; • Para cada simulación terminada, elimine los datos locales.

Todos estos pasos solían ser realizados manualmente por un operador que es responsable de monitorear y gestionar todo el ciclo de simulación. GMT IM está en proceso de reemplazarlos con un flujo de operación optimizado basado en eventos que se basa en los servicios de AWS para monitorear y administrar el ciclo de simulación. Como ejemplo, se carga un archivo de configuración CFD en un repositorio S3 que, a su vez, desencadenará un evento que transfiere el archivo al clúster HPC donde se ejecuta el caso CFD, y los procesos asociados se secuencian y lanzan automáticamente, lo que proporciona ahorros significativos en trabajo manual.

9.4. Extracción de conocimientos

Cada simulación HPC genera archivos de campos de temperatura 3D para visualización térmica, mapas de presión 2D en las superficies ópticas para desenfoque del viento y fuerzas integradas en varios componentes en cada paso de tiempo. Además, se guardan varias "capturas de pantalla" de contornos variables con fines de animación. Con el aumento del volumen de simulaciones, el tamaño de la malla y el número de pasos de tiempo, la manipulación y el posprocesamiento de datos se convierten en un desafío importante tanto para fines de comunicaciones como para ralentizar la simulación. Este proceso también requiere automatización. Una vez que la simulación está en camino, se requiere un proceso de sincronización con un repositorio remoto de AWS con suficiente espacio en disco para recibir los archivos de datos de salida de la simulación. Los scripts adicionales procesan posteriormente los datos de la simulación, los datos se guardan localmente, el proceso de sincronización finaliza y los datos remotos se eliminan.

9.5. Validación

El CFD Vision 2030 pidió esfuerzos para desarrollar y ejecutar pruebas experimentales integradas para respaldar una campaña de validación computacional que comparará los nuevos modelos y metodologías. La comunidad astronómica ya tiene los bancos de pruebas establecidos: los observatorios existentes. Dado el conjunto limitado de datos sobre la observación de domos para observatorios terrestres [56,57,72,73], su importante contribución a la degradación de la imagen y las limitaciones de modelado ya mencionadas, es importante continuar validando la metodología CFD y los resultados utilizando datos de telescopios en funcionamiento. Actualmente existen esfuerzos para construir instrumentos de monitoreo para ver cúpulas [73,74].

De manera similar, la estimación de la fluctuación del viento en la estructura del telescopio se basa en simulaciones CFD que no han sido completamente validadas experimentalmente. Una de las mayores incertidumbres reside en la conexión entre las fluctuaciones de presión en la superficie y los pares de torsión resultantes en la montura del telescopio. Se podrían realizar pruebas en túnel de viento con modelos físicos para validar el análisis de las fuerzas y pares impartidos al soporte por el golpe del viento.

Más específicamente, se requiere validación para los resultados del modelado dinámico de carga de viento para

Machine Translated by Google

Tanto el pistón M1 como las fuerzas de extremo superior del soporte, tanto en términos de predicción de fluctuaciones de presión diferencial como de la relación entre las fluctuaciones de velocidad, las fuerzas inestables y el par de soporte resultante.

9.6. mdao

Con un volumen de resultados de simulación CFD y mediciones de observatorios y túneles de viento, se puede crear una base de datos de fidelidad múltiple. Esto amplía los marcos estocásticos actuales para poder realizar la cuantificación de la incertidumbre para las diversas propiedades y fuentes de datos. También permitirá al observatorio utilizar esta base de datos como estimador de rendimiento y optimizador de operaciones en tiempo real. Esto será particularmente útil cuando sea necesario realizar evaluaciones de ingeniería rápidas para resolver problemas durante la puesta en servicio del observatorio.

Varias de las estrategias de mitigación de errores ya definidas, como el aire acondicionado diurno y la ventilación nocturna, dependen de insumos ambientales. El modelado actual depende de ciertas condiciones de referencia contra el viento, que además están ampliamente discretizadas en el espacio de parámetros. Sin embargo, la información utilizada por los operadores del observatorio se basará en los datos disponibles de los sensores de ingeniería y un sistema de monitoreo de las condiciones ambientales o del sitio, que describen la temperatura, la velocidad del viento, la dirección del viento, la visión atmosférica, etc. Se espera que estas mediciones se desvíen de la referencia del modelo. condiciones, y podrían verse influenciados por las instalaciones de la cumbre. Como tal, se debe formular un plan operativo para volver a hacer referencia a los LUT a estas lecturas. Se pueden emplear técnicas de análisis de sensibilidad y metodologías de redes neuronales artificiales (RNA), utilizando los resultados de la simulación en las ubicaciones de monitoreo como datos de entrenamiento, para predecir cambios en la respuesta del sistema a entradas de parámetros variables casi en tiempo real (del orden de minutos, incluso segundos). La aplicabilidad de esta herramienta en tiempo real incluirá visualización térmica y mitigación de la carga del viento mediante la operación de respiraderos y el conocimiento de las escalas de longitud de turbulencia dominantes, el error de orientación del telescopio y las estrategias de corrección de la desalineación térmica basadas en sensores de temperatura. Por lo tanto, combinado con los errores ópticos deterministas y la visión atmosférica medida actualmente, estará disponible en cualquier momento una instantánea del rendimiento del sistema en la métrica de CI elegida. Finalmente, la predicción del rendimiento podría incluso ser posible mediante el acoplamiento de los resultados a las condiciones de contorno computacionales que son resultados de un modelo atmosférico de mesoescala o de cualquier otro servicio de predicción meteorológica. En la medida en que los niveles e incluso el comportamiento temporal de la visión atmosférica, la velocidad del viento y la temperatura se puedan predecir para la noche siguiente con unas horas de antelación, se podrán generar escenarios de CI que permitan observar en cola, es decir, seleccionar el orden. de objetivos, modo de funcionamiento (ver óptica limitada o adaptativa) e instrumento durante la noche, para optimizar el coeficiente intelectual y la producción científica.

El estado del modelado aerotérmico de los observatorios, los desafíos existentes y las posibles mitigaciones se resumen en la Tabla 2. Como era de esperar, debido a la naturaleza puramente científica y sin fines de lucro de los observatorios, el principal desafío es la financiación. Una preocupación futura también puede ser el cambio climático, ya que se espera que los ELT funcionen hasta finales de siglo. Tenga en cuenta que los estudios de soporte más pequeños no son un problema y se realizan de forma rutinaria.

Tabla 2. Estado de modelación del Observatorio.

Categoría	Estado	Desafíos	Mitigaciones
Modelos de redes estocásticas y térmicas utilizando registros ambientales multianuales.	Desarrollado	Cambio climático.	Sistemas de monitoreo ambiental en sitio y actualizaciones periódicas de registros.
Modelos de transferencia de calor conjugados de subsistemas.	Parcialmente desarrollado; la mayoría de los instrumentos aún están en desarrollo, y Los CAD no están maduros	Preparación/actualización de CAD.	control de configuración CAD; malla por partes para minimizar el tiempo de actualización durante el desarrollo del diseño.

Machine Translated by Google

Tabla 2. Cont.

Categoría	Estado	Desafíos	Mitigaciones
Modelos CFD del Observatorio	Desarrollado, pero el movimiento de malla superpuesto y la adaptabilidad de la malla aún no se han implementado	Financiamiento insuficiente para recursos computacionales y/o tiempo de finalización. La simulación simultánea con muchos modelos de subsistemas es computacionalmente costosa. La simulación con la resolución OPD deseada es computacionalmente prohibitiva. Manejo de datos. Validación.	Espere una futura mayor potencia informática al mismo costo. Desarrollar modelos ROM y ANN. Procesamiento in situ. Medidas en observatorios existentes.
Modelos ROM y ANN para el funcionamiento del observatorio (fase AIVC)	Desarrollo temprano	Financiamiento insuficiente para los FTE requeridos y los recursos computacionales. La incertidumbre sobre el número de parámetros que las RNA pueden acomodar de manera estable y el número de simulaciones necesarias para el entrenamiento.	Si persiste la falta de financiación, pasar a operaciones e investigar vías de financiación alternativas. Divida en tareas más simples, pocas entradas/salidas por tarea. Software de prueba en observatorios existentes.

10. Comentarios finales

Este artículo intenta proporcionar un resumen sobre el papel que ha desempeñado el modelado aerotérmico en la astronomía terrestre durante las últimas dos décadas y sugerir una posible hoja de ruta para la próxima década.

Desde la caracterización de GL hasta la optimización aerodinámica del recinto, el aire acondicionado diurno del observatorio, el control de la liberación de calor nocturna y el apoyo al diseño de subsistemas, el modelado CFD y de transferencia de calor conjugado se han convertido en herramientas indispensables en la ingeniería de sistemas ELT. Se han realizado extensos modelos y simulaciones de sistemas para predecir el rendimiento del sistema y evaluarlo en función de presupuestos técnicos (por ejemplo, calidad de imagen, disipación de calor) y requisitos (por ejemplo, precisión de puntería, limitaciones ambientales). Estos modelos de predicción del rendimiento respaldan cuatro funciones importantes de la ingeniería de sistemas: validación de requisitos, verificación, mitigación de riesgos y estudios de compensación. Las simulaciones han influido significativamente en las elecciones de diseño de ELT. En el ámbito comercial actual, tal vez existan menos oportunidades para modificar el diseño que para respaldar la integración, la verificación, la puesta en servicio y la resolución de problemas, así como para optimizar el rendimiento a través de estrategias operativas. Sin embargo, abundan los desafíos ocultos y las nuevas oportunidades.

A medida que los proyectos continúen decididos en su camino de exploración y descubrimiento, también lo harán los esfuerzos para superar los nuevos desafíos. Utilizando técnicas novedosas y adoptando tecnologías modernas, el modelado aerotérmico permitirá realizar nuevos descubrimientos para garantizar el éxito de este innovador esfuerzo de ingeniería.

Contribuciones de los autores: Conceptualización, KV y GA; metodología, KV; software, KV y RC; validación, KV; análisis formal, KV y RC; investigación, KV; recursos, KV y RC; curación de datos , KV y RC; redacción: preparación del borrador original, KV; redacción: revisión y edición, KV; visualización, KV y RC; supervisión, GA, GT y RC; administración de proyectos, GA, GT y RC; adquisición de financiación, GA, GT y RC Todos los autores han leído y aceptado la versión publicada del manuscrito.

Financiamiento: Esta investigación fue financiada por TIO, número de contrato TIO.BUS.CON.24.063 y GMTO, número de contrato GMT-CON-01543.

Declaración de disponibilidad de datos: Los datos presentados en este estudio no están fácilmente disponibles porque residen en repositorios de acceso controlado. Algunos ya no se pueden recuperar. La mayoría de estos estudios están en curso y el diseño no está finalizado. Las solicitudes para acceder a los conjuntos de datos deben dirigirse a gtrancho@tmt.org y rconan@gmto.org.

Agradecimientos: El Observatorio Internacional TMT (TIO) agradece el apoyo de los miembros de TIO y de la Fundación Gordon y Betty Moore. Los Miembros y sus respectivas instituciones colaboradoras son los siguientes: California Institute of Technology (Caltech); el Nacional

Machine Translated by Google

Consejo de Investigación de Canadá (NRC-CNRC); la Asociación de Universidades Canadienses para la Investigación en Astronomía (ACURA); el Departamento de Ciencia y Tecnología del Gobierno de la India (DST); el Departamento de Energía Atómica de la India (DAE); el Instituto Nacional de Ciencias Naturales de Japón (NINS); el Observatorio Astronómico Nacional de Japón (NAOJ); y los Regentes de la Universidad de California (UC). Este trabajo también fue apoyado por la Asociación de Universidades para la Investigación en Astronomía (AURA) y la Fundación Nacional de Ciencias de EE. UU. (NSF).

Este trabajo fue apoyado por GMTO Corporation, una organización sin fines de lucro operada en nombre de un consorcio internacional de universidades e instituciones: la Universidad Estatal de Arizona, Astronomy Australia Ltd., la Universidad Nacional de Australia, la Institución Carnegie para la Ciencia, la Universidad de Harvard, la Instituto Coreano de Astronomía y Ciencias Espaciales, la Fundación de Investigación de São Paulo , el Instituto Smithsonian, la Universidad de Texas en Austin, la Universidad Texas A&M, la Universidad de Arizona, la Universidad de Chicago y el Instituto Weizmann de Ciencias.

Conflictos de intereses: Los autores declaran no tener ningún conflicto de intereses.

Referencias

1. Telescopio Europeo Extremadamente Grande. Disponible en línea: https://elt.eso.org (consultado el 10 de junio de 2024).
2. Telescopio Gigante de Magallanes. Disponible en línea: https://giantmagellan.org (consultado el 10 de junio de 2024). 3. Observatorio Internacional del Telescopio de Treinta Metros. Disponible en línea: https://www.tmt.org (consultado el 10 de junio de 2024).
4. Angeli, GZ; Roberts, S.; MacMynowski, D.; Fitzsimmons, J.; Dunn, J.; Vogiatzis, K.; Sheinis, A. Herramientas de modelado para estimar el rendimiento del telescopio de treinta metros: un enfoque integrado; SPIE 5497(24); SPIE: Bellingham, WA, EE. UU., 2004.
5. Conan, R.; Angeli, G.; Sitarski, B.; Dribusch, C.; Fitzpatrick, H.; Romano, H.; Vogiatzis, K.; Das, K. Enfoque GMTO para la integración Ingeniería de Sistemas Basada en Modelado; SPIE 11450(26); SPIE: Bellingham, WA, EE. UU., 2020.
6. Angeli, GZ; Vogiatzis, K. Enfoque estadístico de la ingeniería de sistemas para el telescopio de treinta metros; SPIE 7738(45); ESPÍA: Bellingham, WA, EE. UU., 2010.
7. Vogiatzis, K.; Das, K.; Sitarski, B.; Schwartz, D.; Conan, R.; Angeli, GZ Uso de un enfoque estocástico para estimar el rendimiento aerotérmico del Telescopio Gigante de Magallanes; AIAA 2019-2319; Instituto Americano de Aeronáutica y Astronáutica: Reston, VA, EE. UU., 2019.
8. Vogiatzis, K.; Angeli, GZ Marco de simulación Monte Carlo para TMT; SPIE 7017(29); SPIE: Bellingham, WA, EE. UU., 2008.
9. Sitarski, B.; Vogiatzis, K.; Conan, R.; Angeli, GZ; Goodrich, R. Estimaciones de rendimiento del Telescopio Gigante de Magallanes mediante análisis estadístico. En Actas del AO4ELT6, Ciudad de Quebec, QC, Canadá, 9 a 14 de junio de 2019.
10. Seo, B.-J.; Angeli, GZ; Nelson, J. Análisis de la sensibilidad de fuentes puntuales normalizadas como métrica de rendimiento para grandes telescopios. J. Aplica. Optar. 2009, 48, 5997–6007. [Referencia cruzada] [PubMed]
11. Angeli, GZ; Seo, BJ; Nissly, C.; Troy, M. Una métrica de rendimiento de telescopio conveniente para obtener imágenes a través de turbulencias; SPIE 8127(4); SPIE: Bellingham, WA, EE. UU., 2011.
12. Conan, R. PSSn en función de la aberración de campo y los residuos de pulido del segmento M1; GMT-DOC-01940; Corporación GMTO: Pasadena, California, EE. UU., 2017.
13. Siemens Simcenter STAR-CCM+. Disponible en línea: https://plm.sw.siemens.com/en-US/simcenter/fluids-thermal-simulation/star-ccm/ (consultado el 10 de junio de 2024).
14. MathworksMATLAB. Disponible en línea: https://www.mathworks.com/products/matlab.html (consultado el 10 de junio de 2024).
15. Zago, L. El efecto del entorno atmosférico local en las observaciones astronómicas. Doctor en Filosofía. Tesis, Escuela Politécnica Fédérale de Lausanne, Vaud, Suiza, 1995. Thèse No. 1394.
16. Vogiatzis, K.; Thompson, H.; Trancho, G. Soporte aerotérmico para los subsistemas de instalaciones de cumbres y recinto del observatorio internacional TMT; SPIE 13094(27); SPIE: Bellingham, WA, EE. UU., 2024.
17. Sitarski, B.; Vogiatzis, K. Simulaciones térmicas de dimensionamiento de HVAC; GMT-DOC-03957; Corporación GMTO: Pasadena, CA, EE. UU., 2019.
18. Vogiatzis, K.; Fitzpatrick, H.; Conan, R.; Ranka, T.; Müller, G.; Xin, B.; Ashby, D. Sistema de control térmico del espejo primario GMT y marco de modelado de deformación térmica; SPIE 13099(102); SPIE: Bellingham, WA, EE. UU., 2024.
19. Vogiatzis, K.; De Young, DS Caracterización del sitio mediante el uso de dinámica de fluidos computacional. En Actas del segundo taller de Baeckaskog sobre telescopios extremadamente grandes, Castillo de Baeckaskog, Suecia, 9 a 11 de septiembre de 2003. SPIE 5382(74).
20. Vogiatzis, K.; Hiriart, D. Modelado numérico de viento para la Sierra de San Pedro Mártir en Baja California. Rev. Méx. Astron. Astrofia. 2004, 40, 81–98.
21. Els, S.; Vogiatzis, K. Estudios TMT sobre la influencia de los cambios a corto plazo de las condiciones termodinámicas locales en la visión: CFD frente a observaciones; SPIE 6267(55); SPIE: Bellingham, WA, EE. UU., 2006.
22. Els, S.; Vogiatzis, K. Revelando el inicio de la convección en las atmósferas de los planetas terrestres. En actas de la IAU S239 Convención de Astrofísica, Praga, República Checa, 21 a 25 de agosto de 2006.
23. Els, S.; Schöck, M.; Skidmore, W.; Travouillon, T.; Acertijo, R.; Vogiatzis, K.; Wang, L.; Bustos, E.; Seguel, J.; Vásquez, J.; et al. Observaciones de la capa de tierra atmosférica turbulenta durante las pruebas del sitio para el Telescopio de Treinta Metros (TMT). En Actas del EMS 2007-A-00109, Reunión Anual de la Sociedad Meteorológica Europea y Octava Conferencia Europea sobre Aplicaciones de la Meteorología, San Lorenzo de El Escorial, España, 1 al 5 de octubre de 2007.

Machine Translated by Google

24. Els, S.; Schöck, M.; Skidmore, W.; Travouillon, T.; Acertijo, R.; Bustos, E.; Seguel, J.; Vásquez, J.; Vogiatzis, K.; Walker, D.; et al.
Las pruebas en el sitio para el telescopio de treinta metros y su papel potencial en el desarrollo del pronóstico a corto plazo de las condiciones de observación. Astron. Nachrichten 2007, 328, 7.

25. Els, SG; Vogiatzis, K.; Otarola, A.; Schöck, M.; Travouillon, T.; Acertijo, RL; Skidmore, WA Turbulencia óptica sobre las montañas vista en 3D; SPIE 7733(58); SPIE: Bellingham, WA, EE. UU., 2010.

26. Das, K.; Vogiatzis, K.; Angeli, GZ; Rosenthal, W.; Bouchez, A.; Goodrich, W. Validación del modelado aerotérmico GMT a través del sitio Medición; SPIE 10705(2); SPIE: Bellingham, WA, EE. UU., 2018.

27. Vogiatzis, K.; Thompson, H.; Roberts, S.; Dumas, C. Estudios de la capa terrestre para el sitio alternativo del TMT; SPIE 10705(61); SPIE: Bellingham, WA, EE. UU., 2018.

28. Vogiatzis, K.; Thompson, H.; Rogers, J.; Trancho, G. Sobre la relación entre visión térmica y diseño de observatorios; SPIE 12187(74); SPIE: Bellingham, WA, EE. UU., 2022.

29. De Young, DS; Vogiatzis, K. Simulaciones numéricas de flujo en recintos de telescopios extremadamente grandes. En Actas del SPIE 5382-44, Segundo taller de Baeckaskog sobre telescopios extremadamente grandes, Castillo de Baeckaskog, Suecia, 9 a 11 de septiembre de 2003.

30. MacMynowski, director general; Angeli, GZ; Vogiatzis, K.; Fitzsimmons, J.; Padin, S. Modelado paramétrico y control de la vibración inducida por el viento en telescopios; SPIE 5497(26); SPIE: Bellingham, WA, EE. UU., 2004.

31. Vogiatzis, K.; Segurson, A.; Angeli, GZ Estimación del efecto de la carga de viento en el rendimiento de telescopios extremadamente grandes mediante dinámica de fluidos computacional; SPIE 5497(30); SPIE: Bellingham, WA, EE. UU., 2004.

32. MacMynowski, director general; Blaurock, California; Angeli, GZ; Vogiatzis, K. Modelado del efecto del viento en el telescopio de treinta metros; SPIE 6271(25); SPIE: Bellingham, WA, EE. UU., 2006.

33. MacMynowski, director general; Vogiatzis, K.; Angeli, GZ; Fitzsimmons, J.; Nelson, EJ Cargas de viento en telescopios terrestres. Aplica. Optar. 2006, 45, 7912–7923. [Referencia cruzada]

34. Sebag, J.; Vogiatzis, K. Requisitos de calor de la cámara LSST mediante CFD y modelado de visión térmica; SPIE 7738(13); ESPÍA: Bellingham, WA, EE. UU., 2010.

35. Sebag, J.; Vogiatzis, K.; Barr, J.; Neill, D. Recinto de la Cumbre LSST: Optimización del diseño de instalaciones mediante modelado aerotérmico; SPIE 8449(3); SPIE: Bellingham, WA, EE. UU., 2012.

36. Cho, M.; Vogiatzis, K.; Sebag, J.; Neill, D. Respuestas del viento del espejo secundario LSST; SPIE 8449(4); SPIE: Bellingham, WA, EE. UU., 2012.

37. Sebag, J.; Vogiatzis, K. Estimación de la observación de domos para LSST; SPIE 9150(26); SPIE: Bellingham, WA, EE. UU., 2014.

38. Vogiatzis, K.; Xin, B.; Claver, C.; Angeli, GZ; Selvy, B. Análisis de sensibilidad de visualización de domos para LSST; SPIE 10705(3); ESPÍA: Bellingham, WA, EE. UU., 2018.

39. Marchiori, G.; Rampini, F.; Mián, S.; Ghedin, L.; Marcuzzi, E.; Bressan, R. Domo y telescopio ELT: descripción general del análisis de rendimiento; SPIE 10705(13); SPIE: Bellingham, WA, EE. UU., 2018.

40. Vogiatzis, K.; MacMartin, D.; Wang, L.; Trancho, G. Procedimiento de estimación del desempeño aerotérmico del Observatorio Internacional TMT; SPIE 13099(100); SPIE: Bellingham, WA, EE. UU., 2024.

41. Vogiatzis, K.; Das, K.; Angeli, GZ; Bigelow, B.; Burgett, W. Modelado computacional de dinámica de fluidos de GMT; SPIE 10705(28); SPIE: Bellingham, WA, EE. UU., 2018.

42. MacMartin, director general; Vogiatzis, K. Cargas de viento inestables para TMT: sustitución de modelos paramétricos por CFD; SPIE 9150(25); ESPÍA: Bellingham, WA, EE. UU., 2014.

43. Vogiatzis, K.; Thompson, H. Sobre la precisión del modelado aerotérmico para TMT; SPIE 9911(40); SPIE: Bellingham, WA, EE. UU., 2016.

44. Vogiatzis, K. Efectos del mallado, los parámetros del solucionador y el posprocesamiento en el modelado métrico de calidad de imagen aeroóptica; AIAA 2018-1502; Instituto Americano de Aeronáutica y Astronáutica: Reston, VA, EE. UU., 2018.

45. Das, K.; Vogiatzis, K.; Angeli, GZ Evaluación de modelos de turbulencia y refinamiento de mallas para simulaciones aeroópticas de grandes telescopios terrestres; AIAA 2018-4156; Instituto Americano de Aeronáutica y Astronáutica: Reston, VA, EE. UU., 2018.

46. Vogiatzis, K. Entorno de modelado térmico para TMT; SPIE 7738(11); SPIE: Bellingham, WA, EE. UU., 2010.

47. Vogiatzis, K.; Conan, R. Evaluación preliminar del sistema GMT HVAC mediante CFD; GMT-DOC-03938; Corporación GMTO: Pasadena, California, EE. UU., 2019.

48. Thompson, HA; Vogiatzis, K. Balance de calor y gestión térmica del Observatorio TMT; SPIE 9150(83); SPIE: Bellingham, WA, Estados Unidos, 2014.

49. Pazder, J.; Vogiatzis, K. Estimaciones de visión de cúpulas y espejos para el telescopio de treinta metros; SPIE 7017(26); SPIE: Bellingham, WA, EE. UU., 2008.

50. Conan, R.; van Dam, M.; Vogiatzis, K.; Das, K.; Bouchez, A. Modelado de la cúpula del Telescopio Gigante de Magallanes utilizando fluido simulaciones dinámicas. En Actas del AO4ELT6, Ciudad de Quebec, QC, Canadá, 9 a 14 de junio de 2019.

51. Vogiatzis, K.; Angeli, GZ Estrategias para estimar la visión en espejos y domos para TMT; SPIE 6271(27); SPIE: Bellingham, WA, EE. UU., 2006.

52. Vogiatzis, K.; Upton, R. Estudios TMT sobre modelado de visión térmica: validación del modelo de visión de espejo y cúpula; SPIE 6271(48); SPIE: Bellingham, WA, EE. UU., 2006.

53. McMynowski, director general; Colavita, MM; Skidmore, Washington; Vogiatzis, K. Modelos de perturbación dinámica del espejo primario para TMT: vibración y viento; SPIE 7738(14); SPIE: Bellingham, WA, EE. UU., 2010.

54. Vogiatzis, K.; McMynowski, DG Simulaciones aerodinámicas inestables para carga de viento en el segmento del espejo primario TMT; SPIE 7738(61); SPIE: Bellingham, WA, EE. UU., 2010.

55. Soler, M.; Vogiatzis, K.; Cózar-Castellano, J.; Bonaque, S.; Bello-Asin, M.; Núñez Cagigal, M.; Baretto Cabrera, M. Visualización Local Análisis para el Telescopio Solar Europeo; SPIE 13094(153); SPIE: Bellingham, WA, EE. UU., 2024.

Machine Translated by Google

56. Vogiatzis, K.; Otarola, A.; Skidmore, W.; Travouillon, T.; Angeli, GZ Validación del modelado de visión térmica local mediante mediciones de observatorios; SPIE 8449(1); SPIE: Bellingham, WA, EE. UU., 2012.
57. Salmón, D.; Benito, T.; Baril, M.; Wang, S.-Y.; Thanjavur, K.; Vogiatzis, K.; Racine, R. Un estudio fluidodinámico del domo CFHT mediante CFD y pruebas de túnel de agua; SPIE 8449(2); SPIE: Bellingham, WA, EE. UU., 2012.
58. Vogiatzis, K. Marco de modelado aerotérmico para TMT. En Actas del modelado integrado de sistemas optomecánicos complejos, Kiruna, Suecia, 15 a 17 de agosto de 2011. SPIE 8336(10).
59. Vogiatzis, K.; Fitzpatrick, H.; Das, K.; Conan, R.; Angeli, G.; Sitarski, B.; Romano, R.; Dribusch, C.; Muros, B. Modelado aerotérmico para soporte de diseño, validación de requisitos y evaluación del desempeño de subsistemas GMT; SPIE 12187(22); SPIE: Bellingham, WA, EE. UU., 2022.
60. Cho, M.; Corredor, A.; Vogiatzis, K.; Angeli, GZ Análisis térmico de la estructura del telescopio TMT; SPIE 7738(12); ESPÍA: Bellingham, WA, EE. UU., 2010.
61. Vogiatzis, K.; Sadjadpour, A.; Roberts, S. Modelo térmico de estructura del telescopio TMT; SPIE 9150(72); SPIE: Bellingham, WA, EE. UU., 2014.
62. Fitzpatrick, H.; Conan, R.; Vogiatzis, K.; Das, K.; Dribusch, C. Un marco computacional para el estudio del comportamiento termomecánico diurno del Telescopio Gigante de Magallanes; SPIE 13099(98); SPIE: Bellingham, WA, EE. UU., 2024.
63. Vogiatzis, K.; Boyer, C.; Wei, K.; Tang, J.; Ellerbroek, B. Simulaciones aerotérmicas de la instalación de estrellas guía láser TMT; SPIE 9148(243); SPIE: Bellingham, WA, EE. UU., 2014.
64. Vogiatzis, K.; Wang, L.; Trubey, M.; Irarrazaval, B.; Boyer, C. Modelado aerotérmico de la guía láser del Observatorio Internacional TMT Instalación Estrella; SPIE 13099(101); SPIE: Bellingham, WA, EE. UU., 2024.
65. Vogiatzis, K. Modelado de figuras con haz de iones; Documento TMT.SEN.TEC.20.070; Observatorio Internacional TMT: Pasadena, CA, EE. UU., 2020.
66. McQuillen, I.; Phelps, L. Pruebas de aceptación en fábrica y refinamiento del modelo para el conjunto de cuchillas de aire del telescopio solar Daniel K. Inouye; SPIE 10705(25); SPIE: Bellingham, WA, EE. UU., 2018.
67. Martins, D.; Holzlohner, R.; Verinaud, C.; Kleinclaus, C. Error transitorio de frente de onda debido al aire enfriado a favor del viento de las arañas telescópicas; SPIE 12187(12); SPIE: Bellingham, WA, EE. UU., 2022.
68. Estudio CFD Visión 2030. Disponible en línea: http://ntrs.nasa.gov/search.jsp?R=20140003093 (consultado el 10 de junio de 2024).
69. Sitio web del Comité de Integración AIAA CFD Vision 2030. Disponible en línea: https://cfd2030.com (consultado el 10 de junio de 2024).
70. Vogiatzis, K. Simulaciones aerotérmicas transitorias para TMT; SPIE 9150(24); SPIE: Bellingham, WA, EE. UU., 2014.
71. Vogiatzis, K.; Thompson, H.; Roberts, S. Sobre la precisión de las simulaciones aerotérmicas para TMT: revisada; SPIE 10705(4); SPIE: Bellingham, WA, EE. UU., 2018.
72. Racine, R.; Salmón, D.; Cowley, D.; Sovka, J. Espejo, cúpula y visión natural en CFHT. Publ. Astron. Soc. Pac. 1991, 103, 1020–1032. [Referencia cruzada]
73. Bustos, E.; Tokovinin, A. Dome Seeing Monitor y sus resultados para el Telescopio Blanco de 4 m; ESPIE 10700; SPIE: Bellingham, WA, EE. UU., 2018.
74. Lai, O.; Withington, K.; Chun, señor; Laugier, R. Investigación de la turbulencia de la capa del suelo y del domo en observatorios astronómicos utilizando un sensor de turbulencia óptico localizado. En Actas del Congreso de Imagenología y Óptica Aplicada, Washington, DC, EE. UU., 22 a 26 de junio de 2020.

Descargo de responsabilidad/Nota del editor: Las declaraciones, opiniones y datos contenidos en todas las publicaciones son únicamente de los autores y contribuyentes individuales y no de MDPI ni de los editores. MDPI y/o los editores renuncian a toda responsabilidad por cualquier daño a personas o propiedad que resulte de cualquier idea, método, instrucción o producto mencionado en el contenido.

Machine Translated by Google

cálculo

MDPI

Artículo

Modelo de difusión y reacción de Harrison de orden fraccionario: Dinámica de estabilidad y sincronización en tiempo finito

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

1 Departamento de Matemáticas, Universidad Al-Zaytoonah de Jordania, Ammán 11733, Jordania; m.abuhammad@zuj.edu.jo
2 Laboratorio de Matemática Aplicada y Modelamiento, Departamento de Matemáticas, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad de los Hermanos Mentouri, Constantine 25000, Argelia; bendib.issam@doc.umc.edu.dz
3 Departamento de Matemáticas, Universidad Al Zaytoonah de Jordania, Ammán 11733, Jordania; w.alshanti@zuj.edu.jo
4 Departamento de Seguridad Cibernética, Universidad Al Zaytoonah de Jordania, Ammán 11733, Jordania; a.alshanty@zuj.edu.jo
5 Departamento de Matemáticas e Informática, Universidad de Oum EL-Bouaghi, Oum El Bouaghi 04000, Argelia; ouannas.adel@univ-oeb.dz
6 Centro de Investigación de Dinámica No Lineal (NDRC), Universidad de Ajman, Ajman 346, Emiratos Árabes Unidos; s.momani@ajman.ac.ae
7 Departamento de Matemáticas, Universidad de Jordania, Ammán 11942, Jordania
* Correspondencia: amel.hioual@univ-oeb.dz

Resumen: Este estudio tiene como objetivo abordar el tema de la sincronización de tiempo finito dentro de un subconjunto específico. de sistemas de reacción-difusión de Degn-Harrison de orden fraccionario. Para lograr este objetivo, comenzamos con la introducción de un nuevo lema específico para el análisis de estabilidad en tiempo finito. Divergencia de lo existente criterios, este lema representa una extensión significativa de hallazgos anteriores, sentando las bases para investigaciones posteriores. Sobre la base de esta base, procedemos a desarrollar eficientes Controladores lineales dependientes diseñados para orquestar la sincronización de tiempo finito. Aprovechando el poder de una función de Lyapunov, derivamos condiciones nuevas y sólidas que aseguran el logro de sincronización dentro de un período de tiempo predefinido. Este enfoque innovador no sólo mejora nuestra comprensión de la sincronización de tiempo finito, sino que también ofrece soluciones prácticas para su realización en sistemas complejos. Para validar la eficacia y aplicabilidad de nuestra metodología propuesta, se realizó una extensa Se realizan simulaciones numéricas. A través de este análisis integral, pretendemos contribuir conocimientos valiosos sobre el campo de los sistemas de reacción-difusión de orden fraccionario y al mismo tiempo allanar el camino para Implementaciones prácticas en aplicaciones del mundo real.

Palabras clave: sincronización de tiempo finito; Sistemas de reacción-difusión Degn-Harrison; estabilidad en el tiempo finito; función de Lyapunov

check for updates

Cita: Hammad, MA; Bendib, I.; Alshanti, WG; Alshanty, A.; Ouannas, A.; Hioual, A.; Momani, S. Orden fraccional Degn-Harrison Modelo de reacción-difusión: finito- Dinámica temporal de la estabilidad y Sincronización. Computación 2023, 12, 144. https://doi.org/10.3390/cálculo12070144

Editores académicos: Endre Kovács, Denis Butusov y Valerii Ostrovskii

Recibido: 3 de junio de 2024
Revisado: 7 de julio de 2024
Aceptado: 10 de julio de 2024
Publicado: 12 de julio de 2024

Copyright: © 2023 por los autores. Licenciatario MDPI, Basilea, Suiza. Este artículo es un artículo de acceso abierto. distribuido bajo los términos y condiciones de los Creative Commons Licencia de atribución (CC BY) (https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

1. Introducción

Desarrollar controladores apropiados es esencial para el análisis de sistemas dinámicos, particularmente para lograr la sincronización. Los investigadores han explorado varias matemáticas. modelos para comprender los patrones de sincronización únicos de estos sistemas. Matemático Los modelos, como las ecuaciones de reacción-difusión, se emplean para describir el espacio continuo. sistemas como medios biológicos o químicos oscilantes, que revelan estructuras dinámicas complejas como bifurcaciones, patrones espaciales e inestabilidad giratoria. Los estudios sugieren que Los sistemas de reacción-difusión, que se asemejan a osciladores de baja dimensión, pueden exhibir sincronización . Por ejemplo, la referencia [1] examinó la sincronización en Degn-Harrison sistema de reacción-difusión, referencia [2] centrada en el control de sincronización en Lengyel-El sistema Epstein y la referencia [3] discutieron la sincronización en FitzHugh-Nagumo. modelo utilizando un enfoque de control específico. Durante la última década, ha habido un importante aumento del interés en los sistemas de reacción-difusión fraccionada, especialmente en lo que respecta a la sincronización [4]. Por ejemplo, en [5], la sincronización en un tipo específico de orden fraccionario

Machine Translated by Google

Los sistemas diferenciales parciales espaciotemporales se investigaron utilizando la técnica fraccionaria de Lyapunov. Además, se desarrolló un enfoque híbrido para sincronizar dos sistemas de reacción-difusión de orden fraccionario y entero, con aplicaciones a modelos químicos específicos discutidos en [6].

En este marco, han surgido diversos métodos y estrategias para abordar el desafío de sincronizar ecuaciones diferenciales parciales. Estos enfoques abarcan un amplio espectro, abarcando técnicas de control activo junto con esquemas de control lineales y no lineales, como se describe en [7,8]. Se han delineado diversas formas de sincronización, cada una con sus características y aplicaciones únicas. Estos incluyen sincronización de tiempo finito , sincronización de fase, sincronización anticipada, sincronización completa, sincronización de retardo, sincronización de función QS, sincronización proyectiva y sincronización generalizada, como se detalla en las referencias [9-11]. A través de una extensa y exhaustiva revisión de diversas metodologías, nuestro objetivo es profundizar en las complejidades de la sincronización en ecuaciones diferenciales parciales. Nuestro objetivo es dilucidar la diversa gama de enfoques que investigadores y profesionales han desarrollado y utilizado dentro de este campo. Al integrar ideas de un amplio espectro de literatura existente y sintetizar los hallazgos colectivos de numerosos estudios anteriores, aspiramos a hacer una contribución significativa a la conversación académica en curso en torno a la teoría de la sincronización.

Nuestro trabajo no sólo destaca el estado actual de la investigación, sino que también identifica vías potenciales para avances futuros, fomentando así mayores avances en esta área crítica de estudio.

La sincronización de tiempo finito se refiere a un tipo particular de sincronización en el que se logra un comportamiento coordinado entre sistemas dentro de un intervalo de tiempo finito y predeterminado. A diferencia de la sincronización tradicional, que puede requerir un período indefinido para converger, la sincronización de tiempo finito garantiza que los sistemas alcancen la sincronía dentro de un marco de tiempo definido. Este concepto encuentra aplicaciones en diversos campos, como sistemas de control, redes de comunicación y robótica. Por ejemplo, en el campo de la robótica, la sincronización de tiempo finito puede mejorar la eficiencia y la colaboración entre múltiples agentes robóticos al garantizar su movimiento coordinado dentro de un período de tiempo designado. En las redes de comunicación, la sincronización rápida es crucial para garantizar una transmisión de datos eficaz y fiable, como se destaca en las referencias [12-15]. A pesar de su importancia , la investigación sobre la sincronización en tiempo finito de sistemas espacialmente extendidos descritos por sistemas de reacción-difusión (RDS) sigue siendo limitada.

En los últimos años, se han desarrollado varios métodos numéricos para resolver eficazmente ecuaciones de reacción-difusión. Los métodos estándar como los métodos de diferencias finitas, elementos finitos y espectrales se han utilizado ampliamente debido a su robustez y eficiencia computacional [16-18]. Los avances en el análisis numérico han dado lugar a más técnicas, como el refinamiento de malla adaptativo y la computación paralela, que mejoran la precisión y eficiencia de las simulaciones. Para sistemas de orden fraccionario como el modelo de reacción-difusión de Degn-Harrison, se han propuesto métodos especializados como los métodos de diferencias finitas fraccionarias y los métodos espectrales fraccionales . Estos métodos abordan eficazmente los desafíos únicos de los derivados fraccionarios y brindan información más profunda sobre la dinámica del siste

Esta investigación presenta una contribución significativa y original al estudio de la sincronización de tiempo finito dentro de un subconjunto particular de sistemas diferenciales parciales espaciotemporales de orden fraccionario . Nuestro principal objetivo es realizar un examen exhaustivo tanto de la estabilidad en tiempo finito como de la sincronización en tiempo finito en sistemas de reacción-difusión fraccionaria interconectados. Estos sistemas se caracterizan por sus complejos comportamientos dinámicos, que están influenciados por variables espaciales y temporales, lo que los hace desafiantes pero cruciales de estudiar. Para lograr estabilidad en el tiempo finito, empleamos un método fraccionario de Lyapunov. Este enfoque implica construir una función de Lyapunov adecuada que ayude a derivar las condiciones bajo las cuales se puede alcanzar el punto de equilibrio del sistema en un tiempo finito. Este método es fundamental, ya que garantiza que el estado del sistema convergerá al equilibrio deseado dentro de un período de tiempo predeterminado, mejorando así la previsibilidad y el control de dichos sistemas. Para lograr una sincronización de tiempo finito, sugerimos un sistema lineal

Machine Translated by Google

técnica de control. Esta estrategia de control está diseñada para sincronizar los estados de los sistemas de reacción-difusión fraccionada, asegurando que exhiban un comportamiento coordinado dentro de un intervalo de tiempo finito. Nuestro enfoque es lo suficientemente general como para ser aplicable a una amplia gama de sistemas de reacción-difusión fraccionada, lo que lo convierte en una herramienta versátil para investigadores y profesionales en este campo. Para ilustrar la eficacia y practicidad de nuestros métodos de control propuestos, realizamos análisis detallados de los comportamientos de sincronización de sistemas Degn-Harrison de orden fraccionario interconectados. Estos sistemas sirven como un ejemplo representativo debido a su complejidad y relevancia en diversas aplicaciones. A través de simulaciones y análisis teóricos, demostramos cómo nuestras técnicas de control pueden lograr efectivamente una sincronización de tiempo finito, validando así la solidez y aplicabilidad de nuestro enfoqu

El artículo está estructurado de la siguiente manera: en la Sección 2, profundizamos en los principios fundamentales del cálculo fraccionario, brindando a los lectores una comprensión integral de los fundamentos matemáticos esenciales para comprender las discusiones posteriores. La sección 3 proporciona una descripción de los modelos de Degn-Harrison. La sección 4 tiene como objetivo investigar la estabilidad en tiempo finito de los puntos de equilibrio en modelos de reacción-difusión. Este análisis es crucial para comprender el comportamiento transitorio del sistema y determinar si puede alcanzar un estado estable en un tiempo finito. Las implicaciones prácticas de este análisis son significativas, incluidas aplicaciones en el diseño de sistemas de control, formación de patrones en procesos químicos y biológicos y sincronización de sistemas dinámicos. La sección 5 se centra en establecer un esquema de sincronización de tiempo finito para sistemas de reacción-difusión, específicamente a través del estudio del sistema de reacción-difusión de Degn-Harrison. La Sección 6 presenta un conjunto diverso de ejemplos para ilustrar los principios de estabilidad de tiempo finito y sincronización de tiempo finito dentro del sistema Degn-Harrison.

2. Herramientas básicas

El objetivo de esta sección es presentar las definiciones fundamentales y los teoremas clave asociados con el cálculo fraccionario, que son esenciales para comprender el análisis posterior.

Definición 1 ([21,22]). El operador integral de orden fraccionario de Riemann-Liouville de una función integrable arbitraria E se puede definir como:

$$ {}^{yo}{}_{z}\, mi(z) = \frac{1}{\Gamma(\ )} \int_{0}^{z} (z-\varsigma)^{\ -1} mi(\varsigma)d\varsigma, \tag{1} $$

donde $z \geq 0$, $0 <$ < 1 y $\Gamma(.)$ es la función gamma.

Definición 2 ([21,22]). La derivada fraccionaria de Caputo de E se define como:

$$ {}^{do}_{0}{}^{re}_{z}\ mi(z) = \frac{1}{\Gamma(1-\ )} \int_{0}^{z} (z-\varsigma)^{\ re-} \frac{}{d\varsigma} mi(\varsigma)d\varsigma, \tag{2} $$

donde $0 <$ < 1.

Consideremos el siguiente sistema no lineal de orden fraccionario:

$$ \begin{aligned} &{}^{c}_{0}D_{z}\, mi(z) = \chi\ (z, mi(z)), \qquad (0, 1), z > 0, \\ &E(0) = E0. \end{aligned} \tag{3} $$

donde $\chi\ : Rn \to Rn$, $E(z)$ Rn y un, y ${}^{C}_{0}D_{z}$ es la derivada fraccionaria de Caputo de orden , punto E $\chi\ (E$ Rn es un punto de equilibrio de un sistema no lineal de orden fraccionario (3) si $) \equiv 0$.

Definición 3 ([23]). E se denomina punto de equilibrio inicial de orden fraccionario no lineal o sistema (3) si $E0 = E$, equivalentemente, $E(z) \equiv E$, z $[z$, $+\infty)$.

Machine Translated by Google

Definición 4 ([23]). E se denomina punto de equilibrio de tiempo finito de orden fraccionario no lineal > (3) si hay una z 0, tal que E(z) = E ,z [0,z), y E(z) ≡E , z [z , +∞).sistema

Definición 5 ([23]). Supongamos que D Ωes una vecindad abierta de 0, si hay una función z (E0) : D\{0} → R llamada tiempo de fraguado que satisface las condiciones futuras, entonces E se llama estable de tiempo finito punto de equilibrio del sistema (3). 1. E0 D\{0},

E(z) = E(z, E0) D\{0}, z [0,z (E0)), limz→z (E0) E (z) = 0, y
E(z) ≡0 para z [z (E0), +∞).

2. Para cada vecindad abierta Uε de 0, existe un subconjunto abierto Uδ que contiene 0 en D, tal que para E0 Uδ\{0} y z [0,z (E0)), E(z) = E(z, E0) Uε .

Teorema 1 ([23]). E es un punto de equilibrio de estabilidad en tiempo finito de los sistemas no lineales de orden fraccionario (3) si existe una función de Lyapunov diferenciable L : [0, +∞) × Ω→R+. tres funciones de clase M β1, β2, β3 y δ > 0 tales que 1. β1 E(z)

≤ L(z, E(z)) ≤ β2 E(z) , 2. L
(z, E(z)) < −β3E(z, E(z)), < +∞,
3. 0 $\frac{dE}{\beta 3(E)}$ (: 0 < ≤ δ).

Lema 1 ([24,25]). Para todo E(z) Rn y (0, 1), se cumple la siguiente desigualdad

$$C_{0}D_{z}^{re}\ mi^{t}(z)E(z) \le 2E^{t}(z)\,{}_{0}^{C}D_{z}\ mi(z),\ z \ge 0. \tag{4}$$

Definición 6 ([26]). La función Mittag-Leffler con > 0 anotada por E y definida por

$$mi\ (z) = \sum_{j=0}^{+\infty} \frac{z}{\Gamma(\ j + 1)}, \tag{5}$$

Teorema 2 ([27]). Sea L(z) una función definida positiva y continua que satisface

$$_{0}^{do}D_{z}^{re}\ L(z) \le -QL(z), \quad z \ge 0, \tag{6}$$

donde 0 < < 1 y Q es una constante positiva. Entonces,

$$L(z) \le L(0)E\ _{\ }\ (-Qz\ ,\ z\ [0,z\ ), \tag{7}$$

donde E es una función de Mittag-Leffler, con el tiempo de fraguado.

$$z\ = \left(\frac{\Gamma(\ + 1)}{q}\right)^{-1}, \tag{8}$$

Además, L(0) es positivo y L(z) = 0 para z ≥ z .

3. Descripción de los Modelos

El sistema Degn-Harrison ilustra el proceso de reacción que involucra dos sustancias: oxígeno, denominado E1, y un nutriente, denominado E2. Un aspecto clave de este sistema es que un exceso de oxígeno inhibe la respiración, lo que está representado por una función de

$\frac{}{E1\ 1 + \ _{1}^{2}}$ frecuencia no lineal . Esta función captura el efecto de saturación, donde la influencia inhibidora d
qE el oxígeno aumenta con su concentración, pero se estabiliza debido a la presencia del término cuadrático en el denominador.

Considerando que fenómenos inhibidores similares pueden describirse utilizando datos comparables.

Esquemas de reacción E1 , ampliamos la ley inhibidora usando la misma función no lineal 1 + qE $\frac{}{_{1}^{2}}$.

Machine Translated by Google

Esta extensión permite modelar una gama más amplia de procesos de reacción donde la inhibición juega un papel crucial.

El modelo de reacción-difusión establecido sobre la base de esta ley inhibidora extendida se conoce como modelo de reacción-difusión de Degn-Harrison. Este modelo se caracteriza por ecuaciones diferenciales parciales que describen la evolución espacial y temporal de las concentraciones de E1 y E2. Las ecuaciones que rigen el modelo de reacción-difusión de Degn-Harrison vienen dadas por:

$$\begin{aligned} &{}_{0}^{do}D \quad E1(r,z) = k1\Delta E1 + a - E1 - z\,1{+}qE \quad \frac{E1E2_{z:}}{1} && r \quad \Omega z > 0, \\ &{}_{0}^{c}D_{z}\, E2(r,z) = k2\Delta E2 + b - \partial E2 \quad \frac{E1E2}{1+qE\ \frac{2}{1}}, && r \quad \Omega z > 0, \\ &\frac{\partial E1}{\partial r} = \frac{= 0,}{\partial r} && r \quad \partial\Omega z > 0, \\ &E1(r,0) = E1{,}0(r) > 0,\ E2(r,0) = E2{,}0(r) > 0,\ r \quad \Omega \end{aligned} \tag{9}$$

En este contexto, Ωrepresenta un dominio acotado en Rn con un límite suficientemente suave, denotado como ∂Ω Los coeficientes k1 y k2 indican las velocidades de difusión de los reactivos E1 y E2, respectivamente. El parámetro q actúa como un factor de escala que influye en la fuerza de interacción entre las variables E1 y E2. Estos coeficientes de difusión son parámetros cruciales que determinan la rapidez con la que las sustancias se propagan por el dominio Ω

Se supone que las constantes a, b, q, k1 y k2 son positivas durante todo el proceso de reacción. Estas constantes suelen representar parámetros de velocidad de reacción y otras características específicas de la cinética del sistema.

El operador de Laplace, que explica la difusión espacial de los reactivos, es denotado por Δ. En un espacio n-dimensional, el operador de Laplace se define como:

$$\Delta = \sum_{yo=1}^{nnn} \frac{\partial 2}{\partial r_{2\ yo}},$$

2 donde $\frac{\partial}{i}$ representa la segunda derivada parcial con respecto a la i-ésima coordenada espacial ∂r 2 ri . Las referencias [28,29] proporcionan más antecedentes matemáticos y aplicaciones del operador de Laplace en sistemas de reacción-difusión, enfatizando su importancia al describir los aspectos espaciales del proceso.

El modelo de reacción-difusión, que incorpora estas definiciones y supuestos, es crucial para analizar el comportamiento del sistema Degn-Harrison bajo la influencia de la difusión y las reacciones no lineales. La formulación precisa del modelo permite un estudio detallado de la dinámica y las propiedades de sincronización del sistema dentro del dominio Ω

4. Análisis de estabilidad

El objetivo de investigar los puntos de equilibrio de estabilidad de tiempo finito en modelos de reacción-difusión es comprender el comportamiento transitorio del sistema y determinar si puede alcanzar un estado estable dentro de un marco de tiempo finito. Este tipo de análisis es crucial para predecir el comportamiento del sistema durante períodos de tiempo limitados, lo que tiene implicaciones importantes para diversas aplicaciones prácticas. Estas aplicaciones incluyen el diseño de sistemas de control, la formación de patrones en procesos químicos y biológicos y la sincronización de sistemas dinámicos.

En nuestro estudio, nos centramos en un punto de equilibrio único, que sirve como solución al siguiente sistema de ecuación (10). Al analizar este punto de equilibrio, podemos obtener información sobre las propiedades de estabilidad y sincronización de la reacción-difusión.

Machine Translated by Google

sistema. Este análisis ayuda a garantizar que el sistema alcance rápidamente el estado deseado y lo mantenga a pesar de la presencia de perturbaciones o variaciones en las condiciones iniciales.

$$\begin{aligned} k1\Delta E_1 + a - E_1 - \frac{E\ mi_2}{1\ 1+qE_1^2} &= 0, \\ k2\Delta E_2 + b - \frac{mi_1\ mi_2}{1+qE_1^2} &= 0, \end{aligned} \tag{10}$$

El único punto de equilibrio de los sistemas (10) viene dado por

$$mi = (mi_{1,}\ mi_2) = un\text{ - }segundo,\ segundo\ \frac{1 + q(a - b)^2}{un\text{ - }segundo}, \tag{11}$$

Lema 2 ([30]). Se cumple la siguiente desigualdad

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

dónde

$$P \ge máx. \quad \frac{5}{4}K, \frac{1}{2\sqrt{q}}, E2 < K. \tag{13}$$

Lema 3 ([31]). Ωes una región acotada en Rm con un límite suave denotado por ∂Ω que (Ω, representa una pertenece a la clase C^2 Entonces, 0 función de valor real, y $\partial\Xi(r) \cdot \Xi(r)$ H1 $|\partial\Omega = 0$. $\frac{}{\partial\eta}$

$$\zeta 1 \int_\Omega |\Xi(r)|^2 \le doctor \int_\Omega |\ \Xi(r)|^2 dr, \tag{14}$$

donde ζ1 se determina como el valor propio positivo del siguiente problema:

$$\begin{aligned} -\Delta\Xi(r) &= \zeta\Xi(r), r \quad \Omega, \partial\Xi(r)\ r \\ \frac{\partial\Omega}{} &= 0, \partial\eta \end{aligned} \tag{15}$$

Teorema 3. El punto de equilibrio E = a − b, b $\frac{1 + q(a - b)^2}{un\text{ - }segundo}$ representa un estable de tiempo finito punto de equilibrio de los sistemas no lineales de orden fraccionario (9), siempre que se cumplan las siguientes condiciones :

$$|E2| < K, P \ge máx. \quad \frac{5}{4}K, \frac{1}{2\sqrt{q}}, mín\{k1\zeta 1 - 2P + 1, k2\zeta 2 - 2P\} > 0. \tag{16}$$

El tiempo de estabilidad en tiempo finito del punto de equilibrio se estima como

$$z_1 = \frac{L2(0)}{2\ min\{k1\zeta 1 - 2P + 1, k2\zeta 2 - 2P\}L2(zmáx)}. \tag{17}$$

Prueba. Construimos la función de Lyapunov positiva de la siguiente manera:

$$L2(z) = \frac{1}{2}\int_\Omega (E1 - E_1)^2 + (E2 - E_2)^2 dr, \tag{18}$$

donde 0Dz denota la derivada normal. Según el Lema 2, obtenemos:

Machine Translated by Google

$$0DzL2(z) = \frac{1}{2}\int_{\Omega} 0Dz(E1 - E_{1})^{2} + 0Dz(E2 - E_{2})^{2}\,dr.$$

$$= \int_{\Omega}(E1 - E_{1})0Dz(E1 - E_{1})\,dr + \int_{\Omega}(E2 - E_{2})0Dz(E2 - E_{2})\,dr$$

$$= \int_{\Omega}(E1 - E_{1})\,k1\Delta(E1 - E_{1}) - (E1 - E_{1}) - \frac{E1E2}{1 + qe_{1}^{2}} - \frac{mi_{1}mi_{2}}{1 + qe_{1}}\,dr.$$

$$+ \int_{\Omega}(E2 - E_{2})\,k2\Delta(E2 - E_{2}) - \frac{E1E2}{1 + qE_{1}^{2}} - \frac{mi_{1}mi_{2}}{1 + qe_{1}}\,dr.$$

$$\leq \int_{\Omega}(E1 - E_{1})(k1\Delta(E1 - E_{1}) - (E1 - E_{1}))\,dr + \int_{\Omega}|E1 - E_{1}|\frac{E1E2}{|1 + qe_{1}^{2}} - \frac{mi_{1}mi_{2}}{1 + qe_{1}^{2}}\,dr. \quad (19)$$

$$+ \int_{\Omega}(E2 - E_{2})k2\Delta(E2 - E_{2})\,dr + \int_{\Omega}|E2 - E_{2}|\frac{E1E2}{|1 + qe_{1}^{2}} - \frac{mi_{1}mi_{2}}{1 + qe_{1}^{2}}\,dr.$$

$$\leq k1\int_{\Omega}(E1 - E_{1})\Delta(E1 - E_{1})\,dr - \int_{\Omega}(E1 - E_{1})^{2}\,dr.$$

$$+ P\int_{\Omega}|E1 - E_{1}|(|E1 - E_{1}| + |E2 - E_{2}|)$$

$$+ k2\int_{\Omega}(E2 - E_{2})\Delta(E2 - E_{2})\,dr + P\int_{\Omega}|E2 - E_{2}|(|E1 - E_{1}| + |E2 - E_{2}|)\,dr.$$

Usando la fórmula de Green, logramos:

$$0DzL2(z) \leq -k1\int_{\Omega}|(E1 - E_{1})|^{2}\,dr - k2\int_{\Omega}|(E2 - E_{2})|^{2}\,Dr - (1 - P)\int_{\Omega}(E1 - E_{1})^{2}\,dr.$$

$$+ P\int_{\Omega}(E2 - E_{2})^{2}\,doctor + 2P\int_{\Omega}|E1 - E_{1}||E2 - E_{2}|\,dr.$$

$$\leq -k1\int_{\Omega}|(E1 - E_{1})|^{2}\,dr - k2\int_{\Omega}|(E2 - E_{2})|^{2}\,Dr - (1 - P)\int_{\Omega}(E1 - E_{1})^{2}\,dr. \quad (20)$$

$$+ P\int_{\Omega}(E2 - E_{2})^{2}\,Dr + P\int_{\Omega}|E1 - E_{1}|^{2} + |E2 - E_{2}|^{2}\,dr.$$

$$\leq -k1\int_{\Omega}|(E1 - E_{1})|^{2}\,dr - k2\int_{\Omega}|(E2 - E_{2})|^{2}\,Dr - (1 - 2P)\int_{\Omega}(E1 - E_{1})^{2}\,dr.$$

$$+ 2P\int_{\Omega}(E2 - E_{2})^{2}\,dr.$$

Usando el Lema 3, obtenemos:

$$0DzL2(z) \leq -(k1\zeta 1 - 2P + 1)\int_{\Omega}(E1 - E_{1})^{2}\,dr - (k2\zeta 2 - 2P)\int_{\Omega}(E2 - E_{2})^{2}\,dr.$$

$$\leq -2\min\{k1\zeta 1 - 2P + 1, k2\zeta 2 - 2P\}L2(z). \quad (21)$$

Sea $\beta 3,1 = 2\min\{k1\zeta 1 - 2P + 1, k2\zeta 2 - 2P\}$ una constante estrictamente positiva. De este modo,

$$\int_{0}^{1}\frac{}{}\,d\varsigma = <\ +\infty, \beta 3,1\ 2\ \min\{k1\zeta 1 - 2P + 1, k2\zeta 2 - 2P\} \quad (22)$$

La función de Lyapunov L2 es decreciente en el intervalo $0 \leq z < z_{1} \leq zmáx$. Este implica que $L2(z) > L2(z_{1}) > L2(zmax)$. Además, tenemos:

$$L2(z) \leq L2(0) - 2\min\{k1\zeta 1 - 2P + 1, k2\zeta 2 - 2P\}\int_{0}^{z} L2(s)\,d\varsigma$$

$$\leq L2(0) - 2\min\{k1\zeta 1 - 2P + 1, k2\zeta 2 - 2P\}\int_{0}^{z} L2(zmáx)\,d\varsigma$$

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

Machine Translated by Google

Aplicando las Definiciones 4 y 5, cuando z se aproxima a z L2(z) 1 , la función L2(z) tiende a cero: (23)

$$\lim_{z \to z_1} \leq L2(0) - 2\min\{k1\zeta 1 - 2P + 1, k2\zeta 2 - 2P\}L2(zmax)z = 0. \quad 1$$

El tiempo de asentamiento se puede definir como:

$$z\,1 = \frac{L2(0)}{2\min\{k1\zeta 1 - 2P + 1, k2\zeta 2 - 2P\}L2(zmáx)}.$$

Por lo tanto, E = a − b, b a−b $\frac{1+q(a-b)}{}^{2}$ representa un punto de equilibrio estable en tiempo finito de los sistemas no lineales (9), como se establece en el Teorema 1. □

5. Esquema de sincronización de tiempo finito

El objetivo de la sincronización de tiempo finito en sistemas de reacción-difusión es lograr un comportamiento coordinado entre los elementos del sistema dentro de un tiempo específico y limitado . Esto garantiza que los sistemas se sincronicen dentro de un período de tiempo definido, lo cual es esencial para diversas aplicaciones, como el diseño de sistemas de control, la generación de patrones y la sincronización en redes complejas.

En este estudio, exploramos la respuesta del sistema de reacción-difusión de Degn-Harrison, que se rige por un conjunto de ecuaciones diferenciales parciales que incorporan términos de reacción y procesos de difusión no lineales. El comportamiento del sistema se describe por:

$$\begin{aligned}
&{}_0^c D_z\, E^{-}1(r,z) = k1\Delta E^{-}1 + a - E^{-}\ \frac{E^{-}1E^{-}2}{1+qE^{-}2}\ 1 + C1,\ 1 - \quad r \quad \Omega z > 0,\\
&{}_0^c D_z\, E^{-}2(r,z) = k2\Delta E^{-}2 + b - \frac{E^{-}1E^{-}}{2\ 1+qE^{-}2_1} + C2, \quad r \quad \Omega z > 0,\\
&\partial E^{-}_1 = \partial E^{-}_2 = 0, \quad r \quad \partial\Omega z > 0,\ E^{-}\\
&mi^{-}1(r,0) = mi^{-}1{,}0(r) > 0, \quad 2(r,0) = E^{-}2{,}0(r) > 0,\ r \quad \Omega
\end{aligned} \tag{24}$$

Se consideran las discrepancias de sincronización en las ecuaciones (9) a (24) .

$$mi(r,z) = \begin{matrix} e1 \\ e2 \end{matrix} = \begin{matrix} Mh1 - E1 \\ Mh2 - E2 \end{matrix}, \tag{25}$$

En la discusión siguiente, determinaremos los controladores lineales C1 y C2 que impulsan la solución del sistema de error hacia cero cuando z se aproxima a z. ·

Definición 7 ([32,33]). Si hay un parámetro de tiempo específico z > 0 tal que

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

y

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

entonces los sistemas de respuesta derivada (9)-(24) se sincronizan en un tiempo finito.

Teorema 4. Los sistemas maestro-esclavo, indicados por las ecuaciones (9) y (24), alcanzan estados estables y sincronizados dentro de una duración finita mediante la utilización de una ley de control lineal bidimensional.

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

y el tiempo de sincronización se estima como

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

Machine Translated by Google

Prueba. Integrando el control descrito en el teorema en el sistema de errores, obtenemos la siguiente dinámica:

$$\begin{aligned}
&{}_0^C D_z\, e1(r,z) = k1\Delta e1 - 2Pe1 - \frac{\bar{E}\,1\bar{E}}{2\,1+q\bar{E}\,2|} - \frac{E1E2}{1+qE_1^2}, && r \in \Omega, z > 0,\\
&{}_0^C D_z\, e2(r,z) = k2\Delta e2 - 2Pe2 - \frac{\bar{E}\,1\bar{E}}{2\,1+q\bar{E}\,2|} - \frac{E1E2}{1+qE_1^2}, && r \in \Omega, z > 0,\\
&\partial e1 = \partial e2 = 0, && r \in \partial\Omega, z > 0,
\end{aligned} \tag{30}$$

$$e1(r,0) = \bar{E}\,1,0(r) - E1,0(r),\ e2(r,0) = \bar{E}\,2,0(r) - E2,0(r),\ r \in \Omega$$

Empleamos el método directo de Lyapunov junto con una función de Lyapunov definida positiva.

$$L3(z) = 2\int_\Omega^{\bar{1}} {}^{2\,2+ee}_{1\,2}\, dr, \tag{31}$$

Usando los Lemas 1 a 3, tenemos:

$$\begin{aligned}
{}_{0\,z}^{C_{re}} L3(z) &= 2\int_\Omega^{\bar{1}} {}_z^C D_{mi\,0}^2\, 1\, dr + 2\int_\Omega {}_{2\,z}^C D_{mi\,0}^2\, dr.\\
&\le \int_\Omega e10\underline{D}_z\, e1\, dr + \int_\Omega e20\underline{D}_z\, e2\, dr\\
&= \int_\Omega e1\, k1\Delta e1 - 2Pe1 - \frac{\bar{E}\,1\bar{E}}{2\,1+q\bar{E}\,2|} - \frac{E1E2}{1+qE_1^2}\, dr.\\
&+ \int_\Omega e2\, k2\Delta e2 - 2Pe2 - \frac{\bar{E}\,1\bar{E}}{2\,1+q\bar{E}\,2|} - \frac{E1E2}{1+qE_1^2}\, dr.\\
&\le k1\int_\Omega e1\Delta e1\, dr + k2\int_\Omega e2\Delta e2\, dr - 2P\int_{1\,\Omega} {}^{y^2}\, dr - 2P\int_\Omega {}^{2^2\, dr\, y}\\
&+ \int_\Omega 1\bar{E}\,2\,(|e1| + |e2|)\,\frac{\bar{E}}{1+q\bar{E}\,2|} - \frac{E1E2}{1+qE_1^2}\, dr.\\
&\le -k1\int_\Omega |e1|^2\, dr - k2\int_\Omega |e2|^2\, dr - 2P\int_\Omega {}^{2\,2+ee}_{1\,2}\, dr.\\
&+ P\int_\Omega (|e1| + |e2|)\,\bar{E}\,1 - E1 + \bar{E}\,2 - E2\, dr\\
&\le -k1\int_\Omega |e1|^2\, dr - k2\int_\Omega |e2|^2\, dr - 2P\int_\Omega {}^{2\,2+ee}_{1\,2}\, doctor + 2P\int_\Omega |e1|^2 + |e2|^2\, dr.\\
&\le -k1\zeta 1\int_\Omega {}^{y^2}_1\, dr - k2\zeta 2\int_\Omega {}^{2^2\, dr\, y}\\
&= -2\min\{k1\zeta 1, k2\zeta 2\}L3(z).
\end{aligned} \tag{32}$$

A medida que el parámetro se acerca a 1 desde la izquierda, aparece la ${}_0^C D_z\, L3(z)$ converge a expresión 0DzL3(z) [34]. Esta convergencia implica

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

donde β3,2 = 2 min{k1ζ1,k2ζ2} es una constante estrictamente positiva. En consecuencia, podemos derivar

$$\int_0^{\frac{1}{}} d\varsigma = <\!\!\not{+\infty}, 2\min\{k1\zeta 1, k2\zeta 2\}\,\beta 3,2 \tag{34}$$

Usando el Teorema 1, establecemos que la solución cero del sistema de error (30) indica estabilidad en tiempo finito del punto de equilibrio (e1, e2) = (0, 0). Además, empleando el teorema 2, inferimos:

Machine Translated by Google

$$L3(z) \le L3(0)E \quad -2\min\{k1\zeta 1, k2\zeta 2\}z \quad , \quad z \quad [0, z \quad 2), \tag{35}$$

con el tiempo de asentamiento

$$z\,2 = \frac{\Gamma(\quad + 1)}{2\min\{k1\zeta 1, k2\zeta 2\}}^{-1},$$

cuando $z \ge z_2 = \frac{\Gamma(\quad +1)}{2\min\{k1\zeta 1, k2\zeta 2\}}^{-1}$, podemos concluir que

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

En consecuencia, los sistemas amo-esclavo, denotados por las ecuaciones (9) y (24), alcanzan estados estables y sincronizados dentro de una duración finita según la Definición 7. □

6. Ejemplos numéricos con simulaciones

En esta sección, presentamos un conjunto diverso de ejemplos para ilustrar los principios de estabilidad de tiempo finito y sincronización de tiempo finito dentro del sistema Degn-Harrison. Estos ejemplos exploran varios escenarios, incluidas diferentes condiciones iniciales, valores de parámetros y estrategias de control, lo que ofrece información sobre el comportamiento del sistema. A través de análisis detallados y simulaciones numéricas, nuestro objetivo es proporcionar una comprensión integral de cómo se manifiestan la estabilidad y la sincronización en tiempos finitos en contextos prácticos, arrojando luz sobre la dinámica del sistema Degn-Harrison.

Las simulaciones numéricas en estos ejemplos se realizan utilizando el método de diferencias finitas, una herramienta crucial para analizar sistemas de reacción-difusión de Degn-Harrison de orden fraccionario. Este método discretiza ecuaciones diferenciales parciales en ecuaciones algebraicas, lo que permite una aproximación numérica precisa y un modelado detallado de la dinámica del sis Al facilitar simulaciones de fenómenos complejos, análisis de estabilidad y optimización de parámetros, el método de diferencias finitas mejora nuestra comprensión de los sistemas químicos y biológicos.

Ejemplo 1. Definimos el dominio Ω= [0, 25] y el parámetro z que van desde [0, 100]. Los valores de los parámetros se seleccionan de la siguiente manera:

Variable	Valor
k1	1
k2	1
a	0,78
b	0.01275
q	0,75
P	0,5774
	104
	104
ζ1 ζ2	0,99
norte	150

con condiciones iniciales:

$$E1,0(r) = 0,5(1 - \cos(5r)),$$
$$E2,0(r) = 0,15(1 - \text{sen}(4r)). \tag{37}$$

Se cumplen las condiciones del Teorema 3 :

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

$$\text{mín}\{k1\zeta 1 - 2P + 1, k2\zeta 2 - 2P\} = 9,9988 \times 103\ . \tag{38}$$

Machine Translated by Google

Al calcular obtenemos:

$$\begin{matrix} L2(0) = 16,8056, \\ L2(100) = 8,4449 \times 10{-}6 \end{matrix} \quad , \tag{39}$$

El tiempo de estabilidad en tiempo finito del punto de equilibrio se estima como:

$$z_1 = \frac{L2(0)}{-2P\}L2(100)} = 99,5134s, \ 2\min\{k1\zeta 1 - 2P + 1, k2\zeta 2 \tag{40}$$

dónde

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

Las figuras presentadas en las Figuras 1 y 2 representan las soluciones espaciotemporales del sistema (9) con condiciones de contorno de Neumann homogéneas. Según el Teorema 3, estas soluciones ejemplifican la estabilidad en el tiempo finito en el punto de equilibrio E = (0,7672, 0,0240). Para validar numéricamente esta afirmación, la Figura 3 muestra las soluciones espaciotemporales del sistema junto con los errores correspondientes, centrándose específicamente en el espacio unidimensional. Esta representación visual ilustra de manera convincente que la función de Lyapunov converge a cero cuando z se aproxima a z = 99,5134 s (como se muestra en la Figura 4).

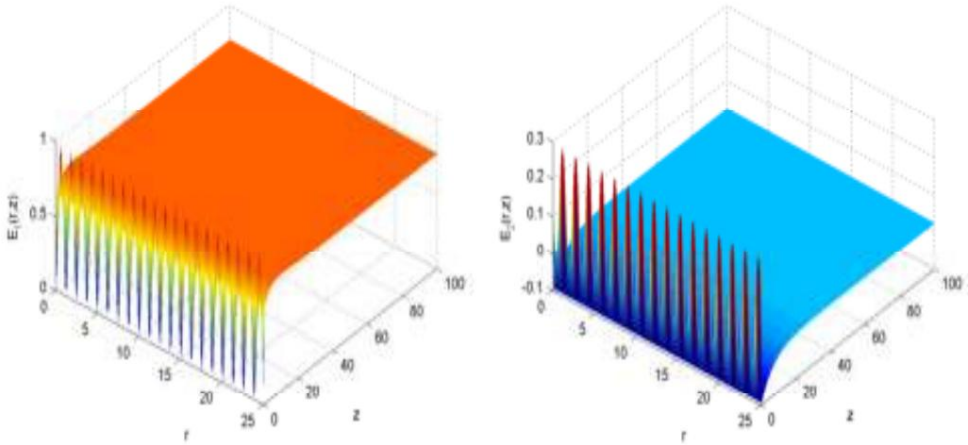


Figura 1. Comportamiento dinámico del sistema (9): E1(r,z) y E2(r,z).

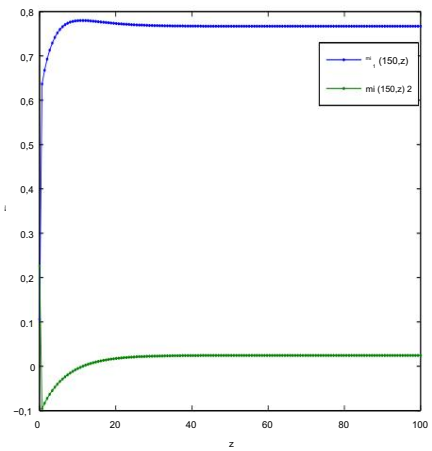


Figura 2. Soluciones del sistema (9): E1(150,z), E2(150,z).

Machine Translated by Google

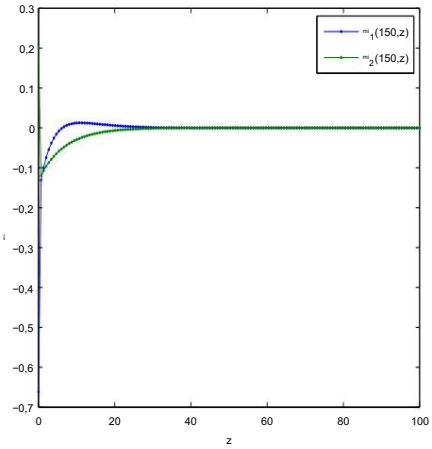


Figura 3. Soluciones del sistema de errores (9): e1(150,z), e2(150,z).

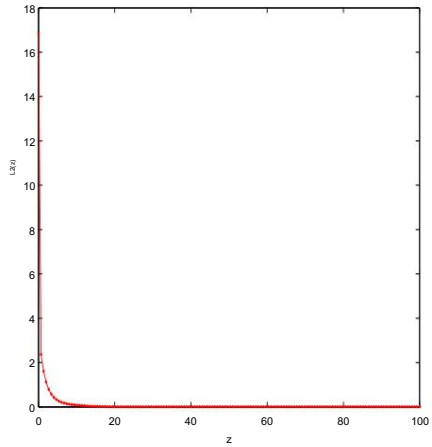


Figura 4. Estimación de la función de Lyapunov L2(z) .

Ejemplo 2. Los parámetros se especifican de la siguiente manera:

Parámetro	Valor
k1	0,1885
k2	0,1885
a	3
b	1.25
q	1
	0,9
P	3.7
ζ1	0,6
ζ2	0,6
norte	50

con el dominio Ω= [0, 10] y z [0, 5]. Las condiciones iniciales para los sistemas maestro-esclavo (9) y (24) se establecen de la siguiente manera:

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

Nuestro objetivo es formular dos controladores, denominados C1 y C2, como se describe a continuación:

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

Machine Translated by Google

tenemos L3(0) = 12,5 y

$$L3(z) \le M(z) = 12{,}5E0{,}9 - 0{,}2262z^{0{,}9}, \quad z \in [0, z_2), \tag{44}$$

El tiempo de sincronización se estima como:

$$z_2 = \left(\frac{\Gamma(\quad + 1)}{2 \min\{k1\zeta 1, k2\zeta 2\}} \right)^{-1} = 4{,}9937 \text{ s}, \tag{45}$$

y

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

donde 4.9937 ≤ z ≤ 5. Podemos concluir que

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

Las Figuras 5 a 7 muestran la dinámica espaciotemporal de los sistemas (9) y (24), proporcionando información sobre espacios tanto bidimensionales como unidimensionales. Para proporcionar evidencia numérica, presentamos las soluciones espaciotemporales del sistema de sincronización de errores (30) en las Figuras 7 y 8. Esta evolución demuestra claramente que los errores convergen a cero cuando z se aproxima a z_2 = 4,9937 s, ilustrando así el comportamiento en tiempo finito de el sistema. Además, la Figura 9 ejemplifica esta convergencia de tiempo finito dentro de la duración especificada z_2 = 4,9937 s.

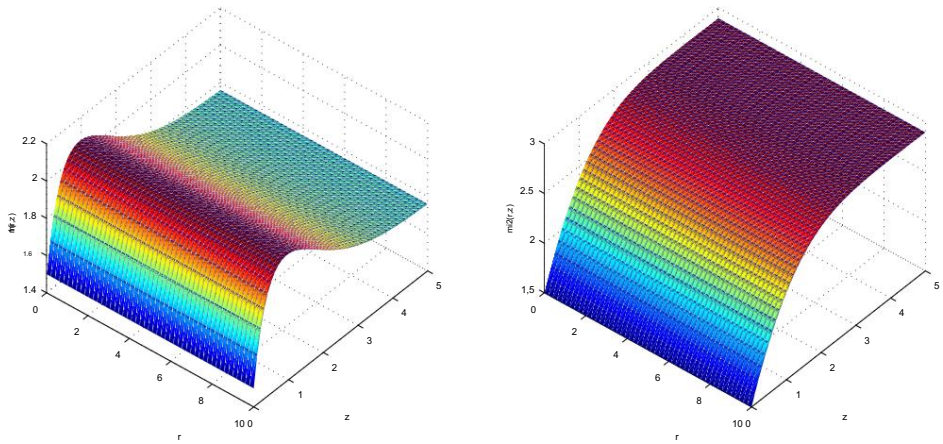


Figura 5. Comportamiento dinámico del sistema (9): E1(r,z) y E2(r,z).

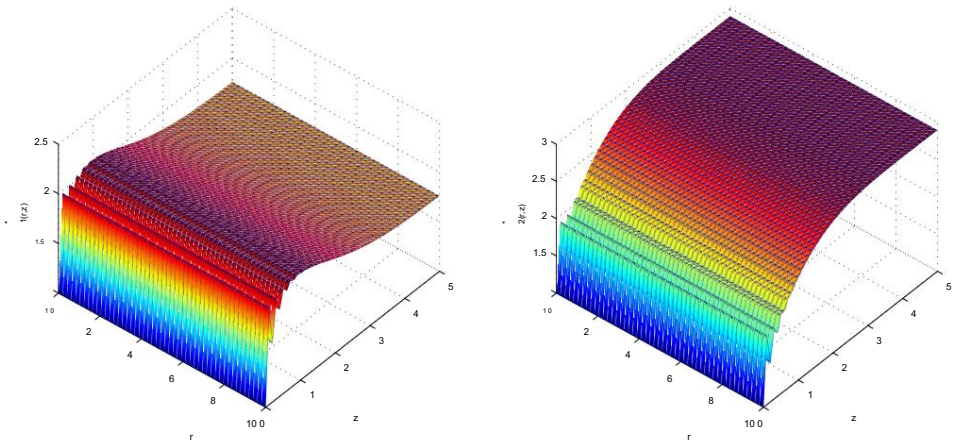


Figura 6. Comportamiento dinámico del sistema (24): $\bar{E}$1(r,z) y $\bar{E}$2(r,z).

Machine Translated by Google

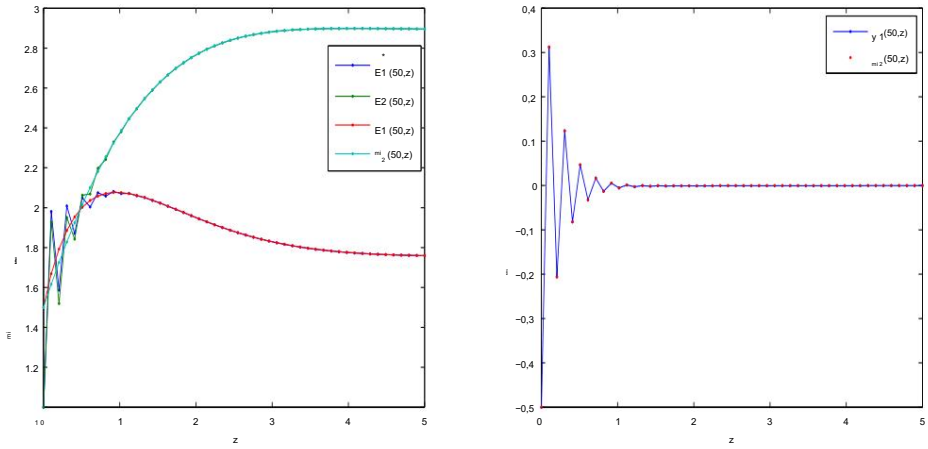


Figura 7. Soluciones de los sistemas maestro-esclavo (9), (24) y el sistema de error (30) en r = 50.

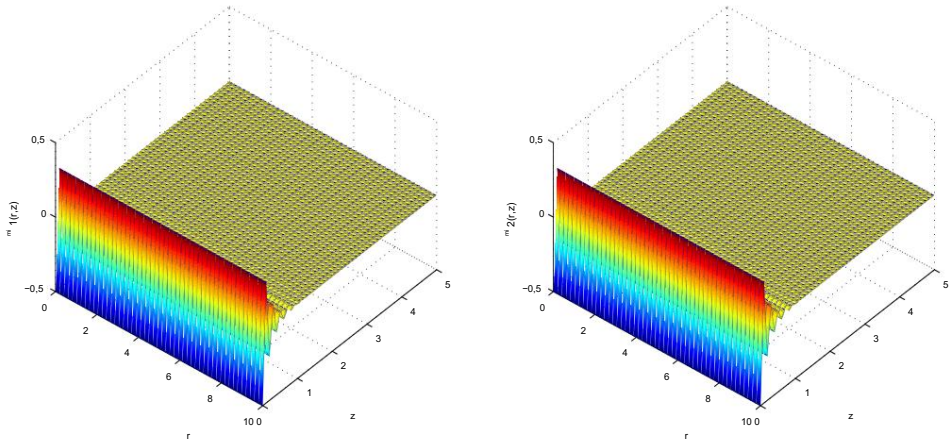


Figura 8. Comportamiento dinámico del sistema de error (30): e1(r,z) y e2(r,z).

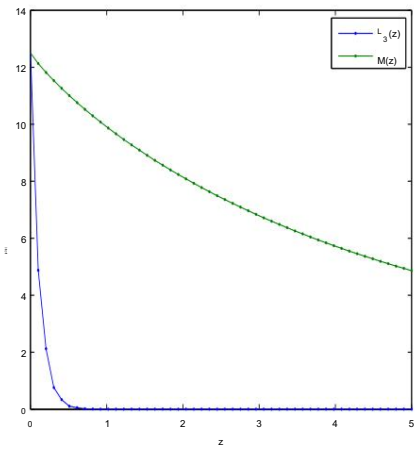


Figura 9. Estimación de la función de Lyapunov L3(z) y M(z).

7. Conclusiones

Este estudio marca el comienzo de una exploración innovadora de los sistemas de reacción-difusión de Degn-Harrison, introduciendo variaciones novedosas que prometen revelar nuevas capas de complejidad dentro de los modelos espaciotemporales. Nuestra investigación tiene como objetivo ser pionera en metodologías para investigar tanto la estabilidad en tiempo finito como la sincronización en tiempo finito dentro de estos modelos, proporcionando una comprensión integral de su dinámica, particularmente en el contexto de colonias bacterianas no lineales. Para iniciar nuestra investigación, utilizamos e

Machine Translated by Google

principios fundamentales de la teoría de Lyapunov para establecer marcos sólidos para analizar la estabilidad en el tiempo finito de los puntos de equilibrio y los fenómenos de sincronización. Estos fundamentos teóricos sirven como base para nuestros esfuerzos experimentales posteriores.

Para validar empíricamente la efectividad y confiabilidad de nuestras metodologías propuestas, llevamos a cabo extensos experimentos computacionales. Estos experimentos implican simulaciones exhaustivas de sistemas Degn-Harrison de orden fraccionario, diseñados para capturar la dinámica y el comportamiento de colonias bacterianas dentro de marcos de reacción-difusión.

A medida que avancemos, nuestra próxima fase de investigación se centrará en ampliar y perfeccionar nuestros marcos teóricos, explorar nuevas aplicaciones en sistemas biológicos más allá de las colonias bacterianas y mejorar nuestros modelos computacionales para lograr una mayor eficiencia y precisión. Planeamos validar nuestros hallazgos a través del trabajo experimental colaborativo, fomentando colaboraciones interdisciplinarias para integrar diversas perspectivas y conocimient

Además, difundiremos activamente nuestros resultados a través de diversos canales. A través de estos esfuerzos, nuestro objetivo es avanzar en el campo de los sistemas de reacción-difusión y contribuir a una comprensión más profunda de los fenómenos espaciotemporales complejos. Nuestro compromiso de ampliar los límites del conocimiento en esta dinámica área de investigación promete descubrimientos e innovaciones apasionantes en un futuro próximo.

Contribuciones de los autores: Conceptualización, MAH; Análisis formal, IB; Investigación, AA; Metodología , WGA; Recursos, AO y AH; Software, SM; Validación, AO; Visualización, IB y MAH; Redacción: revisión y edición, AH Todos los autores han leído y aceptado la versión publicada del manuscrito.

Financiamiento: Esta investigación no recibió financiamiento externo.

Declaración de disponibilidad de datos: Las contribuciones originales presentadas en este estudio están incluidas en el artículo; Se pueden dirigir más consultas al autor correspondiente.

Conflictos de intereses: Los autores declaran no tener conflictos de intereses.

Referencias

1. Mesdoui, F.; Ouannas, A.; Shawagfeh, N.; Grassi, G.; Pham, VT Métodos de sincronización para la reacción de Degn-Harrison. sistemas de difusión. Acceso IEEE 2020, 8, 91829–91836. [Referencia cruzada]
2. Ouannas, A.; Abdelli, M.; Odibat, Z.; Wang, X.; Pham, Vermont; Grassi, G.; Alsaedi, A. Control de sincronización en reacción-difusión. sistemas: Aplicación al sistema Lengyel-Epstein. Complejidad 2019, 2019, 2832781. [CrossRef]
3. Ambrosio, B.; Aziz-Alaoui, MA Sincronización y control de sistemas acoplados de reacción-difusión del tipo FitzHugh-Nagumo. Computadora. Matemáticas. Aplica. 2012, 64, 934–943. [Referencia cruzada]
4. Turkyilmazoglu, M.; Alofi, AS Formación de vórtice líquido en un recipiente giratorio considerando la derivada de tiempo fraccional de Caputo. Fractal fractal. 2024, 8, 231. [Referencia cruzada]
5. Ouannas, A.; Wang, X.; Pham, Vermont; Grassi, G.; Huynh, VV Resultados de sincronización para una clase de sistemas diferenciales parciales espaciotemporales de orden fraccionario basados en el enfoque fraccional de Lyapunov. Atado. Problema de valor. 2019, 2019, 74. [Referencia cruzada]
6. Wang, B.; Ouannas, A.; Karaca, Y.; Xia, WF; Jahanshahi, H.; Alkhateeb, AF; Nour, M. Un enfoque híbrido para la sincronización entre dos sistemas de difusión de reacción de orden entero y fraccionario aplicado en ciertos modelos químicos. Fractales 2022, 30, 2240145. [CrossRef]
7. Srivastava, M.; Ansari, SP; Agrawal, SK; Das, S.; Leung, AYT Antisincronización entre sistemas caóticos de orden fraccional idénticos y no idénticos utilizando un método de control activo. Dyn no lineal. 2014, 76, 905–914. [Referencia cruzada]
8. Jahanshahi, H.; Sajjadi, SS; Bekiros, S.; Aly, AA Sobre el desarrollo de un sistema económico hipercaótico fraccionario de orden variable con un controlador predictivo de modelo no lineal. Fractales de Solitones del Caos 2021, 144, 110698. [CrossRef]
9. Khennaoui, AA; Pham, Vermont; Thoai, vicepresidente; Ouannas, A.; Grassi, G.; Momani, S. Del mapa de Lozi al mapa de Lozi memristivo fraccionario. euros. Física. J. especificaciones. Arriba. 2023, 232, 2385–2393. [Referencia cruzada]
10. Khennaoui, AA; Ouannas, A.; Boulaaras, S.; Pham, Vermont; Taher Azar, A. Un mapa fraccionario con atractores ocultos: Caos y control. euros. Física. J. especificaciones. Arriba. 2020, 229, 1083–1093. [Referencia cruzada]
11. Ouannas, A.; Khennaoui, AA; Wang, X.; Pham, Vermont; Boulaaras, S.; Momani, S. Bifurcación y caos en la forma fraccionada de Mapa tipo Hénon-Lozi. euros. Física. J. especificaciones. Arriba. 2020, 229, 2261–2273. [Referencia cruzada]
12. Wu, Y.; Huang, T. Sincronización de tiempo finito de sistemas caóticos con retrasos variables en el tiempo y desajustes de parámetros. No lineal Din. 2024, 77, 729–736.
13. Hu, J.; Wu, X. Sincronización de tiempo finito de sistemas caóticos de orden fraccionario. Comunitario. Ciencia no lineal. Número. Simultáneo. 2018, 59, 440–452.

Machine Translated by Google

14. Hamadneh, T.; Hioual, A.; Saadeh, R.; Abdoon, MA; Almutairi, DK; Khalid, TA; Ouannas, A. Métodos generales para sincronizar sistemas de difusión-reacción discreta fraccionada aplicados al modelo de glucólisis. Fractal fractal. 2023, 7, 828. [Referencia cruzada]
15. Hamadneh, T.; Hioual, A.; Alsayyed, O.; Al-Khassawneh, YA; Al-Husban, A.; Ouannas, A. El modelo de FitzHugh-Nagumo descrito mediante ecuaciones en diferencias fraccionarias: estabilidad y simulación numérica. Axiomas 2023, 12, 806. [CrossRef]
16. Garvie, MR Esquemas de diferencias finitas para ecuaciones de reacción-difusión que modelan las interacciones depredador-presa en MATLAB. Toro. Matemáticas. Biol. 2007, 69, 931–956. [Referencia cruzada]
17. Houston, P.; Schwab, C.; Süli, E. Métodos de elementos finitos hp discontinuos para problemas de reacción de advección-difusión. SIAM J. Número. Anal. 2002, 39, 2133–2163. [Referencia cruzada]
18. Bueno-Orovio, A.; Kay, D.; Burrage, K. Métodos espectrales de Fourier para ecuaciones de reacción-difusión fraccionarias en el espacio. Número BIT. Matemáticas. 2014, 54, 937–954. [Referencia cruzada]
19. Mesdoui, F.; Shawagfeh, N.; Ouannas, A. Sincronización global de sistemas de difusión de reacciones de componentes N de orden fraccionario y orden entero : aplicación a modelos bioquímicos. Matemáticas. Métodos de aplicación. Ciencia. 2021, 44, 1003–1012. [Referencia cruzada]
20. Canción, G.; Zhang, X.; Wang, Z.; Chen, Y.; Chen, P. El método asintótico local de diferencias finitas de la ecuación de onda fraccionaria y su simulación de campo de ondas sísmicas viscosas. Geofísica 2020, 85, T179 – T189. [Referencia cruzada]
21. Al-Husban, A.; Djenina, N.; Saadeh, R.; Ouannas, A.; Grassi, G. Un nuevo COVID 19 de orden fraccional inconmensurable: modelado y análisis dinámico. Matemáticas 2023, 11, 555. [CrossRef]
22. Samko, SG; Kilbas, AA; Marichev, OI Integrales y derivadas fraccionarias: teoría y aplicaciones; Editores Gordon and Breach Science : Basilea, Suiza, 1993.
23. Feng, Z.; Xiang, Z. Estabilidad en tiempo finito de sistemas no lineales de orden fraccionario. Caos 2024, 34, 023105. [CrossRef] [PubMed]
24. Ouannas, A.; Abdelmalek, S.; Bendoukha, S. Coexistencia de algunos tipos de sincronización del caos en ecuaciones diferenciales de orden fraccionario; Universidad Estatal de Texas, Departamento de Matemáticas: San Marcos, TX, EE. UU., 2017.
25. Águila-Camacho, N.; Duarte-Mermoud, MA; Gallegos, JA Lyapunov funciones para sistemas de orden fraccionario. Comunitario. No lineal Ciencia. Número. Simultáneo. 2014, 19, 2951–2957. [Referencia cruzada]
26. Yaagoub, Z.; Danane, J.; Hammouch, Z.; Allali, K. Análisis matemático de un modelo epidémico SEIR de dos cepas de orden fraccionario. Resultados Anal no lineal. 2024, 7, 156–175.
27. Jiang, J.; Li, H.; Zhao, K.; Cao, D.; Guirao, LG Estabilidad de tiempo finito y control de modo deslizante para variables fraccionarias inciertas ordenar sistemas no lineales. Adv. Diferir de. Ecuación. 2021, 2021, 127. [Referencia cruzada]
28. Fairén V.; Velarde, MG Oscilaciones periódicas en un modelo para el proceso respiratorio de un cultivo bacteriano. J. Matemáticas. Biol. 1979, 8, 147-157. [Referencia cruzada]
29. Lisena, B. Algunos resultados globales para el sistema Degn-Harrison con difusión. Meditar. J. Matemáticas. 2017, 14, 91. [Referencia cruzada]
30. Abu Falahah, I.; Hioual, A.; Omar Al-Qadri, M.; AL-Khassawneh, YA; Al-Husban, A.; Hamadneh, T.; Ouannas, A. Synchroniza- ción de ecuaciones en diferencias parciales fraccionarias mediante métodos lineales. Axiomas 2023, 12, 728. [CrossRef]
31. Pan, J.; Liu, X.; Zhong, S. Criterios de estabilidad para redes neuronales de Cohen-Grossberg de reacción-difusión impulsiva con retrasos variables en el tiempo. Matemáticas. Computadora. Modelo. 2010, 51, 1037–1050. [Referencia cruzada]
32. Wang, L.; Yang, X.; Liu, H.; Chen, X. Sincronización en tiempo finito de redes reguladoras de genes retardados de valor complejo de orden fraccionario . Fractal fractal. 2023, 7, 347. [Referencia cruzada]
33. Li, Y.; Yang, X.; Shi, L. Sincronización de tiempo finito para redes neuronales competitivas con retrasos mixtos y perturbaciones no idénticas . Neurocomputación 2016, 185, 242–253. [Referencia cruzada]
34. Podlubny, I. Ecuaciones diferenciales fraccionarias: introducción a las derivadas fraccionarias, ecuaciones diferenciales fraccionarias y métodos de Su solución y algunas de sus aplicaciones; Elsevier: Ámsterdam, Países Bajos, 1998.

Descargo de responsabilidad/Nota del editor: Las declaraciones, opiniones y datos contenidos en todas las publicaciones son únicamente de los autores y contribuyentes individuales y no de MDPI ni de los editores. MDPI y/o los editores renuncian a toda responsabilidad por cualquier daño a personas o propiedad que resulte de cualquier idea, método, instrucción o producto mencionado en el contenido.

Machine Translated by Google

cálculo

MDPI

Artículo

Simulación de dinámica molecular de la fusión del dúplex de ADN con un par de bases de citosina-citosina mediado por plata

Elena B. Gusarova y Natalia A. Kovaleva *

NN Semenov Centro Federal de Investigación de Física Química, Academia de Ciencias de Rusia, 4 Kosygin Street, Moscú 119991, Rusia *

Correspondencia: natykov@gmail.com

Resumen: Los pares de bases mediados por metales en moléculas de doble hélice de ADN abren amplias oportunidades para los biosensores basados en grupos de ADN con plata debido a su baja toxicidad y aplicabilidad en el diseño de fármacos. A pesar de una intensa investigación experimental y computacional, los mecanismos moleculares de estabilización de una doble hélice mediante pares de bases mediados por plata se desconocen en gran medida. Realizamos simulaciones de dinámica molecular de todos los átomos de una doble hélice de ADN dodecamérico (secuencia 5′ -TAGGTCAATACT- ′ 3-3′ ATCCACTTATGA-5′) con un desajuste de citosina-citosina o citosina-Ag+-citosina en el centro del dúplex. Ampliamos el conjunto de parámetros de interacción propuesto previamente para un ion de plata en el par mediado por plata para permitir su disociación. Con este nuevo potencial, estudiamos cómo la adición de un ion de plata podría estabilizar una doble hélice de ADN que contiene un único desajuste entre citosina y citosina. En particular, descubrimos que la hélice con desajuste citosina-Ag+-citosina tiene una temperatura de fusión mayor que la hélice con citosina-citosina. Este efecto de estabilización del ion plata concuerda cualitativamente con los datos experimentales. La región central del dúplex con desajuste citosina-Ag+-citosina (a diferencia del desajuste citosina-citosina) es lo suficientemente estable como para evitar la formación de burbujas a temperaturas moderadas durante la fusión. Los resultados de esta simulación se pueden utilizar para diseñar nuevas estructuras de ADN mediadas por metales.

Palabras clave: par metal-base; ADN mediado por plata; temperatura de fusión; dinámica molecular

check for updates

Cita: Gusarova, EB; Kovaleva, NA Simulación de dinámica molecular de la fusión del dúplex de ADN con un par de bases de citosina-citosina mediado por plata. Computación 2024, 12, 145. https:// doi.org/10.3390/ computation12070145

Editor Académico: Claudio Amovilli

Recibido: 2 de mayo de 2024
Revisado: 4 de julio de 2024
Aceptado: 10 de julio de 2024
Publicado: 12 de julio de 2024

Copyright: © 2024 por los autores. Licenciatario MDPI, Basilea, Suiza. Este artículo es un artículo de acceso abierto. distribuido bajo los términos y condiciones de los Creative Commons Licencia de atribución (CC BY) (https:// creativecommons.org/licenses/by/ 4.0/).

1. Introducción

La doble hélice de ADN se utiliza a menudo en nanotecnología para una amplia gama de aplicaciones. Un ejemplo prometedor es la búsqueda exhaustiva de alternativas para los enlaces de hidrógeno (enlaces H) entre bases nitrogenadas complementarias. Un enfoque atractivo es crear un par de bases con cationes metálicos que tengan una alta afinidad por las bases nitrogenadas. Este enfoque es prometedor para la creación de nanomateriales basados en ADN con propiedades térmicas, mecánicas y químicas mejoradas, así como con nuevas funcionalidades [1–4]. Una doble hélice de ADN en la que las bases de nucleótidos están emparejadas por un ion metálico en lugar de enlaces de hidrógeno en los pares de bases de Watson-Crick se llama ADN metalizado (ADN-M) [5]. Estos sistemas son de interés debido a su uso potencial como sensores y biosensores de metales sensibles y específicos [6,7]. Como regla general, la inclusión de pares de bases no canónicas en el ADN homoquiral o heteroquiral conduce a una disminución de la estabilidad de la doble hélice [8]. Tal disminución depende en gran medida de la estructura específica de los pares de bases no canónicos, su naturaleza y la secuencia en la que están incluidos. En 2009, Ono y Miyake [9] describieron dos estructuras con pares mediados por metales, en particular citosina-Ag+-citosina (C:Ag:C). Su investigación ha abierto amplias oportunidades para la nanotecnología del ADN, la nanoelectrónica y el origami de ADN debido a la alta especificidad de la unión de la plata [10,11]. Los iones de plata han atraído especial atención debido a su baja toxicidad y aplicabilidad en el diseño de fármacos [12,13]. Como resultado, se informaron numerosos estudios sobre ADN artificial que contiene pares de bases no canónicas con iones de plata [14-17].

En el ADN natural, el emparejamiento mediado por plata se ha explorado en dobles hélices canónicas con desajustes de pares de bases [9] y en hebras sin pares canónicos [18-21]. Alta química

Machine Translated by Google

y se demostró la estabilidad térmica del par de bases C:Ag:C [22-26], y se estudió el papel del pH en la estabilidad del par C:Ag:C [27]. Se ha observado experimentalmente el efecto de la plata sobre la temperatura de fusión de la doble hélice del ADN con inclusiones de citosina-citosina (C:C) como un par complementario [28,29]. El punto de fusión de un oligonucleótido con un desajuste C:C aumenta en presencia de iones de plata en solución.

Hasta la fecha, se han desarrollado varios modelos teóricos de dinámica de emparejamiento de bases en el ADN de diversos grados de detalización. Estos modelos estimulan avances significativos en el campo de la fusión del ADN [30,31]. Los modelos propuestos varían desde el nivel mesoscópico (modelos basados en el modelo de Peyrard-Bishop (PB) [32,33]) hasta el modelo de grano grueso (CG) con varias cuentas por nucleótido [34]. Los modelos mesoscópicos como el modelo PB y sus variaciones utilizan un conjunto de potenciales efectivos para describir las principales interacciones en la doble hélice del ADN, es decir, los enlaces de hidrógeno y las interacciones de apilamiento [35-38]. Utilizando modelos mesoscópicos, se investigó la influencia de los desajustes simples, dobles y triples en la estabilidad dúplex. Se descubrió que muchas combinaciones de múltiples desajustes son sorprendentemente estables [39]. Se calcularon los puntos de fusión de secuencias que contienen pares C: C y timina-timina mediados por metales [40]. El uso de un modelo CG, donde solo se incluyen iones monovalentes y divalentes, permite reproducir temperaturas de fusión experimentales para oligonucleótidos [41]. En muchos modelos mesoscópicos y CG, el potencial no lineal efectivo, el potencial de Lennard-Jones [42–44] o el potencial Morse [45–47] se utilizan para imitar los enlaces de hidrógeno para describir los procesos de fusión.

La fusión del ADN también se ha estudiado mediante simulación de dinámica molecular (MD) de todos los átomos [48-50]. Sin embargo, el número de estudios de simulación MD de ADN con pares mediados por metales es muy limitado. Anteriormente se ha estudiado el dúplex de homobase de citosina mediado por Ag+ más corto posible , un tetrámero formado por puentes de Ag+ entre dos cadenas de ADN [16]. El grupo López-Acevedo informó sobre un estudio de cadenas de ADN de homobases de citosina emparejadas con Ag+ utilizando una combinación de cálculos MD clásicos y cuánticos [51]. Demostraron que una doble hélice paralela tiene una alta estabilidad, mientras que una doble hélice antiparalela se desenrosca y pierde su estructura helicoidal. Las citosinas están emparejadas en una conformación transoide en una doble hélice paralela, mientras que en una doble hélice antiparalela, están en una conformación cisoide (ver Figura 1a, b). El enlace en el par C:Ag:C en la conformación cisoide es más débil que en la transoide debido a un enlace de hidrógeno adicional formado entre el oxígeno de una citosina y el grupo amino de la citosina complementaria [51-53]. El enfoque desarrollado en los trabajos de López-Acevedo et al. [51] se utilizó con éxito en la simulación MD del emparejamiento de bases mediado por plata en ADN de cadena paralela [29]. Sin embargo, la simulación MD de la destrucción del par C:Ag:C es un desafío hasta la fecha. Los potenciales se utilizan habitualmente para describir el enlace de un ion plata con el nitrógeno de la citosina como enlace covalente. La descripción que hace MD de un enlace covalente se basa en un potencial armónico que no ofrece posibilidad de ruptura del enlace. Por lo tanto, se debe utilizar un potencial diferente para describir la destrucción del par C:Ag:C. Una posibilidad es utilizar el potencial Morse, que incluye explícitamente los efectos de la ruptura de enlaces y la existencia de estados libres.

En este artículo, proponemos utilizar el potencial de Morse para describir el enlace de un ion plata con citosina por analogía con un enlace de hidrógeno en algunos modelos mesoscópicos. Simulamos una hélice de ADN bicatenario antiparalela con desajuste C:Ag:C. Ajustamos parámetros del potencial Morse que reproducían el proceso de fusión de un par mediado por plata.
Obtuvimos curvas de fusión y temperaturas de fusión estimadas. Creemos que los estudios de temperatura de fusión del ADN-M ciertamente mejorarán nuestro conocimiento sobre las propiedades de la doble hélice del ADN asociadas con pares de bases mediados por metales.

Machine Translated by Google

Computación 2024, 12, x 3 de 11

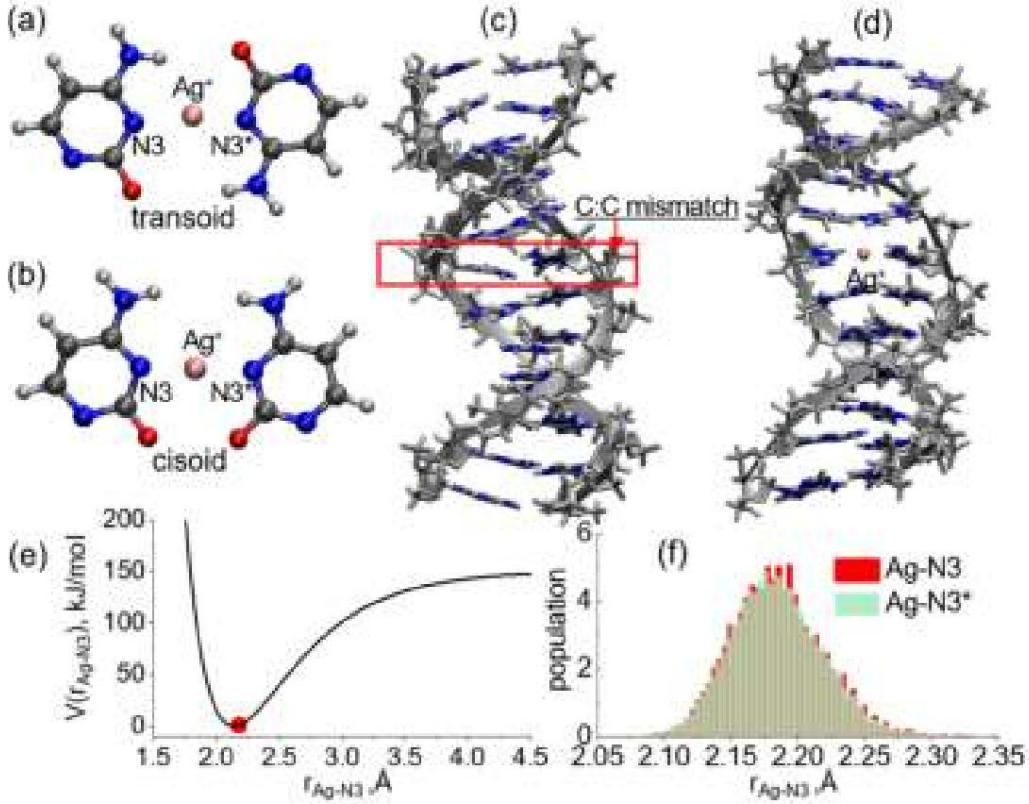


Figura 1. Variaciones estructurales para el par de bases C:Ag:C. (a) Conformaciones transoide y (b) cisoide.
N3* define el átomo de N3 en la base complementaria. Doble hélice de ADN: (c) con desajuste C:C puro y (d) con C:Ag:C formado durante la MD clásica. Una instantánea de la doble hélice en t = 100 ns es mostrado. (e) La curva de potencial de Morse fijada. El punto rojo corresponde al valor de equilibrio rAg-N3 en la simulación MD a una temperatura de 300 K. (f) El histograma (población en porcentaje) de rAg-N3 en la distancia entre el ion plata y el nitrógeno citosino rAg-N3 a una temperatura de 300 K. El histograma era construido utilizando 75 contenedores entre 2,05 y 2,35.

Figura 1. Variaciones estructurales para el par de bases C:Ag:C. (a) conformaciones transoide y (b) cisoide. el átomo de N3 en la base complementaria. Doble hélice de ADN: (c) con desajuste C:C puro, N3* define y (d) con C:Ag:C formado durante la MD clásica. Una instantánea de la doble hélice en t = 100 ns es mostrado. (e) La curva de potencial de Morse ajustada. El punto rojo corresponde al valor de equilibrio. simulación MD a una temperatura de 300 K. (f) El histograma (población en porcentaje) distancia entre el ion plata y el nitrógeno citosino rAg-N3 a una temperatura de 300 K. El histograma era construido utilizando 75 contenedores entre 2,05 y 2,35.

y métodos

En este artículo, proponemos utilizar el potencial Morse para describir el enlace de una plata 2. Materiales ion con citosina por analogía con un enlace de hidrógeno en algunos modelos mesoscópicos. Tenemos una hélice de ADN bicatenario (12 pares de bases) con la secuencia 5′ - TAGGTCAATACT -3′ - simuló una hélice de ADN bicatenario antiparalelo con desajuste C:Ag:C. Colocamos ′ 3′-ATCCACTTATGA-5′, con un desajuste de complementariedad en la sexta posición, como C:C Se consideraron parámetros del potencial Morse que reproducirían el proceso de fusión mediado por un par . La estructura inicial se generó utilizando el programa Avogadro [54]. por plata. Obtuvimos curvas de fusión y temperaturas de fusión estimadas. Creemos que inicialmente, la doble hélice del ADN se colocó en una caja cúbica de modo que la distancia mínima que los estudios de la temperatura de fusión del ADN-M ciertamente mejorarán nuestro conocimiento sobre si entre la hélice y los bordes de la caja excedió 1 nm. Entonces, las moléculas de agua fueron Propiedades de la doble hélice del ADN asociadas con pares de bases mediados por metales. agregado al sistema. Utilizamos el modelo de agua TIP3P. Para neutralizar la carga del sistema, se agregaron 22 iones Na+ a la celda de cálculo. Se realizaron cálculos

2. Materiales y métodos en una celda periódica utilizando dinámica estocástica como termostato. Las ecuaciones de movimiento fueron utilizando una versión avanzada del algoritmo Verlet. El paso de integración fue Hélice de ADN de doble cadena (12 pares de bases) con la secuencia 5′ TAGGTCAATACT- integrada 3′ -3′-ATCCACTTATGA-5′, con un desajuste de complementariedad en la sexta posición, como 2 fs. La temperatura constante se mantuvo usando un termostato estocástico y constante Se consideró C:C. La estructura inicial se generó utilizando el programa Avogadro [54]. La presión se mantuvo utilizando un barostato Parrinello-Rahman con una constante de tiempo de 2 ps. átomos de hidrógeno mediante el algoritmo LINCS. El corte Inicialmente, la doble hélice del ADN se colocó en una caja cúbica para limitar los enlaces mínimos con los La distancia entre la hélice y los bordes de la caja superó 1 nm. Luego, se agregaron moléculas de agua al sistema. Los radios para las interacciones de Coulomb y van der Waals se consideraron de 15 Å, método PME Utilizamos el modelo de agua TIP3P. Para neutralizar la carga se utilizaron las interacciones de Coulomb de largo alcance. Para la simulación MD, los campos el sistema, se agregaron 22 iones Na+ a la celda de cálculo. Los cálculos se realizaron con el paquete GROMACS 2023.1 [55]. en una celda periódica utilizando dinámica estocástica como termostato. Las ecuaciones de movimiento fueron Los integró utilizando una versión avanzada del algoritmo Verlet. El paso de integración fue de 2 fs. La temperatura se mantuvo constante usando un termostato estocástico, y la teracción constante entre citosina y un ion de plata se La presión se mantuvo utilizando un barostato Parrinello-Rahman con una constante de tiempo de 2 ps. modificaciones de la siguiente manera. Cargas parciales de átomos de citosina que interactúan con iones de plata. Las distancias de enlace de hidrógeno se restringieron [51] mediante el algoritmo LINCS. El potencial de 12-6 Lennard-Jones (LJ) fue para Coulomb y van der Waals. Las interacciones se consideraron de 15 Å. Se utilizó el método PME para las interacciones de van der Waals. Los valores de los parámetros de interacción no enlazados para

Machine Translated by Google

el potencial LJ para Ag+ (σ = 2,731 Å y ε = 0,16316922 kJ/mol) y la carga parcial de un ion plata (qAg = 0,38272) se tomaron de [57], que previamente fueron validados para el emparejamiento de bases mediado por plata en doble ADN de cadena larga en [29,51].

Para simular la disociación del enlace del ion plata del átomo N3 de la citosina, elegimos el potencial de Morse. El potencial Morse incluye explícitamente efectos de ruptura de vínculos, como la existencia de estados libres:

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

donde r es la distancia entre los átomos de N3 y Ag, re es la distancia del enlace de equilibrio, De es la profundidad del pozo y α controla el "ancho" del potencial. La distancia de enlace de equilibrio re = 2,14 Å se conoce a partir de cálculos de mecánica cuántica y se ha utilizado con éxito en simulaciones MD de pares transoides y cisoides C:Ag:C [29,51]. Los parámetros del potencial Morse α y De se obtuvieron como resultado de un procedimiento de optimización que se describe a continuación.

El procedimiento de optimización de los parámetros potenciales de Morse constó de dos pasos. Al principio determinamos el valor del parámetro α. La idea es mantener la geometría del par C:Ag:C determinada a partir de cálculos de mecánica cuántica [51], en particular, ajustando el valor de equilibrio del ángulo N3-Ag+ -N3* al obtenido por el método DFT. Para realizar este procedimiento fijamos el parámetro De = 200 kJ/mol, que supera la energía del enlace de hidrógeno. Se requiere un valor tan grande de De para evitar que el par C: Ag: C se disocia espontáneamente ante las oscilaciones térmicas. El valor inicial del parámetro α se eligió de modo que el "ancho" del potencial Morse fuera similar al "ancho" del potencial armónico de [51].

Autores de la ref. [51] introdujeron potenciales enlazados armónicos, así como angulares y diédricos para mantener el ángulo N3-Ag+ -N3* cerca de los valores químicos cuánticos. Usamos potencial Morse en lugar de estos y, por lo tanto, tuvimos que optimizar el "ancho" del pozo potencial.

Seleccionamos un rango de valores del parámetro α. Para cada valor α, realizamos una simulación MD a una temperatura de 300 K con una longitud de 10 ns y determinamos el valor de equilibrio del ángulo valente N3-Ag+ -N3*. Resultó que α = 2,0 Å−1 proporciona los valores químicos más cercanos a los cuánticos [51].

El siguiente paso fue el parámetro De optimización. El parámetro De está relacionado con la energía de disociación. Realizamos una serie de simulaciones MD calentando el sistema como se describe anteriormente. Redujimos el parámetro De para cada simulación. Calculamos las curvas de fusión para cada valor del parámetro De . El valor optimizado es De = 150 kJ/mol.

Una mayor disminución estuvo acompañada por la fusión de la doble hélice con el ion de plata a las mismas temperaturas que sin el ion de plata. La Figura 1e muestra la curva ajustada del potencial Morse con parámetros optimizados.

Realizamos dos tipos de simulaciones MD de una doble hélice de ADN: dinámica de equilibrio a 300 K y simulación de fusión. Ambas simulaciones comenzaron con una etapa de relajación seguida de una corrida de producción. La etapa de relajación consistió en la minimización de energía utilizando el método del gradiente conjugado y simulaciones MD en condiciones de volumen constante (conjunto NVT) y presión constante (conjunto NPT) a una presión constante de 1,0 bar y temperatura de 300 K durante 10 ns. Después de la relajación, se calculó la dinámica del sistema durante 100 ns a una temperatura de 300 K. La simulación de fusión partió de la configuración del sistema tomada de la dinámica de equilibrio a 300 K. El sistema se calentó cada 20 ns con una temperatura paso de 10 K. Las simulaciones MD se realizaron a temperaturas que oscilaban entre 300 K y 460 K.

Con base en las trayectorias MD obtenidas, se calcularon los enlaces de hidrógeno (enlaces H). Para detectar enlaces de H, se utilizó el conocido criterio geométrico: el enlace de H entre pares de bases existe si la distancia entre dos átomos electronegativos es inferior a 3,5 Å y el ángulo del enlace de H es inferior a 30° [58].

Machine Translated by Google

3. Resultados

3.1. Dinámica y estabilidad de la doble hélice del ADN con desajuste C:C o C:Ag:C

Dado que ofrecemos un nuevo potencial, examinamos la estabilidad de la doble hélice del dodecámero en presencia de un ion de plata. Por lo tanto, una vez completado el proceso de equilibrio, se llevó a cabo una simulación MD a temperatura constante (300 K) y presión (NPT) durante 100 ns, de los cuales los últimos 50 ns se utilizaron para el análisis. El potencial original se utilizó para describir la interacción del ion plata con los átomos de citosina. Estos cambios no afectan ningún otro parámetro de interacción y no deberían afectar la estructura de la doble hélice fuera del desajuste del par C:C. La doble hélice en presencia del ion plata a 300 K era estable y tenía un número promedio de enlaces de hidrógeno incluso mayor que en la simulación con un desajuste C:C en ausencia de un ion plata. La presencia de iones de plata en un sistema con un desajuste C:C conduce a un aumento en la estabilidad de la doble hélice. La Figura 1c, d muestra instantáneas típicas al final de la simulación en ausencia y presencia del ion plata.

La Figura 1f muestra un histograma de la distancia rAg-N3 entre el ion plata y el nitrógeno citosina. Se puede ver que la distancia de equilibrio de simulación MD rAg-N3 = 2,18 ± 0,003 Å se encuentra muy próxima a la distancia de equilibrio entre el ion plata y el nitrógeno citosina, de acuerdo con los datos de la literatura [51]. También comparamos esta distancia de equilibrio con el mínimo potencial (Figura 1e). El valor de equilibrio está cerca del mínimo potencial. El desplazamiento se debe a la presencia de otros átomos de citosina altamente cargados en las inmediaciones del enlace nitrógeno-plata.

El aumento de la estabilidad del par C:C en presencia del ion plata se caracteriza bien por la distancia rN3-N3 entre los átomos de nitrógeno N3 de las citosinas en el par mediado por plata. La Figura 2a muestra la distancia rN3-N3 . La distancia promedio entre los átomos de N3 de las citosinas en ausencia de iones de plata a una temperatura de 300 K, la distancia N3-N3 es rN3-N3 = 3,97 ± 0,27 Å. En presencia del ion plata, la distancia N3-N3 es rN3-N3 = 4,31 ± 0,07 Å, que es mayor que en el par C:C, pero el par C:Ag:C es más estable, como lo indica el desviación estándar del promedio. En este caso, observamos grandes deformaciones del par C:C y la formación temporal de un enlace de hidrógeno entre el grupo NH2 de una citosina y el átomo N3 de otra citosina. Sin embargo, dicho enlace de hidrógeno resulta inestable.

También calculamos los parámetros del par de bases locales de la doble hélice del ADN en ausencia y presencia del ion plata. Los parámetros del par de bases locales para el par C:C son significativamente diferentes en comparación con los pares adyacentes debido a la ausencia de un ion plata. Los parámetros del par de bases locales, como la apertura, el corte y el estiramiento, resultaron ser los más notables (ver Figura 3a-c).

En presencia del ion plata, el perfil de los parámetros de corte y estiramiento a lo largo de la hélice es casi plano (ver Figura 3d,e). Esto indica una mayor estabilidad en el par C:C mediado por plata. El valor atípico de apertura es evidencia del par C:C de conformación cisoide y refleja las características particulares de este par no canónico.

La estructura del par de citosinas mediadas por plata en las conformaciones transoide y cisoide puede ser diferente, como se demostró en [51] mediante el método DFT. En nuestro caso, el par C:C está en conformación cisoide, como en las hélices antiparalelas. La conformación cisoide inicial no se transforma en transoide durante la simulación. Los ángulos formados entre el ion plata y las citosinas en el enlace de coordinación se muestran en la Tabla 1. Se observa un ligero cambio en los ángulos de equilibrio, lo que indica un desplazamiento del ion plata hacia los oxígenos de la citosina.

Machine Translated by Google

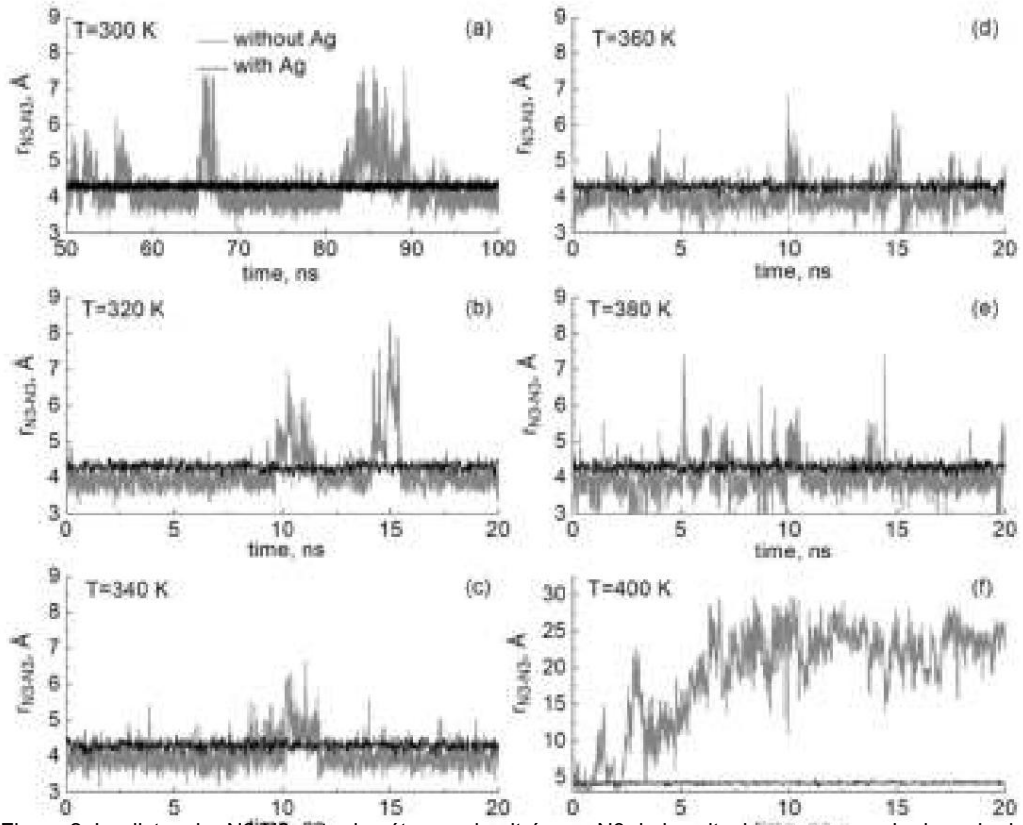


Figura 2. La distancia rN3-N3 entre los átomos de nitrógeno N3 de las citosinas en ausencia de un io de plata.
(línea gris gruesa) y en presencia del ion plata (línea negra delgada) refleja la estabilidad del C: Figura 2. La distancia rN3-
N3 entre los átomos de nitrógeno N3 de las citosinas en ausencia de un ion plata
y pares C:Ag:C: (a) Un intervalo de 50 ns al final del intervalo de tiempo analizado para la temperatura (línea gris
gruesa) y en presencia del ion plata (línea negra delgada) refleja la estabilidad del C:G y C :C (línea gris
pares (A, C, G, T) a lo largo de la hélice de ADN. Un intervalo de tiempo de 20 ns para las temperaturas 320 K (b), 340 K (c), 360 K (d), 380 K (e), 40 y
temperatura C:Ag:C. (a) Un intervalo de 50 ns al final del intervalo de tiempo analizado para la temperatura 300 K.
300 K. (b–f) Un intervalo de tiempo de 20 ns para las temperaturas 320 K (b), 340 K (c), 360 K (d), 380 K (e), 400
(b–f) Un tiempo de 20 ns intervalo para las temperaturas 320 K (b), 340 K (c), 380 K (d), 380 K (e), 400 K (f).
K(f).

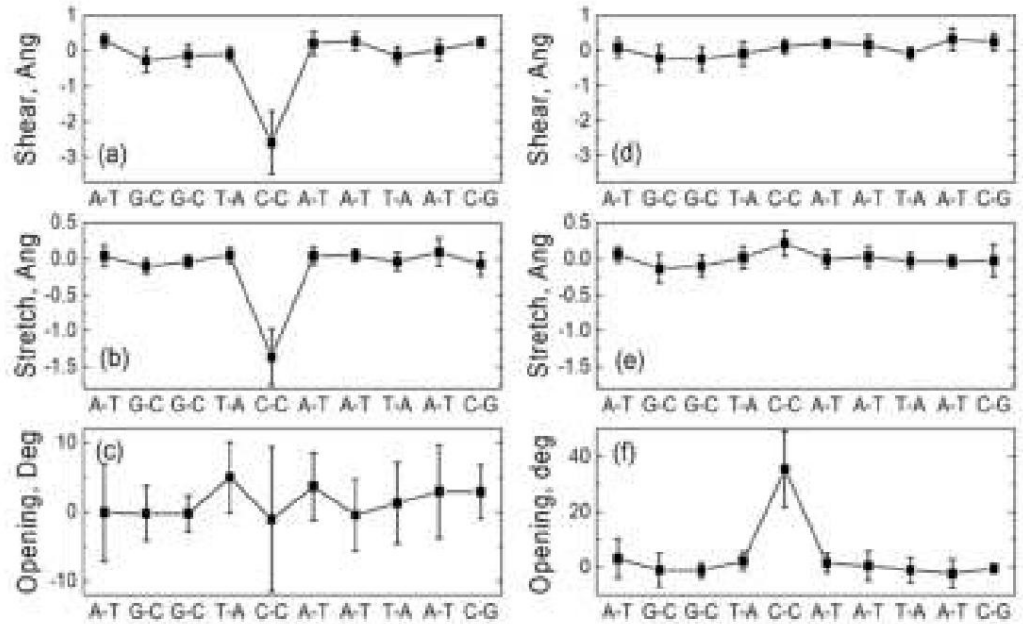


Figura 3. Parámetros del par de bases locales: corte, estiramiento y apertura para el caso de ausencia (a–c) y presencia (d–f) del ion plata.
Figura 3. Parámetros del par de bases locales: corte, estiramiento y apertura para el caso de ausencia (a – c) y
Presencia (d – f) del ion plata.

En presencia del ion plata, el perfil de los parámetros de corte y estiramiento a lo largo de la hélice es casi plano (ver Figura 3d,e). Esto indica una mayor estabilidad en el medio
mediado por plata. En presencia del ion plata, el perfil de los parámetros de corte y estiramiento
a lo largo de la hélice es casi plano (ver Figura 3d, e). Esto indica una mayor estabilidad en el medio de

Machine Translated by Google

1. Se observa un ligero cambio en los ángulos de equilibrio, lo que indica un desplazamiento del ion plata hacia los oxígenos de la citosina.

Tabla 1. Ángulos formados por el enlace de coordinación entre el ion plata y el átomo de nitrógeno N3 o citosina. Se utilizaron notaciones atómicas estándar para bases de nucleótidos.

Tabla 1. Ángulos formados por el enlace de coordinación entre el ion plata y el átomo de nitrógeno N3 de citosina. Se utilizaron notaciones atómicas estándar para bases de nucleótidos.

Ángulo	θ, (grados)
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
Ag+ -N3-C4	138 ± 7

3.2. Fusión de la doble hélice de ADN con C:C o C:Ag:C Mismatch Realizamos una simulación MD del calentamiento del ADN en el rango de 300 a 400 K con un paso de temperatura de 10 K. Al aumentar la temperatura, la distancia de desajuste C:C fluctúa fuertemente, lo que a menudo va acompañado de la apertura de un par C:C. Figura 2 muestra rN3-N3 para algunas temperaturas en el rango de 300 a 400 K. A una temperatura de 400 K, el par C:C ya está completamente destruido (Figura 2f). En presencia de ion plata a una temperatura de 400 K, el par C:Ag:C es estable. La destrucción de esta pareja coincide con la fusión de la doble hélice a 410 K.

El número máximo de enlaces de hidrógeno en los pares de bases complementarias en la secuencia considerada es 25. Sin embargo, durante el curso de la simulación MD, se observa un número menor de enlaces de hidrógeno como resultado del desgaste de los pares de bases, una característica bien conocida de los procesos de fusión en simulaciones MD. Cuando una doble hélice de ADN con un par C:C sin plata se calienta en el ion, la fusión comienza desde los pares de bases terminales de la doble hélice y desde el ion se Par C:C: Sin una conexión estable entre estas citosinas, la doble hélice forma el par C:C. Sin una conexión estable entre estas citosinas, se forma la doble hélice.
en este caso se forman tres puntos calientes de fusión: dos pares de terminales y el C: una burbuja, y en este caso se forman tres puntos calientes de fusión: dos pares de terminales y el C:C desajuste. Con el ion plata entre dos citosinas, observamos un doble desajuste más estable. Con el ion plata entre dos citosinas, observamos un doble más estable.
hélice y la fusión se produce sólo en los pares de bases terminales. Las curvas de fusión de la hélice y la fusión se producen sólo a partir de los pares de bases terminales. Las curvas de fusión del ADN.
La doble hélice del ADN en presencia y ausencia de un ion de plata se presenta en la Figura 4. La doble hélice en presencia y ausencia de un ion de plata se presenta en la Figura 4. Puede Se puede observar que en presencia del ion plata, la curva de fusión se desplaza hacia mayor temperaturas, tal como se observó en los experimentos [28].

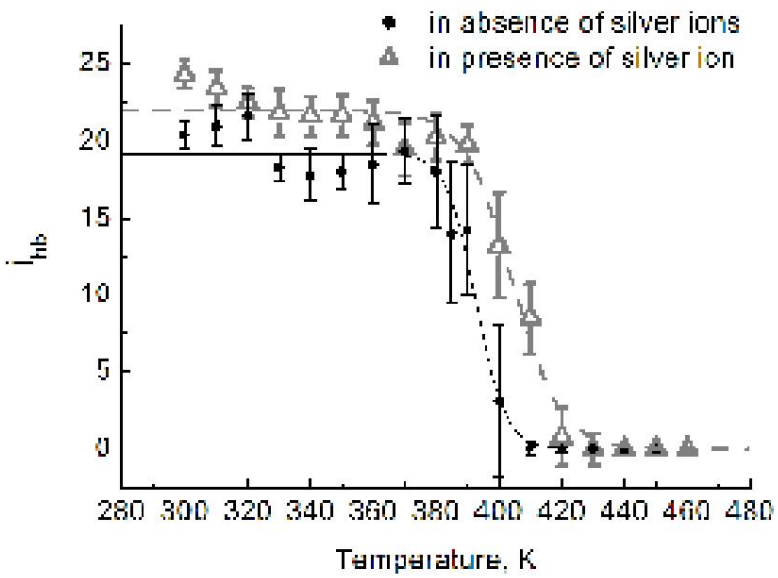


Figura 4. La presencia del ion plata desplaza la curva de fusión hacia temperaturas más altas. El dependencia de la temperatura del número de enlaces de hidrógeno ihb sin (círculos) y con (triángulos) Se presenta ion plata.

La Tabla 2 muestra las temperaturas de fusión de la doble hélice del ADN en ausencia y presencia del ion plata. Como es habitual en las simulaciones MD, obtenemos la mayor valores de temperaturas de fusión en ambos casos (debido al sobrecalentamiento, ver Discusión); Sin embargo, estamos interesados en el efecto relativo: el cambio en la temperatura de fusión debido a la

Machine Translated by Google

Presencia de iones de plata. Este desplazamiento, en nuestro caso, es de 12 K, que se acerca al valor experimental de 7,5 K. Cuando el ADN se funde, el par mediado por metal se descompone y el ion de plata se libera en la solución. El par C:Ag:C mediado por metal es térmicamente más estable que los enlaces de hidrógeno de bases complementarias, pero en este caso tiene un par de bases mediado por plata, que también está sujeto a destrucción térmica, como se observó en el experimento . 28].

Tabla 2. Temperaturas de fusión para doble hélice en ausencia y presencia del ion plata en comparación con datos experimentales. La fila inferior muestra el cambio en la temperatura de fusión debido a la presencia de iones de plata.

Ion de plata	Experimento Tm [1], k	Tm MD, K
ausencia	299,5	392
presencia	307	404
cambio de temperatura ΔTm	7.5	12

[1] Los resultados experimentales se tomaron de [28] para la misma secuencia estudiada en este trabajo.

4. Discusión

Tomamos esta secuencia como un objeto robusto para una posible validación, ya que su punto de fusión encontrado experimentalmente es bien conocido tanto en ausencia como en presencia de iones de plata [28]. Elegimos la doble hélice antiparalela estándar ya que, para tales objetos, el enfoque MD está bien validado.

Al introducir potenciales de enlace para describir el enlace de coordinación entre el ion plata y la citosina, pudimos modelar directamente la dinámica de la ruptura del enlace coordinado, lo que antes era imposible al tratar estos enlaces como covalentes. La característica principal de nuestro potencial en comparación con los primeros trabajos es que la estructura del par C:Ag:C no es fija cerca de la posición de equilibrio, sino que puede fluctuar significativamente cerca de ella hasta la destrucción del par con el aumento de temperatura. Nuestros cálculos muestran que la estructura del par corresponde a los primeros trabajos [51].

Las discrepancias en los valores absolutos de las temperaturas de fusión entre experimentos [28] y simulaciones MD son comunes y se atribuyen a la metodología utilizada para simular las muestras a nanoescala [59]. En las simulaciones MD, el punto de fusión se determina mediante calentamiento "lento"; por tanto, la tasa de cambio de temperatura en comparación con un experimento real es muy alta y puede exceder el valor experimental en varios órdenes de magnitud. Dado que la transición no ocurre instantáneamente sino que requiere un tiempo pequeño (a escala experimental), se observa un cambio. Este efecto se puede corregir utilizando simulaciones de Monte Carlo en lugar de dinámica molecular, pero esto requiere cálculos más costosos. Además, la discrepancia en la temperatura de fusión se ve afectada por el tamaño de la celda de simulación y los termostatos utilizados. En dinámica molecular, estamos ante una célula pequeña, de nanómetros de tamaño. En este caso, el cambio de temperatura se produce instantáneamente en todo el volumen. En el experimento, la célula medida es macroscópica y los cambios de temperatura en su interior a nivel molecular se producen de forma no uniforme. Por tanto, creemos que la discrepancia entre las temperaturas de fusión en el experimento real y nuestros resultados no es una desventaja. Obtuvimos una concordancia cualitativa del cambio en la temperatura de fusión en presencia de un ion de plata en comparación con el caso en el que el ion de plata está ausente. En este caso observamos un cambio satisfactorio en la temperatura de fusión, comparable con los resultados experimenta

5. Conclusiones

Propusimos y verificamos el potencial Morse para el enlace del par de bases mediado por plata que puede describir la destrucción del enlace de coordinación entre la citosina y un ion plata. Los parámetros de potencial verificados permitieron reproducir el proceso de fusión de la doble hélice del ADN con un par mediado por plata y la destrucción del enlace de coordinación entre el ion plata y la base citosina al aumentar la temperatura. Los resultados de las simulaciones concuerdan con los datos experimentales sobre el cambio de la temperatura de fusión de la doble hélice del ADN con un desajuste C:C en ausencia y presencia de un ion de plata. Dado que la doble hélice en forma B es un elemento básico no sólo en el código genético de

Machine Translated by Google

En los organismos vivos, pero también en la nanotecnología del ADN, se pueden utilizar dobles hélices mediadas por metales para el autoensamblaje de nanomáquinas dinámicas de ADN. Nuestros resultados abren nuevas posibilidades para el desarrollo de nuevos materiales de ADN 3D mediados por metales con mayor resistencia a la degradación térmica, química y posiblemente enzimática debido a la estabilidad adicional proporcionada por los pares de bases mediados por plata.

Contribuciones de los autores: Conceptualización, NAK; metodología, NAK; validación, EBG y NAK; investigación, NAK; redacción: preparación del borrador original, NAK; redacción: revisión y edición, NAK; visualización, EBG; supervisión, NAK Todos los autores han leído y aceptado la versión publicada del manuscrito.

Financiamiento: Esta investigación fue apoyada por el Programa de Investigación Fundamental de la Academia de Ciencias de Rusia (proyecto No. FFZE-2022-0009).

Declaración de disponibilidad de datos: los datos están contenidos en el artículo.

Agradecimientos: Los cálculos se llevaron a cabo en el Centro Conjunto de Supercomputadoras de la Academia de Ciencias de Rusia.

Conflictos de intereses: Los autores declaran no tener conflictos de intereses.

Referencias

1. Yang, H.; Metera, KL; Sleiman, HF ADN modificado con complejos metálicos: aplicaciones en la construcción de nanoestructuras de ADN metálico de orden superior . Coordinación. Química. Rev. 2010, 254, 2403–2415. [Referencia cruzada]
2. Parque, Kansas; Park, HG Aplicaciones tecnológicas que surgen de las interacciones de bases de ADN con iones metálicos. actual. Opinión. Biotecnología. 2014, 28, 17-24. [Referencia cruzada] [PubMed]
3. Scharf, P.; Müller, J. Ácidos nucleicos con pares de bases mediados por metales y sus aplicaciones. ChemPlusChem 2013, 78, 20–34. [Referencia cruzada]
4. Swasey, SM; Gwinn, EG Emparejamientos de bases mediados por plata: hacia nanoestructuras dinámicas de ADN con química mejorada y Estabilidad térmica. Nuevo J. Phys. 2016, 18, 045008. [Referencia cruzada]
5. Albarqouni, Y.; Ali, GA; Hairul, brazo; Chong, KF Sobre el camino de la metalización del ADN: principio, métodos y novedades Aplicaciones. Química. Adv. Madre. 2020, 5, 1–14.
6. Chatterjee, S.; Lou, XY; Liang, F.; Yang, YW Nanopartículas de oro y plata funcionalizadas en superficie para detección colorimétrica y fluorescente de iones metálicos y biomoléculas. Coordinación. Química. Rev.2022 , 459, 214461. [CrossRef]
7. Ibrahim, N.; Jamaluddin, Dakota del Norte; Bronceado, LL; Mohd Yusof, NY Una revisión sobre el desarrollo de biosensores basados en nanopartículas de oro y plata como estrategia de detección de virus ARN emergentes y patógenos. Sensores 2021, 21, 5114. [CrossRef]
8. Funai, T.; Adachi, N.; Aotani, M.; Wada, SI; Urata, H. Efectos de los iones metálicos sobre la estabilidad térmica de los dúplex de ADN que contienen pares de bases no coincidentes homo y heteroquirales: comparación de sustituciones internas y terminales. Nucleósidos Nucleótidos Ácidos nucleicos 2020, 39, 310–321. [Referencia cruzada] [PubMed]
9. Ono, A.; Cao, S.; Togashi, H.; Tashiro, M.; Fujimoto, T.; Machinami, T.; Oda, S.; Miyake, Y.; Okamoto, I.; Tanaka, Y. Interacciones específicas entre iones de plata (i) y pares de citosina-citosina en dúplex de ADN. Química. Comunitario. 2008, 39, 4825–4827. [Referencia cruzada]
10. Chai, Y.; Guo, X.; Leonardo, P.; Seela, F. ADN heteroquiral con hebras complementarias con configuraciones α-d y β-d: pares de bases mediadas por plata y unidas por hidrógeno con el impacto de las 7-desazapurinas que reemplazan a las purinas. Química. euros. J. 2020, 26, 13973–13989. [Referencia cruzada]
11. Jash, B.; Müller, J. Pares de bases mediados por metales: de la caracterización a la aplicación. Química–Eur. J. 2017, 23, 17166–17178. [Referencia cruzada] [PubMed]
12. Sol, Q.; Xie, X.; Canción, Y.; Sun, L. Una revisión sobre los pares de bases de ADN mediados por plata: metodología y aplicación. Biomateria. Res. 2022, 26, 9. [Referencia cruzada] [PubMed]
13. Raju, SK; Karunakaran, A.; Kumar, S.; Sekar, P.; Murugesan, M.; Karthikeyan, M. Complejos de plata como agentes anticancerígenos: A revisión en perspectiva. Ger. J. Farmacéutica. Biomateria. 2022, 1, 6–28. [Referencia cruzada]
14. Sinha, I.; Fonseca Guerra, C.; Müller, J. Un par de bases mediadas por plata (I) altamente estabilizadoras en ADN de cadenas paralelas. Angélica. Química. Int. Ed. 2015, 54, 3603–3606. [Referencia cruzada] [PubMed]
15. Johannsen, S.; Megger, N.; Böhme, D.; Sigel, RKO; Müller, J. Solución Estructura de una doble hélice de ADN con secuencias Pares de bases mediados por metales. Nat. Química. 2010, 2, 229–234. [Referencia cruzada]
16. Mandal, S.; Hepp, A.; Müller, J. Par de bases mediadas por plata dinuclear (i) sin precedentes que involucran la lesión del ADN 1, N6-Etenoadenina. Trans. Dalton. 2015, 44, 3540–3543. [Referencia cruzada] [PubMed]
17. Polonio, F.-A.; Mü ller, J. Un par de bases artificiales, mediado por enlaces de hidrógeno y enlaces de iones metálicos. Angélica. Química. Int. Ed. 2007, 46, 5602–5604. [Referencia cruzada]

Machine Translated by Google

18. Swasey, SM; Leal, LE; López-Acevedo, O.; Pavlovich, J.; Gwinn, EG Plata (I) como pegamento de ADN: emparejamiento de guanina mediado por Ag+ Revelado al eliminar las restricciones de Watson-Crick. Ciencia. Rep. 2015, 5, 10163. [CrossRef] [PubMed]
19. Berdakin, M.; Taccone, Michigan; Pino, Georgia; Sánchez, CG Emisores de plata protegidos por ADN: conmutación de fluoruro dependiente de la carga rescencia. Física. Química. Química. Física. 2017, 19, 5721–5726. [Referencia cruzada]
20. Megger, fiscal del distrito; Müller, J. Se prefiere el autoemparejamiento de citosina mediado por plata (I) a los pares de bases de tipo Hoogsteen con el artificial Nucleobase 1,3-Dideaza-6-Nitropurina. Nucleósidos Nucleótidos Ácidos nucleicos 2010, 29, 27–38. [Referencia cruzada]
21. Ramazanov, RR; Sych, TS; Reveguk, ZV; Maksimov, DA; Vdovichev, AA; Kononov, AI Ag-DNA Emisor: Nanorod de metal o Complejo Supramolecular? J. Física. Química. Letón. 2016, 7, 3560–3566. [Referencia cruzada] [PubMed]
22. Tanaka, Y.; Kondo, J.; Sychrovský, V.; Sebera, J.; Dairaku, T.; Saneyoshi, H.; Urata, H.; Torigoe, H.; Ono, A. Estructuras, propiedades fisicoquímicas y aplicaciones de T – Hg II – T, C – Ag I – C y otros pares de metalobases. Química. Comunitario. 2015, 51, 17343–17360. [Referencia cruzada] [PubMed]
23. Mistry, L.; El-Zubir, O.; Dura, G.; Clegg, W.; Waddell, PG; Papa, T.; Hofer, WA; Wright, NG; Horrocks, BR; Houlton, A. Abordar las propiedades del “Metalo-ADN” con un dúplex supramolecular mediado por Ag (i). Química. Ciencia. 2019, 10, 3186–3195. [Referencia cruzada] [PubMed]
24. Marzilli, LG; Kistenmacher, TJ; Rossi, M. Una extensión del papel del O (2) de los residuos de citosina en la unión de iones metálicos. Síntesis y estructura de un complejo polimérico de plata (I) inusual de 1-metilcitosina. J. Am. Química. Soc. 1977, 99, 2797–2798. [Referencia cruzada] [PubMed]
25. Nakagawa, O.; Aoyama, H.; Fujii, A.; Kishimoto, Y.; Obika, S. Estructura cristalográfica de nuevos tipos de pares de bases mediados por AgI en ADN dúplex no canónico que contiene puentes de 2'-O, 4'-C-metileno. Ácidos nucleicos. Química. euros. J. 2021, 27, 3842–3848. [Referencia cruzada] [PubMed]
26. Hossain, Minnesota; Ahmad, S.; Kraatz, H.-B. Incorporación consecutiva de iones de plata (I) en oligonucleótidos que contienen citosina- Desequilibrios de citosina. ChemPlusChem 2021, 86, 224–231. [Referencia cruzada]
27. Bhai, S.; Ganguly, B. Papel del pH en la estabilidad del desajuste citosina-citosina y los pares de bases canónicos de AT y GC mediados con Ion de plata: un estudio DFT. Estructura. Química. 2022, 33, 35–47. [Referencia cruzada]
28. Zhang, A.; Budow-Busse, S.; Leonardo, P.; Seela, F. 2'-Desoxicitidinas anoméricas y enantioméricas: estabilidad del par de bases en ausencia y presencia de iones de plata. Química–Eur. J. 2021, 27, 10574–10577. [Referencia cruzada] [PubMed]
29. Schönrath, I.; Tsvetkov, VB; Zatsepin, TS; Aralov, AV; Müller, J. Emparejamiento de bases mediado por plata (I) en ADN de cadena paralela que involucra el análogo luminiscente de citosina 1, 3-diaza-2-oxofenoxazina. J. Biol. Inorg. Química. 2019, 24, 693–702. [Referencia cruzada]
30. Manghi, M.; Destainville, N. Física de la dinámica del emparejamiento de bases en el ADN. Física. Representante 2016, 631, 1–41. [Referencia cruzada]
31. Singh, A.; Maity, A.; Singh, N. Estructura y dinámica del dsDNA en entornos similares a células. Entropía 2022, 24, 1587. [CrossRef] [PubMed]
32. Peyrard, M.; Bishop, AR Mecánica estadística de un modelo no lineal para la desnaturalización del ADN. Física. Rev. Lett. 1989, 62, 2755–2758. [Referencia cruzada] [PubMed]
33. Singh, A.; Singh, N. Efecto de la concentración de sal sobre la estabilidad del ADN heterogéneo. Física. A 2015, 419, 328–334. [Referencia cruzada]
34. Knotts, TA; Rathore, N.; Schwartz, CC; De Pablo, JJ Un modelo de grano grueso para el ADN. J. química. Física. 2007, 126, 084901. [Referencia cruzada] [PubMed]
35. Rodrigues Leal, M.; Weber, G. Desnaturalización del ADN de Sharp en un modelo mesoscópico helicoidal. Química. Física. Letón. 2020, 755, 137781. [Referencia cruzada]
36. Zoli, M. Fluctuaciones de pares de bases en modelos helicoidales para ácidos nucleicos. J. química. Física. 2021, 154, 194102. [Referencia cruzada] [PubMed]
37. Valle-Orero, J.; Wildes, AR; Theodorakopoulos, N.; Cuesta-López, S.; Jardín, JL; Danilkin, S.; Peyrard, M. Desnaturalización térmica. del ADN-A. Nuevo J. Phys. 2014, 16, 113017. [Referencia cruzada]
38. Singh, A.; Singh, N. Extracción de moléculas de ADN cortas que tienen defectos en diferentes ubicaciones. Física. Rev.E 2015, 92, 032703. [CrossRef] [PubMed]
39. Oliveira, LM; Largo, AS; Marrón, T.; Fox, KR; Weber, G. Medición de la temperatura de fusión y evaluación mesoscópica de Desajustes de ADN simples, dobles y triples. Química. Ciencia. 2020, 11, 8273–8287. [Referencia cruzada]
40. Silva, LG; Weber, G. El modelo mesoscópico confirma un fuerte enlace mediado por un par de bases metálicas para T – Hg2 + – T y más débil para C – Ag + – C. Química. Física. Letón. 2022, 803, 139847. [Referencia cruzada]
41. Freeman, GS; Hinckley, DM; de Pablo, JJ Un modelo de grano grueso de tres sitios por nucleótido para ADN con iones explícitos. J. química. Física. 2011, 135, 165104. [Referencia cruzada]
42. Florescu, A.; Joyeux, M. Propiedades de desnaturalización térmica y mecánica de un modelo de ADN con tres sitios por nucleótido. J. Química. Física. 2011, 135, 085105. [Referencia cruzada] [PubMed]
43. Sayar, M.; Avşaroglu, B.; Kabakçıoglu, A. Partición por torsión en un modelo de minicírculo de ADN de grano grueso. Física. Rev.E 2010, 81, 041916. [CrossRef] [PubMed]
44. Sambriski, EJ; Ortíz, V.; de Pablo, JJ Efectos de secuencia en la fusión y renaturalización de oligonucleótidos cortos de ADN: estructura y vías mecanísticas. J. Física. Condensa. Asunto 2009, 21, 034105. [CrossRef]
45. Zhang, F.; Collins, MA Simulaciones de modelos de dinámica del ADN. Física. Rev. E 1995, 52, 4217–4224. [Referencia cruzada]
46. Drukker, K.; Wu, G.; Schatz, GC Simulaciones de modelos de dinámica de desnaturalización del ADN. J. química. Física. 2001, 114, 579–590. [Referencia cruzada]
47. Ouldridge, TE; Luis, AA; Doye, JPK Propiedades estructurales, mecánicas y termodinámicas de un modelo de ADN de grano grueso. J. química. Física. 2011, 134, 085101. [Referencia cruzada]

Machine Translated by Google

48. Wong, KY; Pettitt, BM La vía de fusión del ADN oligomérico investigada mediante simulaciones de dinámica molecular. Biofísica. J. 2008, 95, 5618–5626. [Referencia cruzada] [PubMed]
49. Lomzov, AA; Vorobjev, YN; Pyshnyi, DV Evaluación de los cambios de energía libre de Gibbs y las temperaturas de fusión de dúplex ADN/ADN utilizando entalpía de hibridación calculada mediante simulación de dinámica molecular. J. Física. Química. B 2015, 119, 15221–15234. [Referencia cruzada]
50. Kundu, S.; Mukherjee, S.; Bhattacharyya, D. Fusión de doble hélice de ADN polimérico a temperatura elevada: un enfoque de dinámica molecular. J. Mol. Modelo. 2017, 23, 1–10. [Referencia cruzada]
51. Chen, X.; Karpenko, A.; López-Acevedo, O. Doble hélice mediada por plata: parámetros estructurales para un bloque de construcción de ADN robusto. ACS Omega 2017, 2, 7343–7348. [Referencia cruzada] [PubMed]
52. Mistry, L.; Waddell, PG; Wright, NG; Horrocks, BR; Houlton, A. Conformaciones transoides y cisoides en pares de bases de citosina mediadas por plata: los enlaces de hidrógeno dictan interacciones argentofílicas en estado sólido. Inorg. Química. 2019, 58, 13346–13352. [Referencia cruzada] [PubMed]
53. Espinosa Leal, LA; Karpenko, A.; Swasey, S.; Gwinn, EG; Rojas-Cervellera, V.; Rovira, C.; López-Acevedo, O. El papel de los enlaces de hidrógeno en la estabilización de tetrámeros de citosina mediados por plata. J. Física. Química. Letón. 2015, 6, 4061–4066. [Referencia cruzada] [PubMed]
54. Hanwell, MD; Curtis, DE; Lonie, DC; Vandermeersch, T.; Zurek, E.; Hutchison, GR Avogadro: Una semántica avanzada Editor químico, plataforma de visualización y análisis. J. Cheminform. 2012, 4, 4-17. [Referencia cruzada] [PubMed]
55. Van Der Spoel, D.; Lindahl, E.; Hess, B.; Groenhof, G.; Marcos, AE; Berendsen, HJ GROMACS: Rápido, flexible y gratuito. J. Computación. Química. 2005, 26, 1701–1718. [Referencia cruzada] [PubMed]
56. Ivani, I.; Dans, PD; Noy, A.; Pérez, A.; Faustino, I.; Hospital, A.; Walther, J.; Andrio, P.; Goñi, R.; Balaceanu, A.; et al. Parmbsc1: A Campo de fuerza refinado para simulaciones de ADN. Nat. Métodos 2015, 13, 55. [CrossRef]
57. Li, P.; Canción, LF; Merz, KM Parametrización sistemática de iones monovalentes empleando el modelo no enlazado. J. química. Teoría Computadora. 2015, 11, 1645–1657. [Referencia cruzada]
58. Filho, ED; Ruggiero, JR Simulación de enlaces H en ADN utilizando un potencial isoespectral de oscilador armónico. Física. Rev.E Stat. Física. Plasmas Fluidos Relacionados. Interdisciplina. Arriba. 1997, 56, 4486–4488. [Referencia cruzada]
59. Zou, Y.; Xiang, S.; Dai, C. Investigación sobre la eficiencia y precisión de métodos para calcular la temperatura de fusión mediante simulación de dinámica molecular. Computadora. Madre. Ciencia. 2020, 171, 109156. [Referencia cruzada]

Descargo de responsabilidad/Nota del editor: Las declaraciones, opiniones y datos contenidos en todas las publicaciones son únicamente de los autores y contribuyentes individuales y no de MDPI ni de los editores. MDPI y/o los editores renuncian a toda responsabilidad por cualquier daño a personas o propiedad que resulte de cualquier idea, método, instrucción o producto mencionado en el contenido.

Machine Translated by Google

cálculo

MDPI

Artículo

Flujo de fluido por convección natural y transferencia de calor en un Cavidad en forma de valle

Sidhartha Bhowmick [1], Laxmi Rani Roy [1], Feng Xu [2] y Suvash C. Saha [3,*]

[1] Departamento de Matemáticas, Universidad Jagannath, Dhaka 1100, Bangladesh; dr.sidhartha@math.jnu.ac.bd (SB); lrroy.jnu@gmail.com (LRR)
[2] Escuela de Ingeniería Civil, Universidad Jiaotong de Beijing, Beijing 100044, China; fxu@bjtu.edu.cn
3 Escuela de Ingeniería Mecánica y Mecatrónica, Universidad Tecnológica de Sydney, Sydney, NSW 2007, Australia
* Correspondencia: suvash.saha@uts.edu.au

Resumen: El fenómeno de la convección natural es objeto de gran interés de investigación debido a su ocurrencia generalizada tanto en contextos naturales como industriales. Este estudio se centra en investigar fenómenos de convección natural dentro de recintos triangulares, enfatizando específicamente una configuración en forma de valle . Nuestra investigación analiza exhaustivamente la convección inestable, adimensional y que varía en el tiempo, resultante del flujo de fluido natural dentro de una cavidad en forma de valle, donde las paredes inclinadas sirven como superficies calientes y la pared superior funciona como una superficie fría. Exploramos flujos de convección natural inestables en esta cavidad, utilizando aire como fluido operativo, considerando un rango de números de Rayleigh de Ra = 100 a 108 . Además, se examinan varios tiempos adimensionales τ , que van de 0 a 5000, con un número de Prandtl fijo (Pr = 0,71) y una relación de aspecto (A = 0,5). Empleando un marco bidimensional para el análisis numérico, nuestro estudio se centra en identificar mecanismos de flujo inestables caracterizados por diferentes tiempos no dimensionales, incluidos patrones de flujo simétricos, asimétricos e inestables. Los resultados numéricos revelan que los flujos de convección natural permanecen estables en el estado simétrico para valores de Rayleigh que oscilan entre 100 y 7 × 103 . El flujo asimétrico ocurre cuando el Ra supera 7 × 103 . Bajo la condición asimétrica, el flujo llega en una etapa inestable antes de estabilizarse en la etapa completamente formada para 7 × 103 < Ra < 107 . Este estudio demuestra que los flujos periódicos inestables cambian a situaciones caóticas durante la etapa de transición antes de transferirse a un comportamiento periódico en la etapa desarrollada, pero el flujo caótico sigue siendo predominante en el régimen inestable con números de Rayleigh más grandes. Además, presentamos un análisis de la transferencia de calor dentro de la cavidad, discutiendo y cuantificando su dependencia de

Palabras clave: flujo inestable; convección natural; cavidad en forma de valle; bifurcaciones; transferencia de calor

check for updates

Cita: Bhowmick, S.; Roy, LR; Xu, F.; Saha, SC Convección natural Flujo de fluido y transferencia de calor en un Cavidad en forma de valle. Computación 2024, 12, 146. https://doi.org/ 10.3390/computation12070146

Editores académicos: Ali Cemal Benim, Abdulmajeed A. Mohamad, Sang-Ho Suh, Rachid Bennacer, Paweł Oclon y Jan Taler

Recibido: 4 de junio de 2024
Revisado: 11 de julio de 2024
Aceptado: 12 de julio de 2024
Publicado: 14 de julio de 2024

Copyright: © 2024 por los autores. Licenciatario MDPI, Basilea, Suiza. Este artículo es un artículo de acceso abierto. distribuido bajo los términos y condiciones de los Creative Commons Licencia de atribución (CC BY) (https:// creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

1. Introducción

El estudio de la convección natural en espacios confinados ha atraído una atención considerable por parte de los científicos debido a su amplia aplicabilidad en diversas disciplinas [1,2]. Los investigadores han utilizado diferentes tipos de recintos con diversas condiciones límite como configuraciones experimentales para investigar la convección natural, con el objetivo de profundizar nuestra comprensión de los mecanismos de transferencia de calor y la dinámica de fluidos. Este interés surge de la multitud de aplicaciones donde los fenómenos de convección natural son integrales, abarcando campos como la geofísica, el aislamiento de edificios, la gestión de yacimientos geotérmicos y los procesos de separación industrial. Sin embargo, la complejidad de la superficie terrestre, caracterizada por geometrías irregulares altamente influenciadas por terrenos inclinados, plantea desafíos para las configuraciones geométricas tradicionales. A pesar de la prevalencia de formas irregulares tanto en entornos naturales como industriales, la convección natural sigue siendo un tema de estudio continuo debido a su importancia para comprender el comportamiento del flujo de fluidos. Si bien muchas investigaciones se han centrado en la convección natural dentro de recintos cuadrados o rectangulares convencionales debido a su simplicidad [3,4], la investigación de la convección natural dentro de cavidades de forma

Machine Translated by Google

importancia ya que contribuye significativamente a nuestra comprensión de fenómenos como la convección de Rayleigh-Bénard [5,6]. Recientemente, Cui et al. [7] se centró en el estudio de la convección mixta y la transferencia de calor en una cavidad en forma de arco con fuentes de calor internas en condiciones de calentamiento inferior y enfriamiento de la pared superior. Chuhan et al. [8] examinaron el comportamiento térmico de un fluido de ley potencial en una cavidad en forma de plus como resultado de la convección natural, teniendo en cuenta el número de Darcy y la magnetohidrodinámica. Sarangi et al. [9] exploraron la pérdida de calor inducida por la radiación y la convección natural persistentemente laminar en la cavidad de una cocina solar con una cavidad rectangular o trap

Mejorar nuestra comprensión de los flujos de convección natural tiene una importancia capital para mejorar las predicciones de la transferencia de calor y facilitar los mecanismos de control de flujo. Los investigadores intrigados por este fenómeno pueden investigar explicaciones detalladas de los flujos de convección naturales inducidos por la flotabilidad [10]. La convección natural cerca de un límite térmico a menudo se idealiza como un flujo adyacente a una placa plana infinita o semiinfinita térmicamente bien conducida , lo que lleva a la formación de la convección de Rayleigh-Bénard. Los estudios de Manneville y Bodenschatz et al. [11,12] proporcionan información completa sobre los hallazgos de inestabilidad de Rayleigh-Bénard , mientras que Sparrow y Husar [13] se centran en explorar la convección de Rayleigh-Bénard en placas planas inclinadas. La investigación de cavidades con gradientes de temperatura verticales y horizontales revela dos escenarios distintos de flujo de convección libre o natural. Si bien la convección natural se estudia predominantemente en cavidades rectangulares o cuadradas debido a su simplicidad, la investigación de Batchelor [14] ofrece una comprensión significativa de los flujos de convección natural dentro de cavidades calentadas diferencialmente, enfatizando particularmente la influencia de la conducción en la transferencia de calor, especialmente en números de Rayleigh bajos. Cuando el número de Rayleigh excede un umbral, la convección controla la dinámica del flujo. Los primeros estudios han examinado principalmente flujos de convección natural estables [15-17]. El intrigante fenómeno de baroclinidad, engendrado por la pared térmica vertical, instiga flujos de convección espontánea dentro de la cavidad interior a través de corte viscoso en condiciones simétricas [18]. Con números de Rayleigh más bajos , la capa límite térmica proximal a la pared permanece estable, mientras que la inestabilidad convectiva induce ondas viajeras discretas a medida que aumentan los números de Rayleigh [18]. Estudios recientes han profundizado en la dinámica y la naturaleza transitoria de los flujos de convección natural transitorios, basándose en investigaciones anteriores [19,20]. Estos hallazgos contribuyen a nuestra comprensión de la compleja interacción entre los gradientes térmicos y la dinámica de fluidos dentro de espacios confinados, arrojando luz sobre los comportamientos transitorios inherentes a los fenómenos de convección natural. Investigaciones recientes indican la aparición de flujos de convección espontánea inducidos por baroclinidad y convección turbulenta de Rayleigh-Bénard [21]. Rahaman et al. [22,23] exploran flujos de convección natural de transición en un recinto trapezoidal calentado desde abajo , respaldados por investigaciones numéricas, enriqueciendo aún más nuestra comprensión de este complejo fenór

Los flujos de convección natural dentro de cavidades con paredes inclinadas han atraído una atención considerable debido a su prevalencia y facilidad de observación [24]. Específicamente, las investigaciones sobre los flujos de convección naturales dentro de cavidades triangulares han revelado una mejora significativa de la convección de Rayleigh-Bénard , como se documenta en estudios anteriores [5,6]. Una extensa investigación explora las características y los mecanismos de transferencia de calor de los flujos de convección natural dentro de cavidades en forma de ático caracterizadas por gradientes de temperatura entre la superficie inferior y los bordes inclinados [25-31]. En particular, los estudios de Asan y Namli [25,26] y Salman [27] han examinado la inestabilidad y las bifurcaciones de soluciones de flujo de convección natural en cavidades triangulares, revelando evidencia empírica que muestra la profunda influencia de la relación de aspecto y el número de Rayleigh tanto en la temperatura como en la temperatura. y campos de flujo. Los hallazgos analíticos indican que a medida que aumentan los números de Rayleigh , las relaciones de aspecto disminuyen, lo que lleva a la aparición de múltiples patrones c Poulikakos y Bejan [29] investigaron la transmisión de calor y los flujos de convección natural dentro de los espacios del ático durante la noche o en condiciones invernales, estableciendo relaciones de escala y participando en debates sobre la dinámica del flujo de convección natural [30]. Flack [31] dilucida la dinámica del transporte de calor utilizando la relación número de Nusselt-número de Rayleigh , mientras que Holtzman et al. [32] observó la transición de simétrico a asimétrico

Machine Translated by Google

patrones de flujo con números de Grashof crecientes, identificando una bifurcación de Pitchfork basada en datos experimentales. Además, Lei et al. [33] proporcionaron evidencia de la existencia de flujos de convección naturales transitorios dentro de las cavidades del ático, enriqueciendo aún más nuestra comprensión de este complejo fenómeno.

La evolución del flujo bajo calentamiento y enfriamiento repentinos pasa por tres etapas distintas: temprana, de transición y estable o casi estable [33]. Se ha observado que números de Rayleigh más bajos dan como resultado un calentamiento en toda la zona de flujo en lugar de la división de la capa límite térmica, produciéndose una separación de capas a medida que aumentan los números de Rayleigh . Particularmente en escenarios de enfriamiento rápido, el espesor de la capa límite térmica excede la distancia vertical desde el centro de la superficie inclinada hasta el fondo horizontal, especialmente con números de Rayleigh más bajos. La capa límite térmica se estabiliza antes del enfriamiento de la cavidad a medida que aumentan los números de Rayleigh, y el fluido pasa por la superficie inclinada y contacta la punta inferior antes de ingresar al interior. La transmisión de calor del ático ha sido estudiada bajo estímulos térmicos por Saha et al. [34–38]. Además, los investigadores han investigado el comportamiento y la dinámica de transferencia de calor de los flujos de convección natural en cavidades en forma de cuña, sirviendo como modelos para varios cuerpos de agua poco profundos con superficies de fondo inclinadas, como brazos laterales de embalses y costas. Como lo describen Lei y Patterson [39-41], el flujo convectivo dentro de las cuñas pasa por tres etapas desde estados isotérmicos y estacionarios. Mao et al. [42-44] argumentaron que la ubicación horizontal de la cuña determina el modo primario de transferencia de calor y el estado del flujo para diferentes números de Rayleigh, observándose diferentes regímenes de flujo en la zona litoral poco profunda. Bednarz et al. [45] exploraron los flujos de convección natural dentro de cavidades con forma de depósito, observando la formación de dos capas límite de calentamiento: flujo de entrada en el fondo y reflujo inestable debajo del agua para diferentes valores de Grashof. Comprender los flujos de convección natural en cavidades en forma de V es crucial, dada su prevalencia tanto en sistemas naturales como industriales [46-57]. Kenjeres [58] cuantificó la transferencia de calor y los flujos de convección natural turbulentos en cavidades en forma de V, observando que el flujo ascendente aumenta con el aumento de los números de Rayleigh. Kimura et al. [59] utilizaron cámaras abiertas de canal en forma de V en ángulo para

El patrón de flujo y las cantidades de transferencia de calor se midieron meticulosamente en estudios previos [30,31]. A pesar de los exámenes detallados realizados, los flujos de convección natural dentro de un ático o una cavidad triangular en forma de cuña pueden no representar con precisión la dinámica del flujo en una cavidad en forma de V a lo largo del tiempo. Dada su ocurrencia natural, se ha considerado que los flujos de convección natural dentro de recintos triangulares en forma de V con condiciones límite opuestas merecen una investigación exhaustiva. Bhowmick y cols. [60-62] investigaron la transición de un flujo estable simétrico a un flujo inestable asimétrico en un recinto triangular en forma de V, donde el calentamiento se producía desde abajo y el enfriamiento desde arriba. Se observó que diferentes fluidos exhiben distintos comportamientos de movimiento. A pesar de presenciar la transición del flujo regular al caótico en la cavidad en forma de valle calentada desde abajo, los mecanismos que impulsan el flujo inestable en dichas cavidades siguen sin estar claros. Hasta donde saben los autores, ningún estudio ha examinado las estructuras de flujo inestable presentes en varios momentos en la cavidad en forma de valle. Además, es necesario realizar más análisis cuantitativos de la dinámica de la transferencia de calor en tales configuraciones.

Esta revisión de la literatura destaca la importancia de investigar la convección natural inestable en cavidades en forma de V para el aire, proporcionando información valiosa sobre los patrones de flujo, los procesos de transición y los fenómenos de transferencia de calor en dichos sistemas. Sin embargo, sigue siendo imperativo una comprensión integral de la intrincada física que gobierna los mecanismos de flujo inestable dentro de las cavidades en forma de V. El análisis de la literatura existente revela una escasez de estudios que se centren en caracterizar estructuras de flujo inestable en diferentes momentos adimensionales dentro de cavidades en forma de V. Para abordar esta brecha, el presente estudio tiene como objetivo examinar el flujo inestable en una cavidad en forma de valle a través de simulaciones numéricas bidimensionales, considerando aire con números de Rayleigh que van de 100 a 108, un número de Prandtl de 0,71 y una relación de aspecto de 0,5. En este estudio se cubre el impacto de varios valores de Ra y τ en la estructura del flujo, la transferencia de calor y las características del flujo transitorio en la etapa completamente formada de la cavidad en forma de valle . Esta investigación contribuye al conocimiento existe

Machine Translated by Google

mejorando nuestra comprensión de cómo las características de los fluidos afectan el comportamiento del flujo y los procesos de transición. La evolución de los mecanismos de flujo y los cambios dentro de la cavidad se aclaran utilizando las diferencias de temperatura y velocidad a lo largo del tiempo. Estos conocimientos son cruciales para mejorar la eficiencia energética de las aplicaciones de ingeniería y optimizar el diseño de sistemas térmicos como intercambiadores de calor y sistemas de refrigeración. En consecuencia, este estudio está preparado para hacer una contribución novedosa al campo, ofreciendo conclusiones distintas y valiosas que beneficiarán a los especialistas dedicados al modelado y la experimentación del flujo en geometrías complejas.

2. Formulaciones de modelos numéricos

El objetivo principal de este estudio es analizar las características de los flujos de convección natural en una cavidad triangular con configuración en forma de valle. Para lograr esto, se emplea un enfoque de simulación numérica bidimensional. El modelo físico y sus correspondientes condiciones de contorno se representan visualmente en la Figura 1. Para rectificar la singularidad presente en la conexión entre la parte superior y las paredes inclinadas, se realiza un ajuste estratégico eliminando una cantidad adecuada de sustancia de ambas esquinas superiores. En concreto, se extrae cuidadosamente el 4% de la longitud en forma de puntos minúsculos.

Cabe señalar que este ajuste menor no presenta ningún impacto perceptible en la mecánica del flujo de fluido y la transferencia de calor, como lo indican estudios previos [18,20–24,29–31].
Las dimensiones de la cavidad se definen de la siguiente manera: la longitud horizontal es 2L y la altura es H, donde L = 2H y la relación A = H/L = 0,5. En el momento T = T0, el fluido dentro de la cavidad está inicialmente a una temperatura uniforme y no está en movimiento. A una temperatura dada de Tc = T0 − ΔT/2 y Th = T0 + ΔT/2, respectivamente, las paredes superior e inclinada experimentan procesos instantáneos de enfriamiento y calentamiento. En cualquier circunstancia dada, todos los límites permanecen inmóviles.

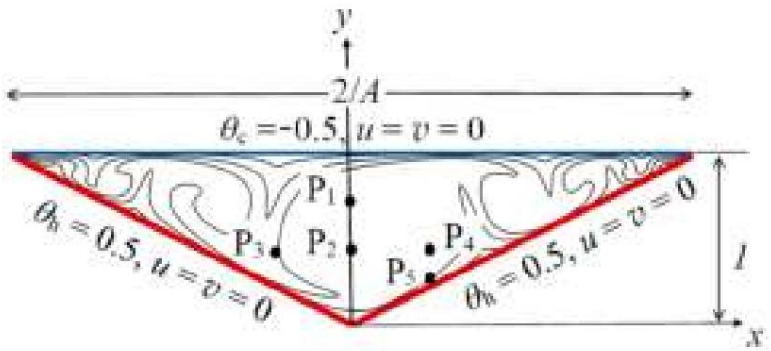


Figura 1. Dominio físico y condiciones de contorno adimensionales con los puntos de cálculo P1 (0, 0,825), P2 (0, 0,46), P3 (−0,5, 0,5), P4 (0,5, 0,5) y P5 (0,5, 0,255).), que se aplican en las siguientes figuras.

Este estudio analiza flujos de convección natural bidimensionales dentro de un recinto en forma de valle. Las ecuaciones rectoras empleadas en esta investigación se presentan a continuación, utilizando la aproximación de Boussinesq como supuesto simplificador [62].

$$\frac{\partial U}{\partial X} + \frac{\partial V}{\partial Y} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial U}{\partial t} + U\frac{\partial U}{\partial X} + V\frac{\partial U}{\partial Y} = -\frac{\partial P}{\partial X} + \frac{1}{\rho}\left(\frac{\partial^2 U}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial Y^2}\right), \quad (2)$$

$$\frac{\partial V}{\partial t} + U\frac{\partial V}{\partial X} + V\frac{\partial V}{\partial Y} = -\frac{\partial P}{\partial Y} + \frac{1}{\rho}\left(\frac{\partial^2 V}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial Y^2}\right) + g\beta(T - T0), \quad (3)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + U\frac{\partial T}{\partial X} + V\frac{\partial T}{\partial Y} = k\left(\frac{\partial^2 T}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial Y^2}\right). \quad (4)$$

Machine Translated by Google

U y V en las ecuaciones, respectivamente, representan los caudales horizontal y vertical . Para un sistema de coordenadas bidimensional: •

P es la presión; • ρ es
la densidad; t es el
• tiempo;
• T es la temperatura, en el momento T0, donde T0 = (Tc + Th)/2, el medio fluido en el

La cavidad triangular es isotérmicamente estacionaria.

Las variables adimensionales utilizadas son las siguientes:

$$x = \frac{X}{h}, \; y = \frac{Y}{h}, \; tu = \frac{OH}{1\,kRa\,2}, \; v = \frac{VH}{\kappa Ra\,2}, \; p = \frac{PH2}{\rho\kappa 2Ra}, \; \theta = \frac{T - T\infty}{Th - Tc}, \; \tau = \frac{t\kappa Ra2H2}{} . \quad (5)$$

En las ecuaciones antes mencionadas, las variables v, x, y, p, τ y θ representan las contrapartes normalizadas de U, V, X, Y, P, t y T, respectivamente. Las tres variables gobernantes, la relación de aspecto (A), el número de Prandtl (Pr) y el número de Rayleigh (Ra), tienen un impacto en los flujos convectivos naturales del recinto (ver [6] para más detalles), que se describen mejor a continuación. :

$$Una = \frac{h}{l}, \; pr = \frac{v}{k}, \; ra = \frac{g\beta(Th - Tc)H3}{v\kappa} . \quad (6)$$

Se suman las variables adimensionales anteriores y luego las ecuaciones (1) a (4) se convierten (por más información, ver [61]):

$$\frac{\partial u}{} + \frac{\partial v}{\partial x \partial y} = 0 , \quad (7)$$

$$\frac{\partial u}{} + u\frac{\partial u}{\partial x} + v\frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{pr}{\frac{1}{2}}\left(\frac{\partial 2u}{\partial x 2} + \frac{\partial 2u}{\partial y 2}\right), \quad (8)$$

$$\frac{\partial v}{} + u\frac{\partial v}{\partial x} + v\frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{pr}{\frac{1}{2}}\left(\frac{\partial 2v}{\partial x 2} + \frac{\partial 2v}{\partial y^2}\right) + Pr\theta , \quad (9)$$

$$\frac{\partial \theta}{} + u\frac{\partial \theta}{\partial x} + v\frac{\partial \theta}{\partial y} = \frac{pr}{\frac{1}{2}}\left(\frac{\partial 2\theta}{\partial x 2} + \frac{\partial 2\theta}{\partial y 2}\right) . \quad (10)$$

El presente estudio utilizó un solucionador Navier-Stokes de volumen finito [62], Fluent 15.0 en ANSYS, para modelar la convección natural dentro de una cavidad en forma de valle. Los principios de conservación de masa, conservación de momento y conservación de energía son los fundamentos del modelo computacional que se utiliza para simular un flujo de convección natural inestable en una cavidad de aire. La ecuación de continuidad, las ecuaciones de Navier-Stokes y las ecuaciones de energía se resolvieron utilizando métodos de volumen finito después de aplicar las técnicas numéricas apropiadas. El sistema de malla 2D no uniforme se crea con la ayuda del software comercial ICEM 15.0, y los resultados numéricos se muestran gráficamente con la ayuda del programa de postprocesamiento TECPLOT 360.

Las ecuaciones rectoras (7) a (10) se resuelven mediante una técnica de volumen finito utilizando el método SIMPLE, que se explica detalladamente en la referencia [63] y Saha [64]. El procedimiento numérico para el método SIMPLE se muestra en la Figura 2.

Machine Translated by Google

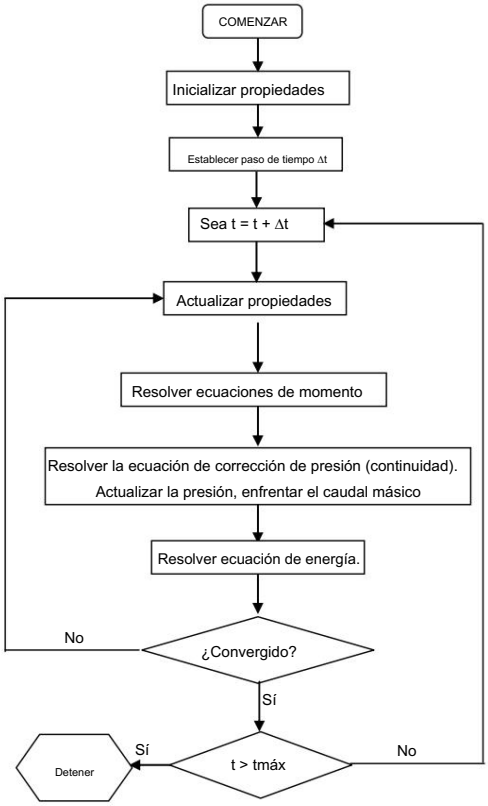


Figura 2. Diagrama de flujo del método SIMPLE para flujo transitorio.

3. Prueba de dependencia de la red

La dependencia de la malla y del paso de tiempo del mayor número de Rayleigh (Ra = 108) para el En la presente investigación se investigaron el número de Prandtl (Pr = 0,71) y la relación de aspecto (A = 0,5). En la prueba se emplearon tres mallas simétricas y no uniformes, con dimensiones de 600 × 100, 800 × 150 y 1200 × 200. Estas mallas fueron diseñadas para tener rejillas más finas. cerca de los límites y rejillas más gruesas en la zona interior. La malla de 800 × 150 fue sometida una expansión del 3%, que va desde un ancho mínimo de 0,00025 cerca de la pared hasta un máximo ancho de 0,02 en el interior. La Figura 3 ilustra la serie temporal del número de Nusselt en la pared derecha de la cavidad. Los datos se obtuvieron utilizando diferentes mallas y pasos de tiempo. para un número de Rayleigh de 108 . Los números de Nusselt obtenidos de las diferentes mallas y los pasos de tiempo muestran uniformidad durante la etapa inicial, junto con cierta divergencia durante la etapa madura. Además, la Tabla 1 proporciona un cálculo y una lista del promedio Números de Nusselt durante la etapa de pleno desarrollo. Con base en el análisis realizado se tiene Se ha determinado que las variaciones en los resultados observados a través de las diferentes mallas y los pasos de tiempo están dentro del umbral aceptable del 2%. Tomando esto en consideración, el La simulación numérica en este estudio utilizó un tamaño de malla de 800 × 150 y un paso de tiempo de 0,0025.

Tabla 1. Números de Nusselt (Nu) para diferentes grillas y pasos de tiempo.

Malla y paso de tiempo	Nu promedio	Diferencia
600 × 100 y Δτ = 0,0025 800 ×	121,63	1,94%
150 y Δτ = 0,00125 800 × 150 y	122,47	1,27%
Δτ = 0,0025 1200 × 200 y Δτ =	124,04	-
0,0025	122,95	0,87%

Machine Translated by Google

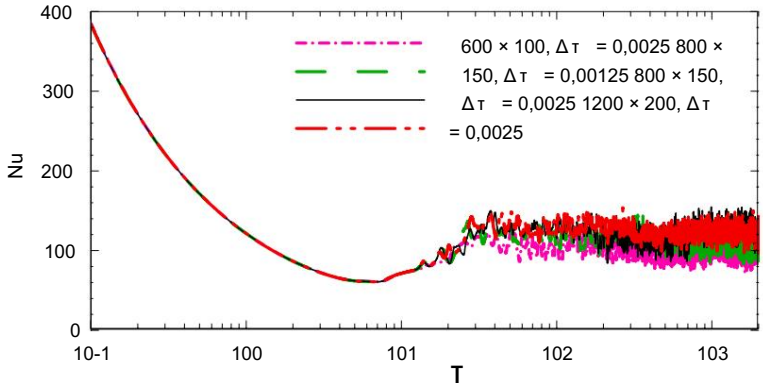


Figura 3. Serie temporal de números de Nusselt en la pared inclinada derecha de la cavidad en forma de valle para Ra = 108 con cuadrículas y pasos de tiempo definidos.

4. Validación

La Figura 4 compara el experimento de laboratorio realizado por Holtzman et al. [32] con los resultados numéricos actuales para confirmación adicional. A diferencia de la cavidad triangular en este estudio, está invertida verticalmente y se han empleado los números de Rayleigh en lugar de los números de Grashof correspondientes. En comparación con los resultados experimentales en Figura 4b para los números de Rayleigh Ra = 3,5 × 103 , Figura 4d para Ra = 7 × 103 y Figura 4f para Ra = 7 × 104, los resultados numéricos que representan el flujo simétrico para Ra = 7 × 103 en la Figura 4a y el flujo asimétrico para Ra = 1,2 × 104 y Ra = 105 en la Figura 4c,e son precisos. Como indican Xu et al. [18] y Patterson y Armfield [20], la presencia de inconsistencias entre los valores numéricos de Ra y los hallazgos experimentales de Ra da lugar a una contradicción notable: si los hallazgos numéricos y los resultados del experimento son precisos, el número de Rayleigh experimental es aproximadamente de 1,5 a 2,5 veces. el número numérico de Rayleigh. Los métodos numéricos utilizados en esta investigación se pueden utilizar para representar un flujo de transición en una cavidad triangular, ya que los resultados experimentales y computacionales son idénticos.

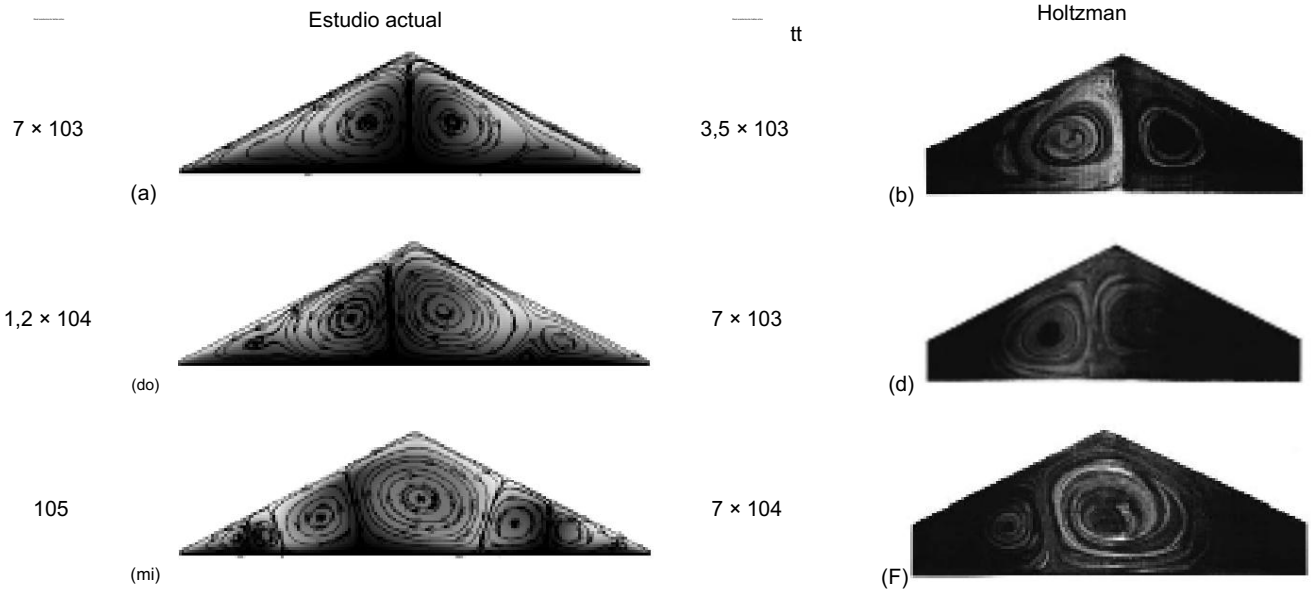


Figura 4. Comparación de los resultados experimentales de Holtzman (b,d,f) [32] para diferentes números de Rayleigh con el estudio actual (a,c,e).

5. Resultados numéricos y discusión

La sección siguiente proporciona una explicación de las características principales del fluido que fluye dentro de una cavidad en forma de V, en donde el flujo es estimulado por el calor del

Machine Translated by Google

paredes inclinadas y se disipa por enfriamiento desde la pared superior. El análisis se centra en una variedad de números de Rayleigh, que van desde , un número de Prandtl, Pr = 0,71, y un Ra = 100 hasta 108 de relación de aspecto, A = 0,5. Se consideran varios tiempos adimensionales para examinar exhaustivamente el fenómeno del crecimiento del flujo. En este trabajo se ha realizado una simulación numérica 2D. Según las simulaciones numéricas, la evolución del flujo para estos números de Rayleigh en diferentes tiempos desde τ = 0 hasta 5000 se puede dividir en flujo simétrico, flujo asimétrico y flujo inestable.

Para producir los resultados de la simulación utilizamos instalaciones informáticas de alto rendimiento con 64 procesadores, con lo que se necesitaron 15 días para un Ra pequeño = 105 y 20 días para un Ra grande = 108 para tiempo adimensional, τ = 5000 con paso de tiempo tamaño, Δτ = 0,0025.

5.1. Flujo Simétrico Se

descubrió que para Ra = 100 , 101 y 102 , el desarrollo del flujo de transición con el tiempo adimensional no exhibió una pluma creciente o decreciente, lo que indica que para esos números de Rayleigh, el flujo exhibió un nivel continuo de estabilidad debido a la influencia predominante de la dominancia de la conducción. En este estudio, los resultados para Ra = 100 , 101 y 102 en τ = 0, 0,1, 0,5, 1 y 2000 se incluyen en la Figura 5. Inicialmente, en τ = 0, la temperatura es constante y, en este momento, hay No hay flujo de fluido en la cavidad. Los flujos de fluido se desarrollan cuando las paredes inclinadas se calientan repentinamente y la pared superior se enf En la Figura 5, la temperatura cambia rápidamente para Ra = 100 y 101 pequeños en τ = 0,1 y se vuelve simétrica, pero para Ra = 102 se vuelve simétrica en τ = 0,5 y esta tendencia simétrica se observa desde τ = 0,5 hasta 2000. Para Todos los valores de Ra y τ , la cavidad contiene un par de celdas simétricas. Los flujos convectivos exhiben magnitudes relativamente bajas, y las células tienen un dominio de conducción predominante que proporciona estabilidad.

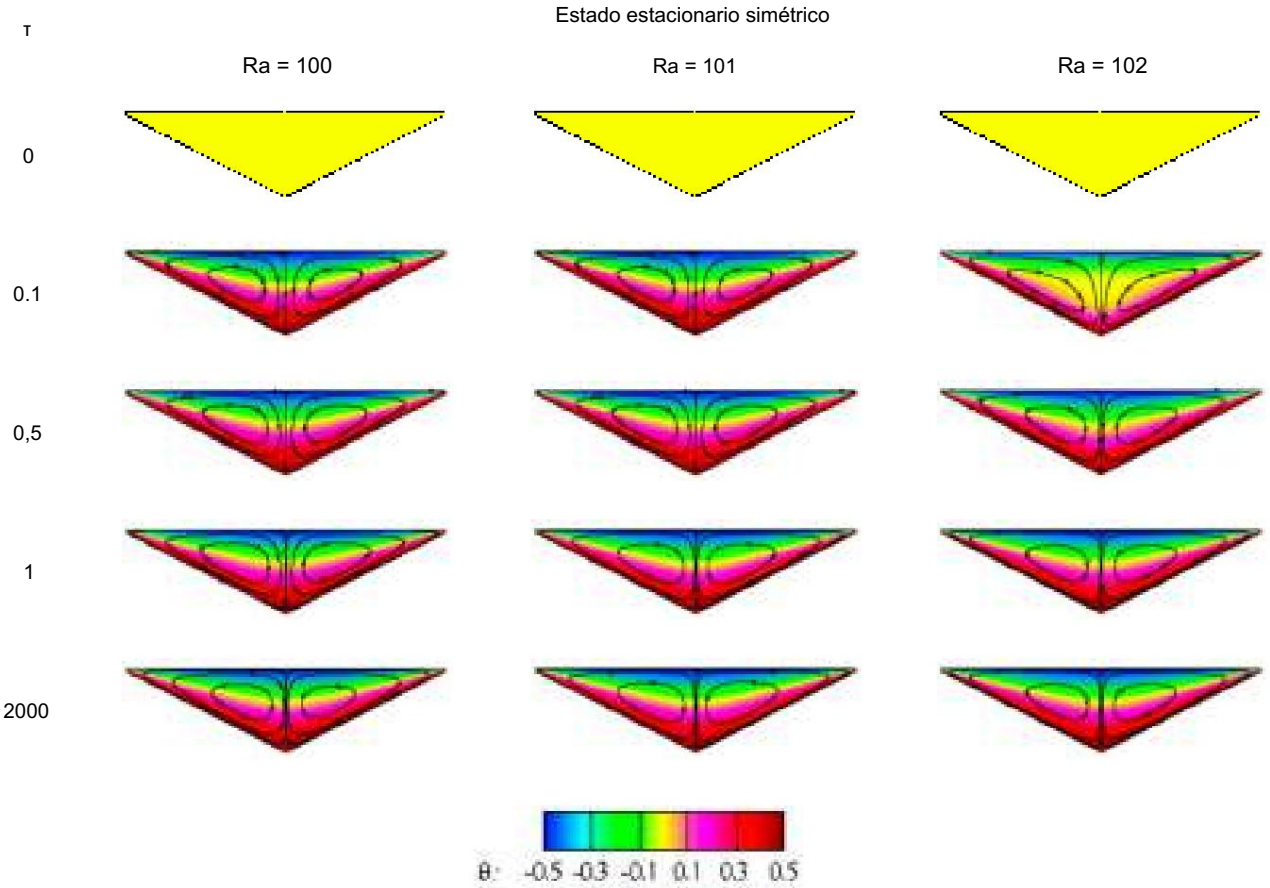


Figura 5. Líneas de corriente e isotermas en varios intervalos de tiempo adimensionales, τ , y diferentes números pequeños de Rayleigh, Ra, para el estado estacionario simétrico.

f

τ

Machine Translated by Google

5.2. Flujo asimétrico

El flujo de diferentes números de Rayleigh de Ra = 103 7 × 103 y 2 × 104 se muestran en la Figura 6 en función del tiempo con las líneas de corriente e isotermas mostradas. Inicialmente, en τ = 0, la temperatura es constante y ningún fluido se mueve en la cavidad. Los flujos de fluido comienzan cuando las paredes inclinadas se calientan repentinamente y la pared superior se enfría repentinamente. En la Figura 6, la temperatura cambia gradualmente para Ra = 103 y 7 × 103 en τ = 0,1 y se vuelve simétrica, mientras que para Ra = 2 × 104 se vuelve simétrica en τ = 1. En la etapa inicial , cuando τ = 1, la Los flujos estacionarios para todos los números de Rayleigh son simétricos. La cavidad tiene dos celdas simétricas. Dado que las células tienen un dominio de conducción que las mantiene eternamente estables, los flujos convectivos son realmente extremadamente bajos. La baroclinidad cerca de las paredes inclinadas produce corte viscoso, lo que induce flujos de convección natural en el estado simétrico fundamental, pero a medida que pasa el tiempo, el flujo para Ra = 7 × 103 y 2 × 104 comienza a volverse gradualmente asimétrico. Como muestra la figura, en la etapa de transición inicial en τ = 1, la convección en Ra = 7 × 103 y 2 × 104 aumenta, aunque no es lo suficientemente fuerte como para alterar la estructura de flujo simétrica (ver Figura 7), mientras que la la convección en Ra = 103 permanece estática. Aunque sólo hay dos celdas cuando Ra = 103 y Ra = 7 × 103, se producen cuatro celdas en la cavidad para Ra = 2 × 104 en τ = 10. Es decir, aparte de la ruptura simétrica, el número de Rayleigh provoca un aumento en el número de células en la cavidad. Cabe señalar que dependiendo de las perturbaciones iniciales, cualquiera de las dos células puede ser más grande y avanzar hacia la cavidad. Se encuentra que la convección de Ra = 103 es constante y débil en todas las etapas posteriores del tiempo, como τ = 100, 1000, 2000 y 4000, pero la convección en Ra = 7 × 103 se vuelve más fuerte lentamente en τ = 100, 1000. , 2000 y 4000, aunque no es suficiente para romper el estado simétrico. Por otro lado, para Ra = 2 × 104 la convección crece tan fuertemente que rompe la estructura simétrica y crea más de dos nuevas celdas, lo cual es evidente en τ = 100, y el flujo se vuelve asimétrico (en la Figura 7). Hay seis celdas presentes para Ra =,2 × 104 en τ = 100 y 1000. Dependiendo de las perturbaciones iniciales, una de las dos celdas en τ = 1000 se vuelve más grande y domina a la otra celda en la cavidad, moviéndose hacia el centro de la cavidad. En τ = 2000, el número de células disminuye a cinco, y esta tendencia persiste hasta τ = 4000. Tras un examen cuidadoso, es evidente que durante la etapa de desarrollo posterior, el flujo asimétrico ha alcanzado un estado de equilibrio comúnmente conocido como situación de estado estacionario. La transición de un estado simétrico a uno asimétrico, que ocurre dentro del rango de Ra = 7 × 103 a Ra = 2 × 104, puede entenderse como una bifurcación supercrítica de Pitchfork. Esta transformación está impulsada por la aparición de la inestabilidad de Rayleigh-Bénard . Se ve que hay más circulación de células y que el patrón de flujo se vuelve continuamente asimétrico.

,

La Figura 7 muestra la serie temporal de temperatura y velocidad para Ra = , Ra = 7 × 103, 103 y Ra = 2 × 104 en diferentes puntos P1, P2 y P5. El fluido dentro de la cavidad en forma de valle exhibe inicialmente un comportamiento isotérmico y estacionario. El enfriamiento y calentamiento de la pared superior y las paredes inclinadas ocurren simultáneamente, con una temperatura adimensional indicada como θc para la pared superior y θh para las paredes inclinadas. La Figura 7a demuestra que no hay diferencia de temperatura entre ninguno de los puntos P1 y P2, y la temperatura es diferente en el punto P5 en la etapa inicial para un pequeño Ra = 103 . Como resultado del paso del tiempo, la temperatura aumenta y disminuye en los tres puntos diferentes del período de transición. Finalmente, no hay fluctuación de temperatura en la etapa completamente desarrollada y luego el flujo se vuelve estable. Para mayor precisión de la estabilidad del flujo, aquí hemos utilizado tiempos adimensionales de 0 a 5000. En la Figura 7d, inicialmente, la velocidad es cero; a medida que aumenta el tiempo, la velocidad sigue siendo la misma en los puntos P1 y P2; y en el punto P5, la velocidad aumenta y finalmente se vuelve constante. Consecuencias similares se han visto en la Figura 7b,e. Las figuras indican claramente que el flujo dentro de la cavidad se encuentra en un estado de simetría constante. A partir de esto, parecería que el flujo es siempre estable en e Ahora, en la Figura 7c, la temperatura disminuye repentinamente y luego aumenta en los puntos P1 y P2 durante el período de transición y finalmente se estabiliza en la etapa de desarrollo completo. En el punto P5 no hay cambios debido a su posición. Sin embargo, la velocidad (Figura 7f)

Machine Translated by Google

claramente se sobrepasa repentinamente y luego se vuelve constante en la etapa completamente formada, y indica que el flujo se vuelve un estado estacionario asimétrico para Ra = 2 × 104 .

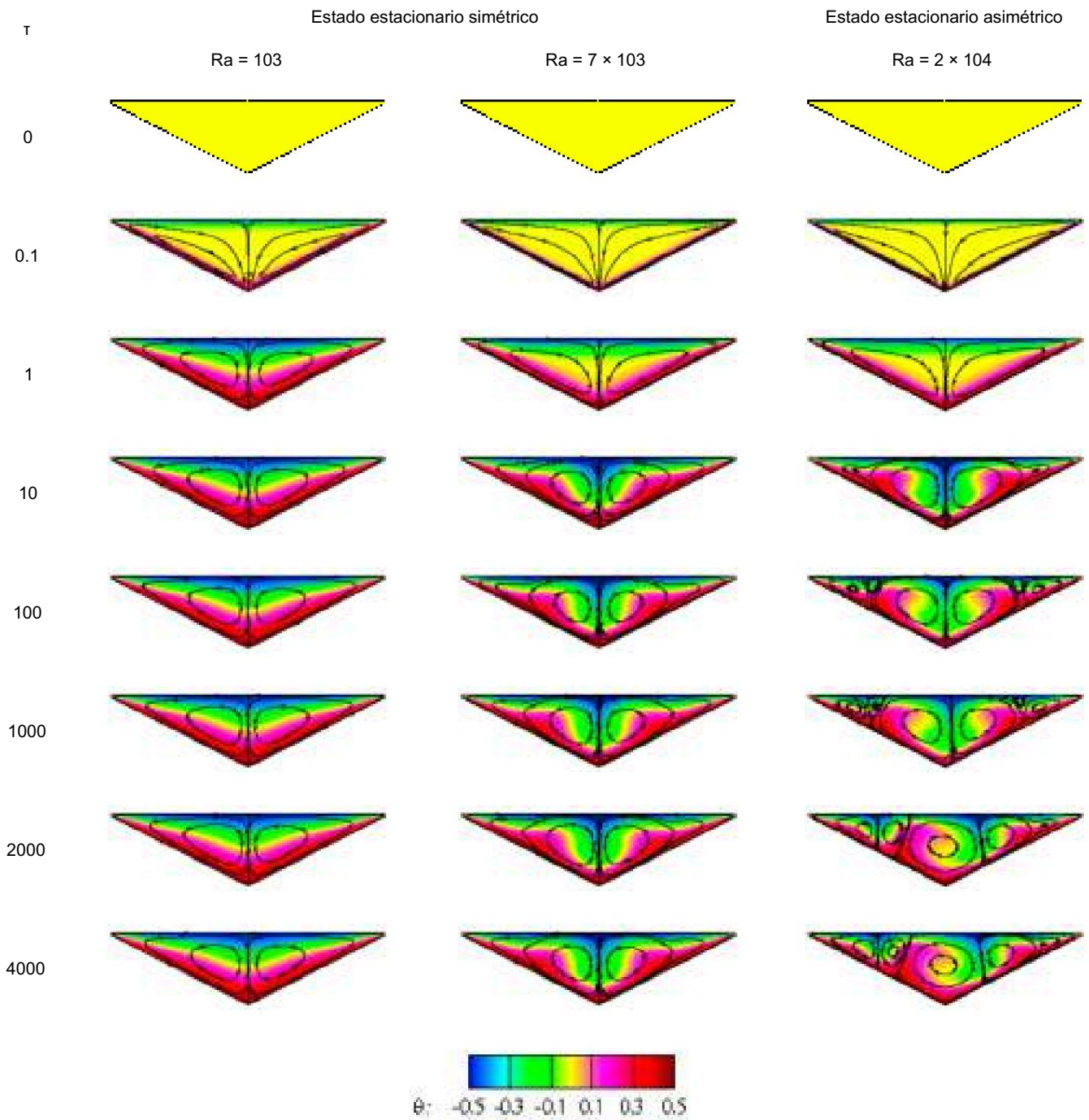


Figura 6. Líneas de corriente e isotermas en varios intervalos de tiempo adimensionales para el estado estacionario Números de Rayleigh, Ra = 103, Ra = 7 × 103 y Ra = 2 × 104 .

Machine Translated by Google

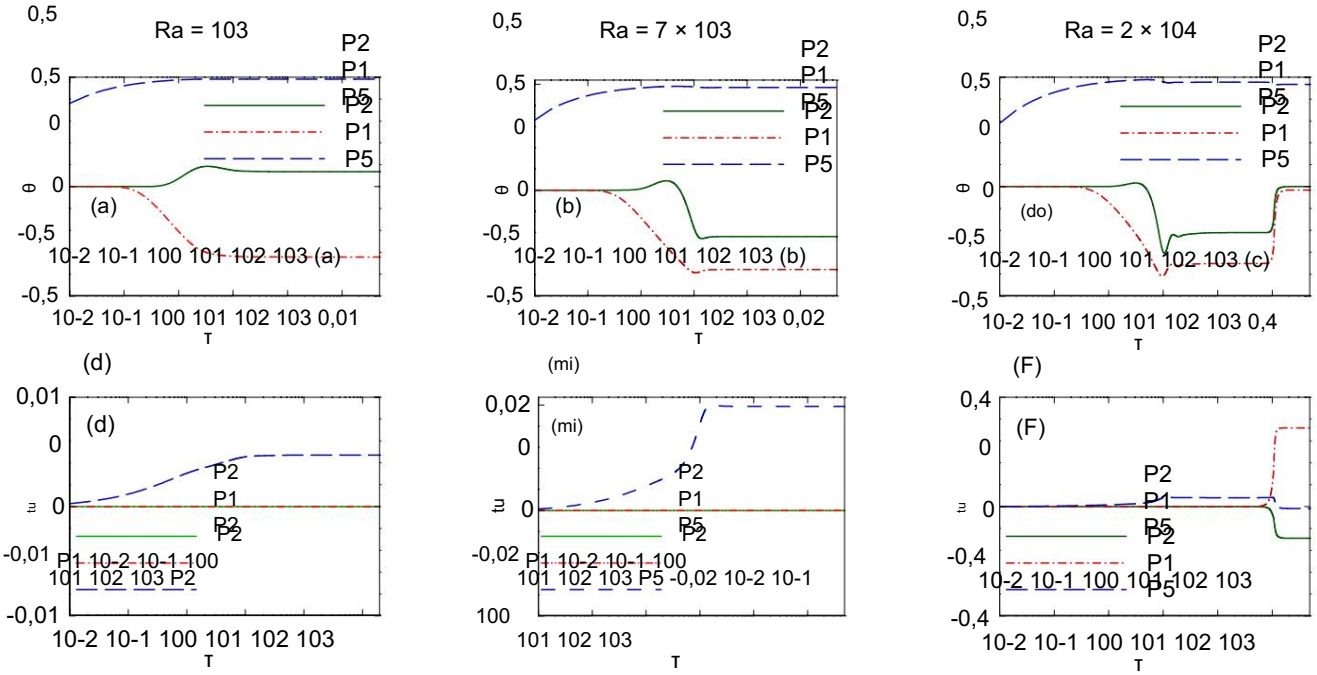


Figura 7. Serie temporal de temperatura y velocidad en tres puntos distintos, P1 (0, 0,825), P2 (0, 0,46) y P5 (0,5, 0,255), para (a,d) cuando Ra = , para (b,e) cuando Ra = 7 × 103, y para (c,f) cuando 103 Ra = 2 × 104 .

5.2.1. Bifurcación de horquilla

La Figura 8 ilustra las isotermas y líneas de corriente correspondientes a un número de Rayleigh de Ra = 104 . La Figura 8a demuestra la presencia continua de una clara simetría en el flujo en Ra = 7 × 103 . En Ra = 104 y Ra = 1,3 × 104, el flujo muestra asimetría, como se muestra en la Figura 8b,c. Cabe señalar que, dependiendo de las perturbaciones iniciales, cualquiera de las dos células podría crecer y moverse hacia la cavidad. Cuando el número de Rayleigh alcanza un valor de Ra = 1,3 × 104 como se muestra en la Figura 8c, emerge una celda adicional en la región superior derecha de la cavidad (dependiendo de las perturbaciones iniciales), y dicha configuración de flujo asimétrica se vuelve más claramente evidente. a medida que aumenta el valor del número de Rayleigh . Es decir, aparte de la ruptura simétrica, el número de Rayleigh es responsable del creciente número de células dentro de la cavidad. Por ejemplo, la Figura 8b tiene cuatro celdas para Ra = 104, mientras que la Figura 8c tiene cinco celdas para Ra = 1,3 × 104 . La transición observada Ra = 104, alrededor de donde un estado simétrico se transforma a un estado asimétrico, puede caracterizarse como una bifurcación supercrítica de Pitchfork, que ocurre cuando la inestabilidad de Rayleigh-Bénard comienza a ocurrir.

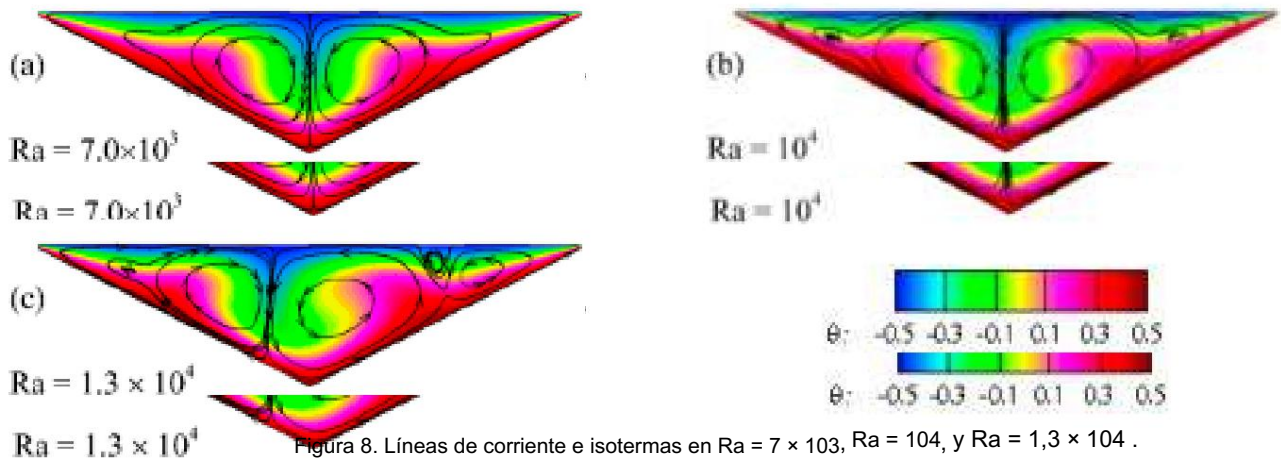


Figura 8. Líneas de corriente e isotermas en Ra = 7 × 103, Ra = 104, y Ra = 1,3 × 104 .

Machine Translated by Google

La Tabla 2 presenta la velocidad x en el punto P2 (0, 0,46) para varios números de Rayleigh (Ra = 101 a 106) para comprender la transición de un estado simétrico a uno asimétrico durante la etapa completamente desarrollada (τ = 2000) de la bifurcación Pitchfork. Para valores de Ra menores mayor o igual a 7,5 × 103, la velocidad x es casi cero debido a la simetría del flujo. Una vez que el número de Rayleigh alcanza o supera 7,6 × 103, La polaridad de la célula cambia a positiva. cuando la velocidad x aumenta y negativo cuando la velocidad x disminuye.

Tabla 2. Velocidades en la dirección x para diferentes números de Rayleigh en el punto P2 (0, 0,46).

Número de Rayleigh	Velocidad
101	0
102	0
103	0
7,5 × 103	0
7,6 × 103	±9,47 × 10-5
104	±0,00669
1,2 × 104	±0,0557
1,5 × 104	±0,09
105	±0,096
106	±0,0993

En la etapa inicial en τ = 0, la temperatura es constante, como se muestra en la Figura 9. La La figura indica que los flujos son simétricos y continuos en la etapa inicial en τ = 1. para Ra = 5 × 104, Ra = 105 y Ra = 106 . La bifurcación Pitchfork hace que el flujo intensificarse con el tiempo y eventualmente volverse asimétrico. Los gráficos muestran la asimetría. líneas de corriente e isotermas en números de Rayleigh Ra = 5 × 104, Ra = 105 y Ra = 106 en el etapas de transición (τ = 100 y 800). Sin duda es interesante que el flujo oscila durante una cantidad de tiempo considerable con un número de Rayleigh más alto. En esta figura, para todos los Ra valores, los flujos en la cavidad en forma de valle son asimétricos y constantes con el paso de tiempo. Para un Ra mayor = 106, el flujo se vuelve asimétrico y estable en τ = 800, mientras que Ra = 5 × 104 y Ra = 105 tardan más en alcanzar la situación de estado estacionario asimétrico.

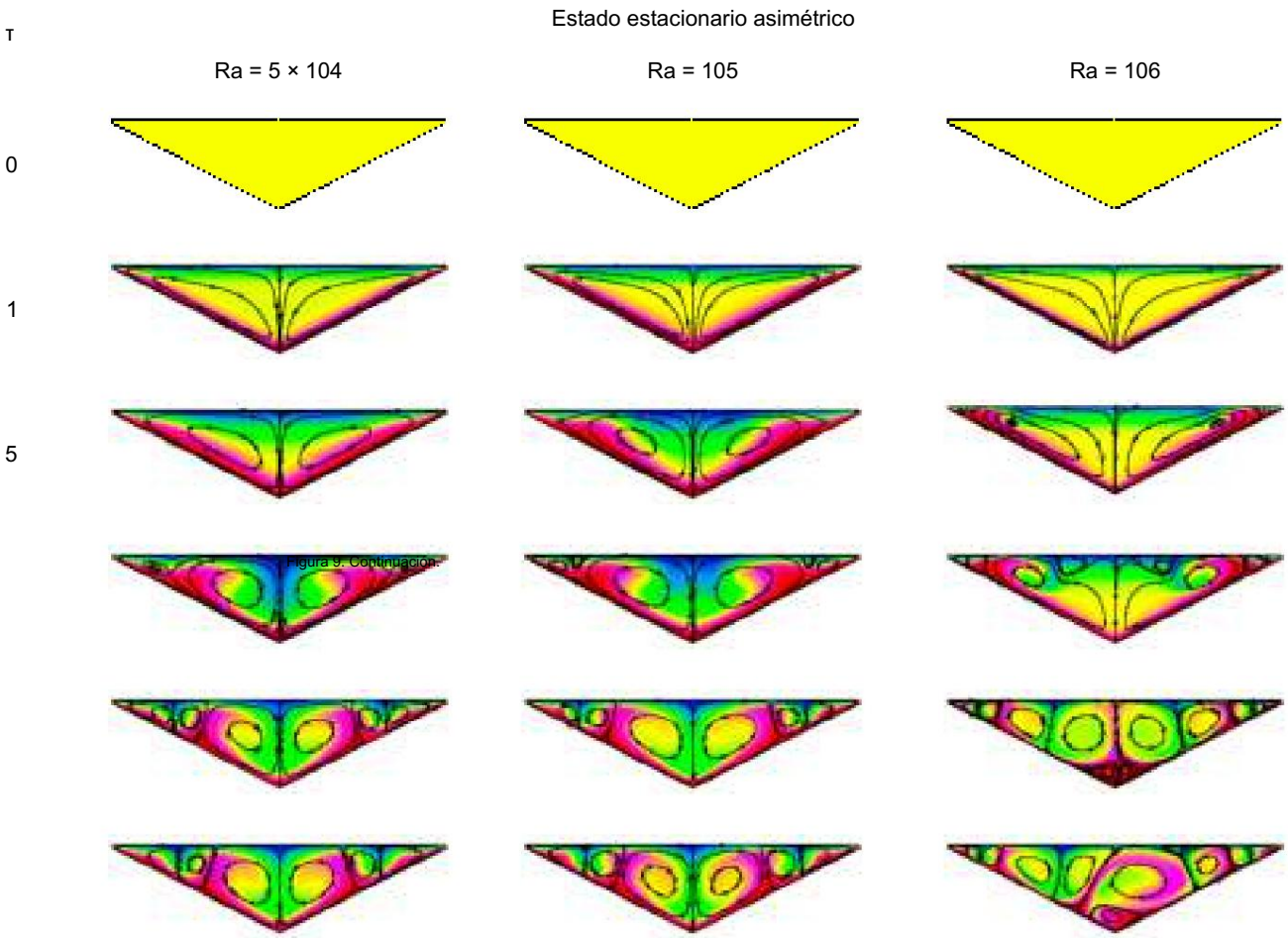


Figura 9. Continuación.

Machine Translated by Google

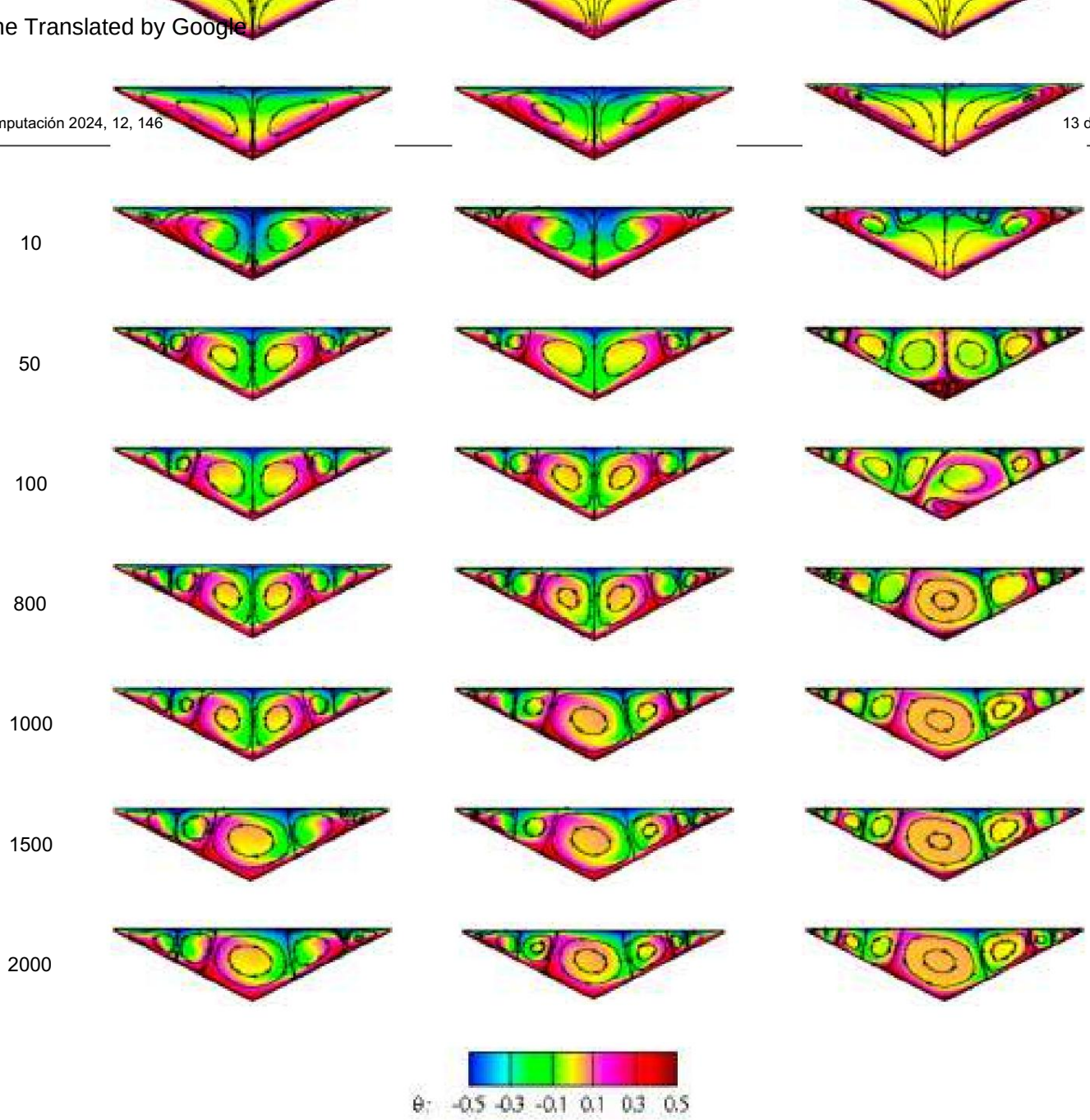


Figura 9. Líneas de corriente e isotermas en varios intervalos de tiempo adimensionales para Ra = 5 × 104, Ra = 105 y Ra = 106 .

Claramente, el efecto de la temperatura y la velocidad sobre el flujo en la cavidad con el tiempo, como ha ocurrido se ha calculado en la Figura 10 para mayor precisión en un rango de números de Rayleigh y varios agujas. Las figuras 10a,b demuestran que, al principio, las temperaturas son uniformes en los puntos P1 y P2, pero el punto P5 está ubicado cerca de la pared calentada (ver Figura 1), lo que hace que se caliente arriba más rápidamente que los otros puntos en la etapa inicial. A medida que pasa el tiempo, la temperatura en la etapa de transición primero cae y luego sube, alcanzando finalmente su punto constante en su etapa de pleno desarrollo, cuando ya no hay variaciones de temperatura. También, En la Figura 10d,e, se ve claramente que la velocidad aumenta con el paso del tiempo. El La velocidad se sobrepasa en el período de transición antes de estabilizarse en el período plenamente desarrollado. escenario. La Figura 10c muestra que la temperatura aumenta en la etapa de transición y se vuelve estable en la etapa de pleno desarrollo. Por el contrario, la velocidad en la Figura 10f fluctúa durante el período de transición antes de volverse constante durante la última etapa. lo anterior Las cifras y los análisis indican que en un estado asimétrico, el flujo se vuelve inestable en el período de transición y luego estable en las etapas de pleno desarrollo.

Machine Translated by Google

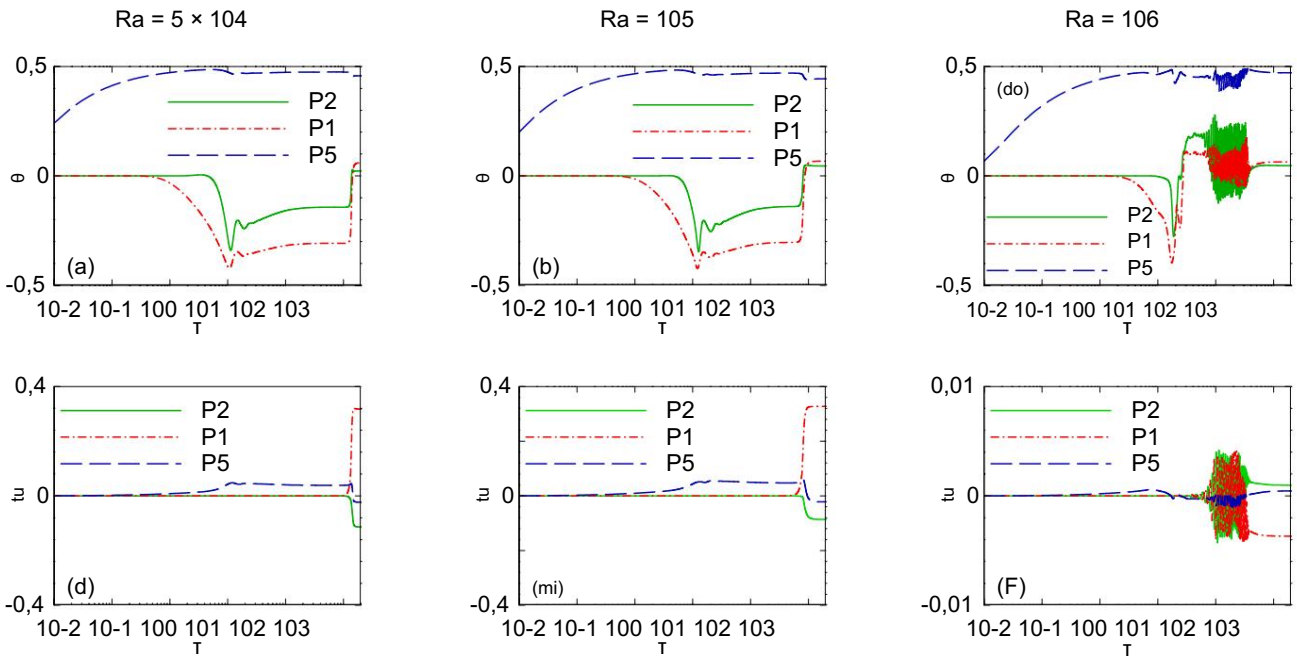


Figura 10. Serie temporal de temperatura y velocidad en tres puntos distintos, P1 (0, 0,825), P2 (0, 0,46) y P5 (0,5, 0,255), para (a,d) cuando Ra = 5 × 104 , para (b,e) cuando Ra = 105, y para (c,f) cuando Ra = 106 .

5.2.2. Otras bifurcaciones

Para números de Rayleigh más altos, las isotermas y líneas de corriente asimétricas se representan en la Figura 11. Es evidente que cuando el número de Rayleigh aumenta, se producen varios tipos de bifurcaciones adicionales, lo que lleva a un aumento en el número de celdas, como se ve en la Figura 11 . Figura 11a, hay dos celdas en la cavidad. Con el aumento de Ra, vemos en la Figura 11b que el número de celdas pasa a ser cuatro; en la Figura 11c, el número de celda es cinco. Por ejemplo, el número de células aumenta de seis con un número de Rayleigh de 5 × 104 en la Figura 11d a más de seis, como se muestra en la Tabla 3. La Figura 11 demuestra que cuando el número de Rayleigh aumenta, se desarrollan más células diminutas nuevas en el lado izquierdo o derecho. lado derecho de la cavidad. Sin embargo, una sola célula grande persiste constantemente en el centro de la cavidad. Esto indica que la configuración del flujo dentro de la cavidad se vuelve cada vez más compleja para un estado estacionario asimétrico cuando el número de Rayleigh aumenta.

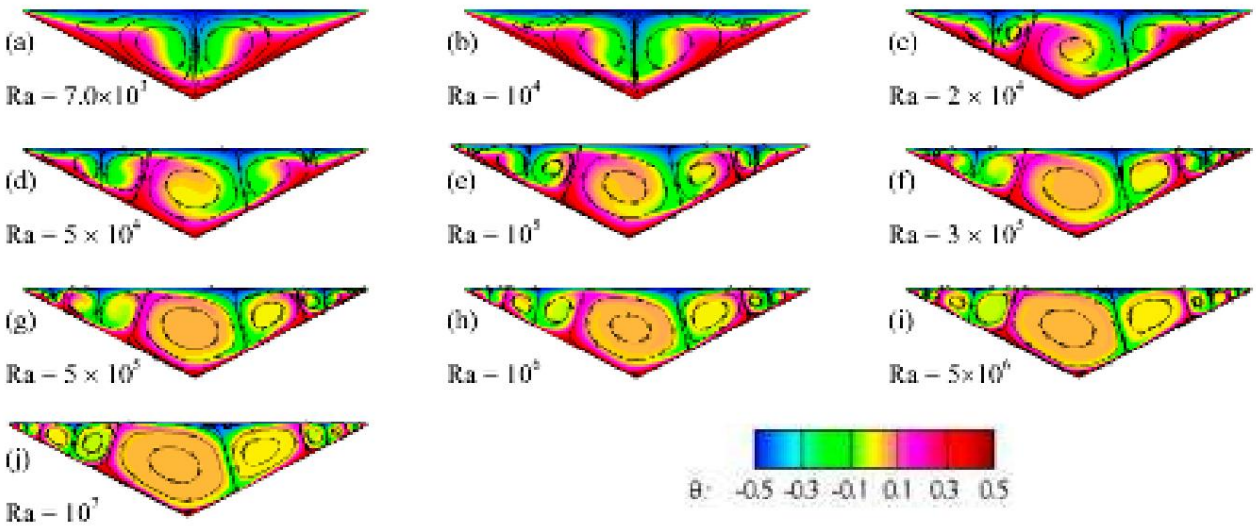


Figura 11. En la etapa completamente desarrollada, líneas de corriente e isotermas para varios números de Rayleigh.

Machine Translated by Google

Tabla 3. Número de celdas con los números de Rayleigh correspondientes.

Número de Rayleigh	Número de celdas
7 × 103	2
104	4
2 × 104	5
5 × 104	6
105	7
3 × 105	9
5 × 105	10
106	11
5 × 106	13
107	15

La Tabla 3 muestra que el número de Rayleigh y el número de celdas están vinculados. El número de Rayleigh aumentó de 7 × 103 a 107 a medida que el número de bifurcaciones aumentó de dos a quince celdas. Para valores de Ra entre 104 y 107, está claro que existe un vínculo casi lineal entre el número de células y Ra.

5.3. Flujo inestable

Una estructura de flujo asimétrica se crea como consecuencia de una bifurcación Pitchfork que surge durante las últimas etapas del período de transición. Como ya se señaló, la simulación numérica experimenta una bifurcación Pitchfork desde el principio. La Figura 12 muestra las líneas de corriente y las isotermas para Ra = 107 y Ra = 108 para estudiar mejor el flujo con números de Rayleigh mayores para diferentes momentos. En la Figura 12, inicialmente en $\tau = 0$, la temperatura es constante para todos los valores de Ra. La figura muestra que los fluidos son simétricos para todos los números de Rayleigh cuando $\tau = 1$, pero a medida que pasa el tiempo, cuando $\tau = 5$, se vuelven asimétricos y crean dos pequeñas células adicionales en la cavidad en las esquinas superiores derecha e izquierda. Con un número de celdas creciente, todos los valores de Ra en $\tau = 10$ en la Figura 12 exhiben el mismo patrón de flujo. Cuando $\tau = 50$ para Ra = 107 aparece una pequeña celda en el centro superior de las dos celdas más grandes de la cavidad, pero para Ra = 5 × 107 y Ra = 108 en $\tau = 50$, el flujo estacionario se rompe y se vuelve inestable. En la Figura 11, el flujo es más complicado para Ra = 5 × 107 y Ra = 108 en $\tau = 50$, aunque sigue siendo constante, y la celda más grande tiene algunas celdas más pequeñas en los lados superior derecho e izquierdo. Esto indica que entre Ra = 107 y 5 × 107 hay una bifurcación de Hopf (ver [19] para detalles sobre la bifurcación). Cuando Ra = 107, el estado estacionario asimétrico permanece similar en todas las etapas de transición posteriores, de transición desarrollada y de desarrollo completo cuando $\tau = 100$, 1000, 1500 y 2000, respectivamente. Las tendencias observadas permanecen consistentes tanto durante la etapa de transición desarrollada ($\tau = 1000$ y 1500) como durante la etapa completamente desarrollada ($\tau = 2000$) para dos números de Rayleigh distintos, a saber, Ra = 5 × 107 y Ra = 108 . Pero a medida que τ aumenta, como se muestra en la Figura 12 para Ra = 108 en $\tau = 2000$, ambas células crecen en el medio de las dos células más grandes. La celda central más grande muestra un movimiento de derecha a izquierda. El flujo inestable se vuelve cada vez más complejo debido a su falta de estabilidad.

Con el tiempo, la serie de temperaturas se siguió y analizó espectralmente para comprender el flujo inestable en números de Rayleigh más altos. La Figura 13 muestra la variación de temperatura a lo largo del tiempo y las densidades espectrales de potencia según varios valores de Ra. La Figura 13a demuestra un flujo constante a lo largo de la etapa completamente establecida para Ra = 107, mientras que la Figura 13b muestra un flujo periódico para Ra = 5 × 107 . Además, la Figura 13c muestra la densidad espectral de potencia de temperatura ubicada en la Figura 13b. La frecuencia fundamental del flujo periódico , con modos armónicos, es fp = 0,397. El flujo periódico cambia a medida que aumenta el número de Rayleigh. Esto indica la ocurrencia de una bifurcación más por la cual una solución periódica se transforma en otra. A medida que el número de Rayleigh continúa aumentando, el flujo inestable se vuelve caótico, como se ve en la Figura 13d, que representa la etapa completamente desarrollada para Ra = 108 . Según la Figura 13e, la frecuencia única con modos armónicos desaparece para Ra = 108 mientras que el flujo es caótico pero inestable en la etapa completamente

Machine Translated by Google

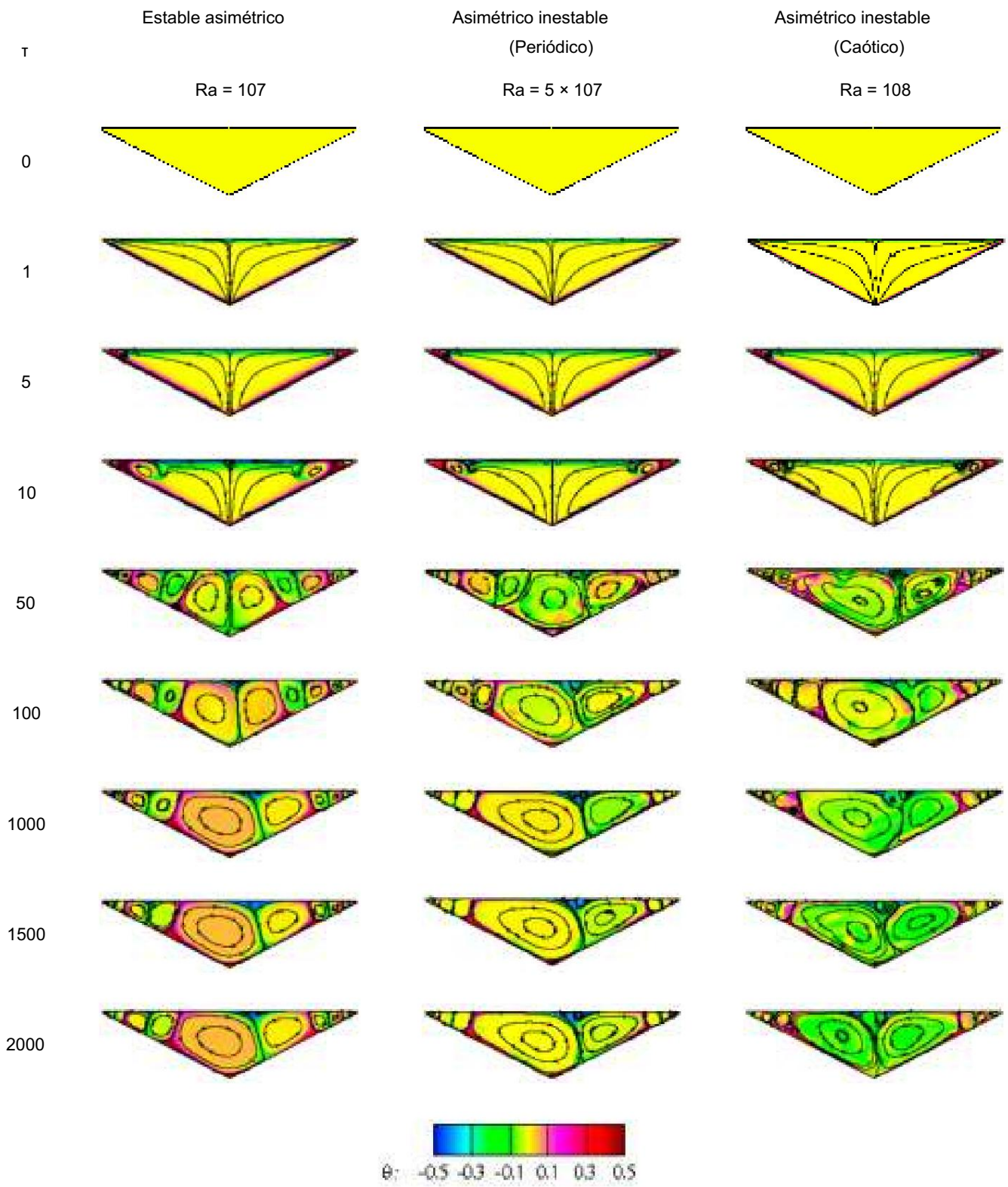


Figura 12. Líneas de corriente e isotermas en varios intervalos de tiempo adimensionales para distintos niveles superiores. Números de Rayleigh: Ra = 107, Ra = 5 × 107 y Ra = 108 .

Machine Translated by Google

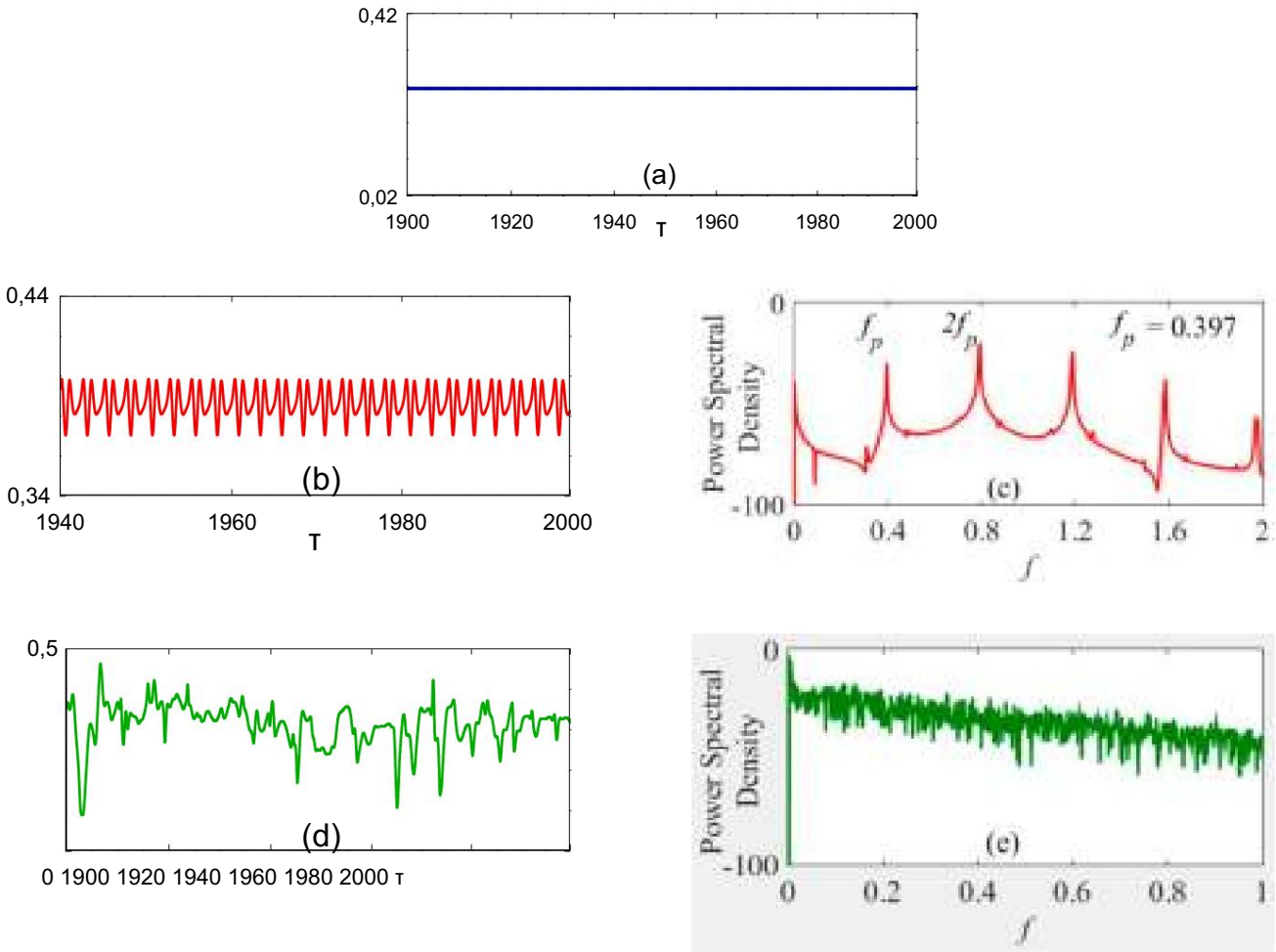


Figura 13. Serie temporal de la temperatura en la etapa completamente desarrollada y la densidad espectral de potencia en el punto P5 (0,5, 0,255) (a) para Ra = 107 , (b,c) para Ra = 5 × 10,7y (d,e) para Ra = 108 .

La Figura 14 muestra un análisis de series de tiempo de la temperatura y la velocidad en tres puntos distintos, P1, P2 y P5, con números de Rayleigh más altos, específicamente Ra = 107 5 × 1,07 y 108 . Debido a que la temperatura es inicialmente isotérmica y constante en las Figuras 14a-c, es la misma en varias etapas en la etapa inicial para números de Rayleigh mayores. En el período de transición, la temperatura fluctúa con el tiempo para cada Ra en la Figura 14. En la etapa avanzada de desarrollo, como muestra la Figura 14a , la temperatura se vuelve constante; es decir, no hay cambios en la temperatura, pero en la Figura 14b vemos que se vuelve periódica. En la Figura 14c, a medida que aumenta el tiempo, el flujo se vuelve caótico y más complejo en la etapa completamente desarrollada. Sin embargo, la velocidad (Figura 14d-f) comienza en cero y cambia a medida que avanza el tiempo durante la etapa de transición. Todas las Figuras 14d-f muestran que el flujo es estable en la etapa desarrollada, periódico en la Figura 14e y caótico en la Figura 14f. Además, lo más importante es que parece que el flujo de un estado periódico cambia de uno periódico a uno caótico en una etapa de transición. Además, en un estado caótico, el flujo es constantemente caótico en la etapa de transición y en las etapas de desarrollo.

Machine Translated by Google

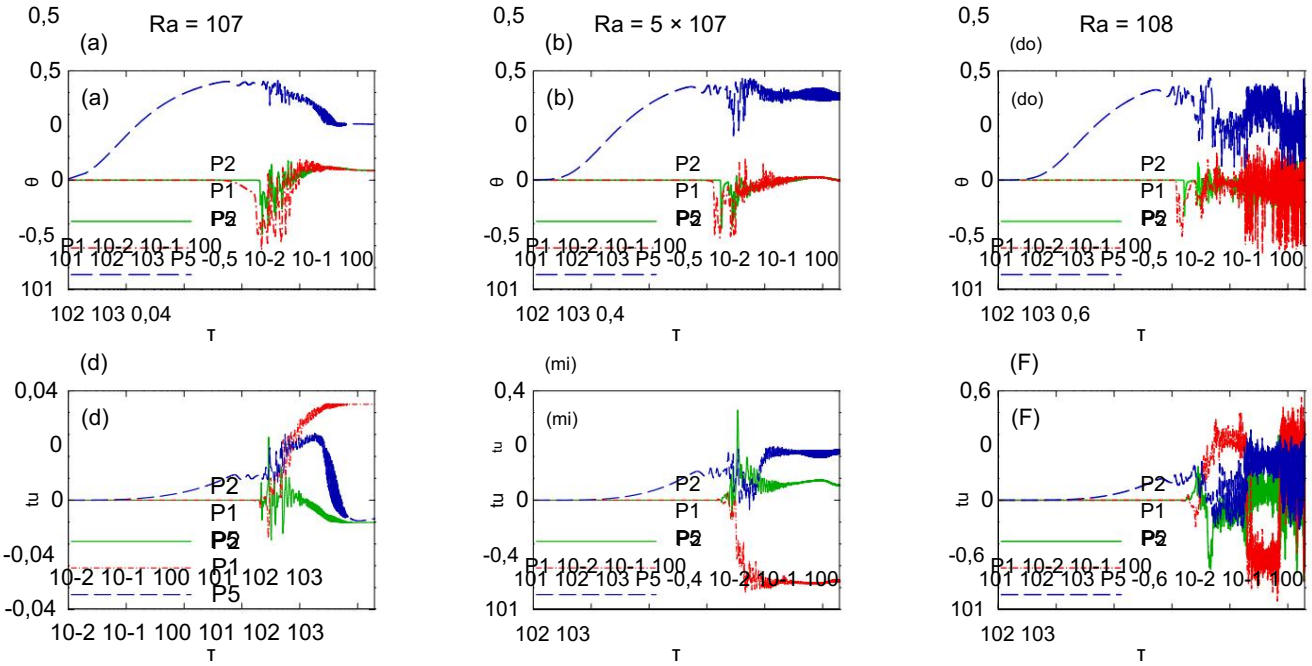


Figura 14. Serie temporal de temperatura y velocidad en tres puntos distintos, P1 (0, 0,825), P2 (0, 0,46) y P3 (0,5, 0,255), para (a,d) cuando Ra = , para (b,e) cuando Ra = 5 × 107, y para (c,f) cuando 107 Ra = 108 .

5.3.1. Bifurcación de

Hopf La Figura 15 muestra las líneas de corriente y las isotermas para Ra = 107 y Ra = 2 × 107 para permitir un análisis más profundo del flujo en el caso de números de Rayleigh mayores. La Figura 15a ilustra los flujos más complicados a lo largo de la etapa completamente desarrollada para Ra = 107, aunque todavía está estable. Sin embargo, una inspección más profunda de los resultados numéricos revela que se alternan más de dos células diminutas; como resultado, el flujo se vuelve inestable para Ra = 2 × 107 en la etapa completamente desarrollada. Esto indica que existe una bifurcación de Hopf entre Ra = 107 y 2 × 107 .

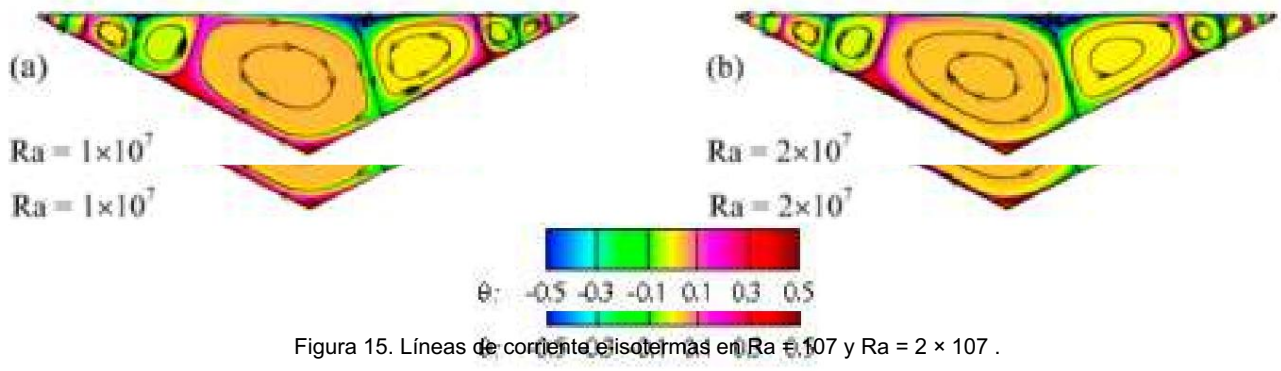


Figura 15. Líneas de corriente e isotermas en Ra = 107 y Ra = 2 × 107 .

La Figura 16 muestra los atractores con valores que van desde τ = 300 a 2000 para Ra = 107 y τ = 1000 a 1500 para Ra = 5 × 107 en el punto de definición P1 (0, 0,825) para facilitar la comprensión de la bifurcación de Hopf. , que tiene lugar durante la transición del estado estacionario a la etapa periódica. La Figura 16a ilustra que la curva del plano u-θ alcanza un valor específico cuando Ra = 107 . La Figura 16b muestra un ciclo límite para Ra = 5 × 107 . Como resultado, cuando Ra = 5 × 107, se produce una bifurcación de Hopf (para más información sobre la bifurcación de Hopf, ver [65]).

Machine Translated by Google

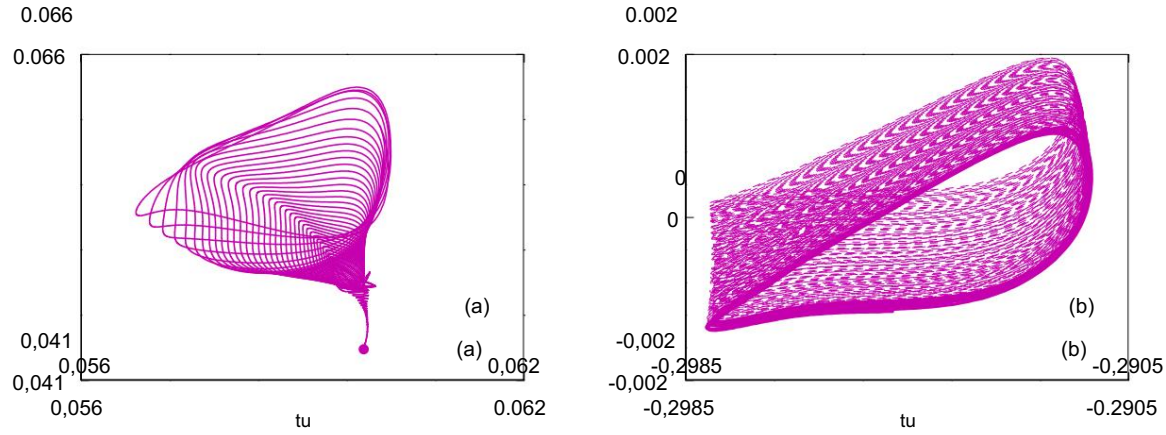


Figura 16. El punto límite y el ciclo límite para (a) Ra = 107 , y para (b) Ra = 5 × 107 en el plano de u-θ en el punto P1 (0, 0,825).

5.3.2. Caótico

La Figura 17a ilustra que las dos celdas en la parte superior derecha de la celda más grande se vuelven más grandes precisamente a medida que aumenta el número de Rayleigh. La célula más grande en el centro también viaja tanto a la derecha como a la izquierda , como se ve en la Figura 17b. cuando Ra = 108. El flujo inestable se vuelve cada vez más complicado, lo que se conoce como caótico.

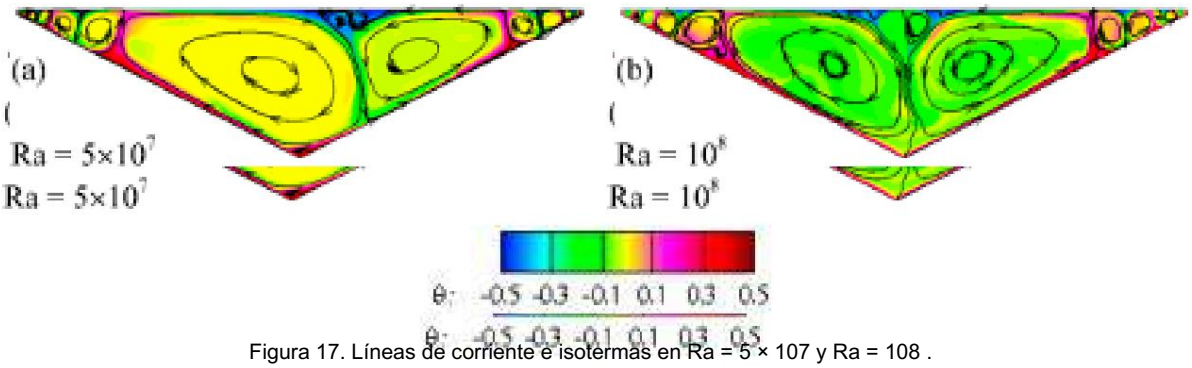


Figura 17. Líneas de corriente e isotermas en Ra = 5 × 107 y Ra = 108 .

La Figura 18 muestra las trayectorias a través del espacio escénico en el plano u-θ en el punto P5 (0.5, 0.255) para Ra = 5 × 107 y 108 para ilustrar más claramente cómo la condición periódica cambia a un estado caótico. El ciclo límite observado representado en la Figura 18a demuestra la naturaleza periódica del flujo inestable con un número de Rayleigh de Ra = 5 × 107 . Este hallazgo se alinea con la información presentada en la Figura 16 y respalda aún más la existencia de un ciclo límite. En la Figura 18b, la trayectoria para Ra = 108 muestra que el flujo periódico cambia a caótico, lo que tiene lugar entre Ra = 5 × 107 y 108 . Para una explicación detallada de las trayectorias espacio-escenario, ver [66].

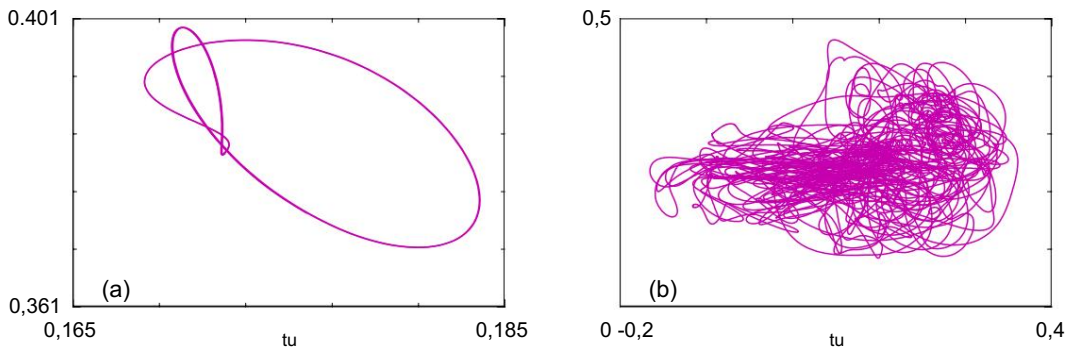


Figura 18. Trayectorias de temperatura y velocidad x en el espacio escénico para los valores de Ra = 5 × 107 y Ra = 108 en el punto P5 (0,5, 0,255).

Machine Translated by Google

5.4. Temperatura y velocidad

La Figura 19 muestra la temperatura y la velocidad en los puntos designados P1 (0, 0,825) a lo largo del tiempo en varios números de Rayleigh. Esta información se proporciona para ayudar a comprender la formación de patrones de flujo de convección natural dentro de la cavidad en respuesta al calentamiento repentino de las paredes inclinadas y al enfriamiento de la pared superior. Las simulaciones se realizaron utilizando varios números de Rayleigh, que van desde Ra = 10^3 hasta 10^8. Se tomó una observación sobre las diversas propiedades fluctuantes del flujo a lo largo de un rango de números de Rayleigh. Las Figuras 5, 6, 9 y 12 representan las isotermas y las líneas de corriente correspondientes para varios números de Rayleigh, centrándose específicamente en el caso en el que A = 0,5. Los resultados numéricos observados para los diversos valores de Ra, como se muestra en la Figura 19, exhiben cambios discernibles. En el número de Rayleigh más bajo, primero se pueden observar inestabilidades del flujo convectivo. Sin embargo, el número de ondas y la inestabilidad aumentan al aumentar los números de Rayleigh. Con base en la simetría y el flujo continuo, se espera que el flujo sea más débil y muestre un comportamiento simétrico en Ra = 103. Durante la etapa de transición del flujo de fluido, se observa que el flujo se desarrolla asimétricamente para los números de Rayleigh de Ra = 104, 105, y 106. Sin embargo, a medida que el flujo avanza hacia la etapa de pleno desarrollo, se estabiliza. Finalmente, el flujo cambia a estados periódico y caótico en Ra = 107 y Ra = 108, respectivamente, como se muestra en la Figura 19a. Como se ilustra en la Figura 19b, también se puede ver una característica similar en la velocidad x en el punto P1.

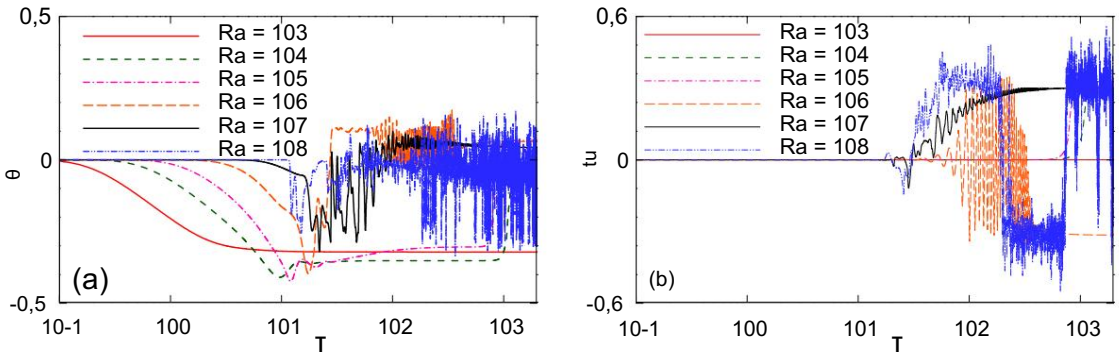


Figura 19. (a) Serie de tiempo de temperatura y (b) serie de tiempo de velocidad x para diferentes números de Rayleigh en el punto P1 (0, 0,825).

5.5. Transferencia

de calor Durante la etapa de transición, la transferencia de calor por convección domina en la cavidad en forma de V. La transferencia de calor por convección se ve reforzada por las fluctuaciones irregulares y los vórtices que fomentan la mezcla de fluidos. Para el aire, se examina el número de Nusselt que expresa la proporción de transferencia de calor por convección y por conducción. El número de Nusselt Nu [60-62] se define como:

$$Nu = \frac{1}{en} \int_{en} \frac{\partial \theta}{\partial n} ds. \quad (11)$$

De acuerdo con la Figura 20a, se ha proporcionado una representación de serie temporal para ilustrar el número de Nusselt promedio asociado con la pared inclinada. Esta medición particular se ha empleado para cuantificar la cantidad de transferencia de calor que se produce a través de la pared de la cavidad. Es importante resaltar que la Figura 20b presenta adicionalmente la representación del Nu luego de ser normalizado por Ra1/4. La presencia de una diferencia de temperatura significativa entre el fluido y la pared puede contribuir al fenómeno sustancial de transferencia de calor. En consecuencia, se espera que se observe un valor grande del número de Nusselt (Nu). El fenómeno observado puede atribuirse a la aplicación simultánea de calentamiento y enfriamiento tanto en las paredes inclinadas como en la pared superior. La Figura 20b ilustra cómo, a medida que avanza el tiempo, a lo largo de la etapa inicial, Nu disminuye drásticamente y, a lo largo de la etapa de transferencia total, alcanza gradualmente un valor que es constante u oscilatorio, y este valor está determinado por el número de Rayleigh. Este

Machine Translated by Google

es similar a los de la Figura 13, donde el número de Nusselt oscila para Ra ≥ 5 × 107 pero permanece constante para Ra = 107 . En contraste con las de la Figura 20a, es obvio que las curvas Nu versus las de la Figura 20b colapsan juntas. Como resultado, el escalado Nu~Ra1/4 funciona eficazmente, considerando el conjunto actual de valores Ra. La Figura 20b demuestra que NuRa−1/4 casi mantiene un valor constante de 1,473 a medida que aumenta el número de Rayleigh, aunque de forma algo decreciente.

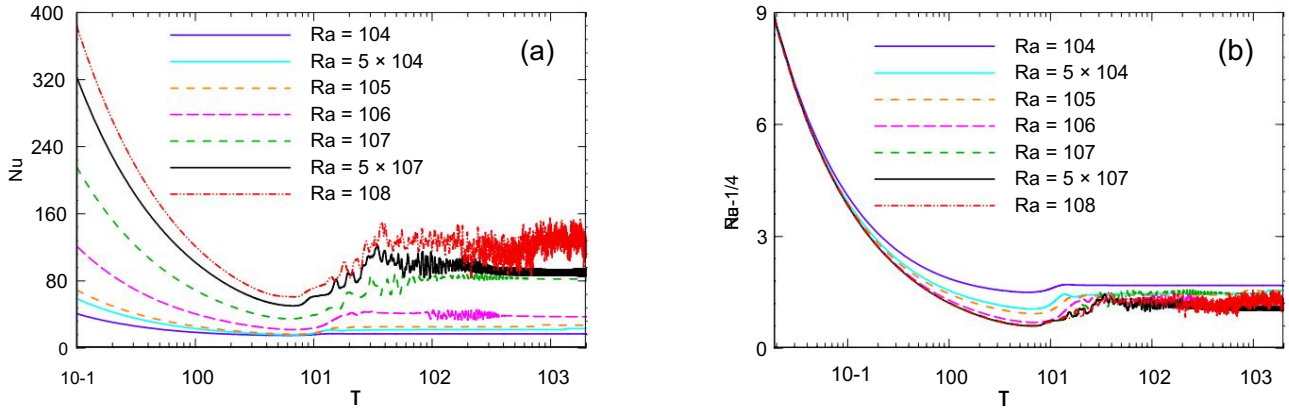


Figura 20. (a) El número de Nusselt y (b) la serie temporal de números de Nusselt normalizados para varios tipos de números de Rayleigh.

6. Conclusiones

La investigación actual profundiza en la exploración numérica de flujos de convección natural 2D inestables dentro de una cavidad en forma de valle llena de agua, donde el calentamiento se produce a lo largo de las paredes inclinadas mientras que el enfriamiento se facilita a través de la pared superior. El estudio abarca un amplio espectro de números de Rayleigh que van desde Ra = 100 a 108 bajo el número de Prandtl Pr = 0,71 y la relación de aspecto A = 0,5, abarcando varios tiempos adimensionales desde τ = 0 hasta τ = 5000. La investigación delinea el diversas estructuras de flujo que evolucionan dentro de la cavidad a lo largo del tiempo y examina la relación entre la dinámica de transferencia de calor y los números de Rayleigh.

El análisis revela que la progresión de los flujos de convección natural se manifiesta en tres etapas discernibles: una etapa inicial, una etapa de transición y una etapa completamente desarrollada, después de la aplicación repentina de calentamiento a través de paredes inclinadas y enfriamiento a través de la pared superior. Este estudio examina los patrones de flujo simétrico, asimétrico e inestable que caracterizan estas etapas, respaldado por hallazgos numéricos. Específicamente, la investigación se centra principalmente en dilucidar los mecanismos de flujo en todas las etapas. Se observa que los flujos de convección natural permanecen estables en el estado simétrico para números de Rayleigh que van desde Ra = 100 a 7 × 103 . Más allá de Ra > 7 × 103 los flujos exhiben asimetría. Además, durante el estado asimétrico, el flujo pasa a un régimen inestable en la etapa de transición antes de estabilizarse en la etapa completamente desarrollada pa Este estudio destaca que los flujos periódicos inestables evolucionan hacia estados caóticos durante la etapa de transición, volviendo a un comportamiento periódico en la etapa desarrollada en Ra = 5 × 107 , , mientras que en números de Rayleigh más altos, como , el flujo caótico sigue siendo predominante en Ra = 108, el régimen inestable.

Además, la investigación analiza las notables bifurcaciones observadas en los estados plenamente desarrollados. Se proporcionan análisis detallados, incluida la densidad espectral de potencia y las trayectorias espaciales del escenario para Pr = 0,71. Los estudios numéricos aclaran las complejidades de la transferencia de calor y demuestran la influencia del número de Rayleigh tanto en el número de Nusselt como en la dinámica del caudal.

Machine Translated by Google

Contribuciones de los autores: Conceptualización, SB y SCS; investigación, LRR; metodología, LRR; administración de proyectos, SCS; software, LRR; supervisión, SB y SCS; validación, LRR; redacción: borrador original, SB y LRR; redacción: revisión y edición, FX y SCS. Todos los autores tienen leyó y aceptó la versión publicada del manuscrito.

Financiamiento: Esta investigación no recibió financiamiento externo.

Declaración de disponibilidad de datos: No se utilizan datos en este estudio. Uso de la Inteligencia Artificial: Durante el En la preparación de este trabajo, utilizamos ChatGPT para mejorar el lenguaje y la legibilidad.

Conflictos de intereses: Los autores declaran no tener ningún conflicto de intereses.

Nomenclatura

k difusividad térmica
τ tiempo adimensional
Δτ paso de tiempo adimensional
temperatura adimensional
θ viscosidad cinemática
ν
ρ Densidad
β coeficiente de expansión térmica
una relación de aspecto
gramo aceleración gravitacional
Número de Gr Grashof
l media longitud de la cavidad
H altura de la cavidad
k conductividad térmica
y0 longitud de la pared inclinada
norte coordenada adimensional normal a la pared inclinada
en longitud adimensional de la pared inclinada
Número Nusselt
PAG Presión
pag presión adimensional
pr número de prandtl
Número de Ra Rayleigh
Número de Rayleigh crítico de Rac para la ruptura del estado simétrico
temperatura dimensional T
T0 temperatura inicial
Tc temperatura fría de la pared superior
Th temperatura de la pared inclinada caliente
t Tiempo
ΔT diferencia de temperatura
Componentes de velocidad U, V
u, v los componentes de velocidad adimensionales
Coordenadas X, Y en horizontal y vertical.
x,y las coordenadas adimensionales en el plano horizontal y vertical

Referencias

1. Gill, E. El régimen de capa límite para la convección en una cavidad rectangular. J. Mec. de fluidos. 1966, 26, 515–536. [Referencia cruzada]
2. Prandtl, L. Fundamentos de la dinámica de fluidos; Blackie: Londres, Reino Unido, 1952; págs. 422–425.
3. Ravi, MRR; Henkes, RAWM; Hoogendoorn, CJ Sobre la estructura de alto número de Rayleigh de la convección natural laminar estable fluye en un recinto cuadrado. J. Mec. de fluidos. 1994, 262, 325–351. [Referencia cruzada]
4. Xu, F.; Patterson, JC; Lei, C. Un estudio experimental del flujo térmico inestable alrededor de una aleta delgada en una pared lateral de un diferencialmente cavidad calentada. Int. J. Flujo de fluido térmico 2008, 29, 1139–1153. [Referencia cruzada]
5. Cui, H.; Xu, F.; Saha, SC Transición a flujo de convección natural inestable en un recinto prismático de sección triangular. Int. J. Termia. Ciencia. 2017, 111, 330–339. [Referencia cruzada]
6. Saha, Carolina del Sur; Khan, MMK Una revisión de la convección natural y la transferencia de calor en espacios con forma de ático. Construcción de energía. 2011, 43, 2564–2571. [Referencia cruzada]
7. Cui, H.; An, H.; Wang, W.; Han, Z.; Centro.; Xu, F.; Liu, Q.; Saha, SC Estudio numérico de convección mixta y transferencia de calor en Cavidad en forma de arco con fuentes de calor internas. Aplica. Ciencia. 2023, 13, 1029. [Referencia cruzada]

Machine Translated by Google

8. Chuhan, IS; Li, J.; Guo, Z.; Yaqub, M.; Manan, MA Investigación de transferencia de calor en un recinto con forma de plus utilizando la ley de potencia Fluido: un enfoque de elementos finitos. Aplica. Ciencia. 2023, 13, 11042. [Referencia cruzada]
9. Sarangi, A.; Sarangi, A.; Sahoo, SS; Mallik, RK; Awad, MM Análisis de transferencia de calor por convección y radiación conjugada en Cavidad de la cocina solar mediante un enfoque computacional. Energías 2023, 16, 3868. [CrossRef]
10. Gebhart, B.; Jaluria, Y.; Mahajan, RL; Sammakia, B. Transporte y flujos inducidos por flotabilidad; Hemisferio: Washington, DC, EE. UU., 1988.
11. Manneville, P. Convección Rayleigh-Bénard , treinta años de trabajo experimental, teórico y de modelado, Dinámica de estructuras celulares espacio-temporales. En Dinámica de estructuras celulares espacio-temporales: Revisión del centenario de Henri Bénard; Springer: Nueva York, Nueva York, Estados Unidos, 2006; Volumen 207, págs. 41–65.
12. Bodenschatz, E.; Pesch, W.; Ahlers, G. Desarrollos recientes en la convección de Rayleigh Benard. Año. Rev. Mec. de fluidos. 2000, 32, 709–778. [Referencia cruzada]
13. Gorrión, EM; Husar, RB Vórtices longitudinales en flujo de convección natural sobre placas inclinadas. J. Mec. de fluidos. 1969, 37, 251–255. [Referencia cruzada]
14. Batchelor, GK Transferencia de calor por convección libre a través de una cavidad cerrada entre límites verticales a diferentes temperaturas. P. Aplica. Matemáticas. 1954, 12, 209–233. [Referencia cruzada]
15. Eckert, ERG; Carlson, WO Convección natural en una capa de aire encerrada entre dos placas verticales a diferentes temperaturas. Int. J. Transferencia de masa de calor. 1961, 2, 106–120. [Referencia cruzada]
16. Elder, JW Convección libre laminar en una ranura vertical. J. Mec. de fluidos. 1965, 23, 77–98. [Referencia cruzada]
17. Xu, F.; Patterson, JC; Lei, C. Un estudio experimental de las capas límite térmicas acopladas adyacentes a una partición en un Cavidad calentada diferencialmente. Exp. Termia. Ciencia fluida. 2014, 54, 12-21. [Referencia cruzada]
18. Xu, F.; Patterson, JC; Lei, C. La convección natural transitoria fluye alrededor de una aleta delgada en la pared lateral de una cavidad con calentamiento diferencial. J. Mec. de fluidos. 2009, 639, 261–290. [Referencia cruzada]
19. Patterson, JC; Imberger, J. Convección natural inestable en una cavidad rectangular. J. Mec. de fluidos. 1980, 100, 65–86. [Referencia cruzada]
20. Patterson, JC; Armfield, SW Características transitorias de la convección natural en una cavidad. J. Mec. de fluidos. 1990, 219, 469–497. [Referencia cruzada]
21. De, AK; Eswaran, V.; Mishra, PK Escalado del transporte de calor y espectros de energía de la convección turbulenta de Rayleigh-Bénard en un caja de gran relación de aspecto. Int. J. Flujo de fluido térmico 2017, 67, 111–124. [Referencia cruzada]
22. Rahaman, MM; Bhowmick, S.; Mondal, RN; Saha, SC Convección natural inestable en un trapezoide lleno de aire inicialmente estratificado Armario calentado desde abajo. Procesos 2022, 10, 1383. [CrossRef]
23. Rahaman, MM; Bhowmick, S.; Mondal, RN; Saha, SC Un estudio computacional del flujo caótico y la transferencia de calor dentro de una cavidad trapezoidal. Energías 2023, 16, 5031. [CrossRef]
24. Princevac, M.; Fernando, HJS Desintegración matutina de piscinas frías en terreno complejo. J. Mec. de fluidos. 2008, 616, 99-109. [Referencia cruzada]
25. Asan, H.; Namli, L. Convección natural laminar en un techo inclinado de sección transversal triangular: condiciones de contorno del día de verano. Construcción de energía. 2000, 33, 69–73. [Referencia cruzada]
26. Asan, H.; Namli, L. Simulación numérica de flujo flotante en un techo de sección transversal triangular en condiciones límite de día de invierno. Construcción de energía. 2001, 33, 753–757. [Referencia cruzada]
27. Salmun, H. Patrones de convección en un dominio triangular. Int. J. Transferencia de masa de calor. 1995, 38, 351–362. [Referencia cruzada]
28. Salmun, H. La estabilidad de una solución unicelular en estado estacionario en un recinto triangular. Int. J. Transferencia de masa de calor. 1995, 18, 363–369. [Referencia cruzada]
29. Poulikakos, D.; Bejan, A. La dinámica de fluidos de un espacio ático. J. Mec. de fluidos. 1983, 131, 251–269. [Referencia cruzada]
30. Poulikakos, D.; Bejan, A. Experimentos de convección natural en un recinto triangular. J. Transferencia de calor. 1983, 105, 652–655. [Referencia cruzada]
31. Flack, RD La medición experimental de la transferencia de calor por convección natural en recintos triangulares calentados o enfriados desde abajo. J. Transferencia de calor. 1980, 102, 770–772. [Referencia cruzada]
32. Holtzman, GA; colina, RW; Ball, KS Convección natural laminar en recintos triangulares isósceles calentados desde abajo y enfriado simétricamente desde arriba. J. Transferencia de calor. 2000, 122, 485–491. [Referencia cruzada]
33. Lei, C.; Armfield, suroeste; Patterson, JC Convección natural inestable en un recinto triangular isósceles lleno de agua calentado desde abajo. Int. J. Transferencia de masa de calor. 2008, 51, 2637–2650. [Referencia cruzada]
34. Saha, Carolina del Sur; Lei, C.; Patterson, JC Convección natural en un recinto triangular sujeto a forzamiento térmico periódico. En procedimientos de la 13ª Conferencia Internacional de Transferencia de Calor, Sydney, Australia, 13 a 18 de agosto de 2006.
35. Saha, Carolina del Sur; Lei, C.; Patterson, JC Efecto de la relación de aspecto sobre la convección natural en áticos sujetos a forzamiento térmico periódico. Anziam J. 2007, 48, C618–C632. [Referencia cruzada]
36. Saha, Carolina del Sur; Patterson, JC; Lei, C. Convección natural en espacios en forma de ático sujetos a condiciones límite de calentamiento repentino y en rampa. Transf. masa calor. 2010, 46, 621–638. [Referencia cruzada]
37. Saha, Carolina del Sur; Patterson, JC; Lei, C. Convección natural en áticos sujetos a condiciones límite de enfriamiento instantáneo y en rampa. Construcción de energía. 2010, 42, 1192–1204. [Referencia cruzada]
38. Saha, Carolina del Sur; Patterson, JC; Lei, C. Convección natural y transferencia de calor en áticos sujetos a forzamiento térmico periódico. Internacional J. Termia. Ciencia. 2010, 49, 1899–1910. [Referencia cruzada]
39. Lei, C.; Patterson, JC Convección natural en un depósito sujeto a radiación solar: observaciones experimentales. Exp. Fluidos 2002, 32, 590–599. [Referencia cruzada]

Machine Translated by Google

40. Lei, C.; Patterson, JC Convección natural inestable en un recinto triangular inducida por la absorción de radiación. J. Mec. de fluidos. 2002, 460, 181–209. [Referencia cruzada]
41. Lei, C.; Patterson, JC Convección natural en un depósito sujeto a radiación solar: una simulación bidimensional. Número. Transf. de calor. 2002, 42, 13–32. [Referencia cruzada]
42. Mao, Y.; Lei, C.; Patterson, JC Convección natural inestable en un recinto triangular inducida por la absorción de radiación: una revisión mediante un análisis de escala mejorado. J. Mec. de fluidos. 2009, 622, 75-102. [Referencia cruzada]
43. Mao, Y.; Lei, C.; Patterson, JC Convección natural inestable cerca de la costa inducida por el enfriamiento de la superficie. J. Mec. de fluidos. 2010, 642, 213–233. [Referencia cruzada]
44. Mao, Y.; Lei, C.; Patterson, JC Características de la inestabilidad de la convección natural inducida por radiación en aguas litorales poco profundas. Int. J. Terma. Ciencia. 2010, 49, 170–181. [Referencia cruzada]
45. Bednarz, TP; Lei, C.; Patterson, JC Un estudio numérico de la convección natural inestable inducida por el enfriamiento de la superficie por iso-flujo en un modelo de yacimiento. Int. J. Transferencia de masa de calor. 2009, 52, 56–66. [Referencia cruzada]
46. Whiteman, CD Ruptura de las inversiones de temperatura en valles montañosos profundos: Parte I. Observaciones. J. Aplica. Meteorol. 1982, 21, 270–289. [Referencia cruzada]
47. Roach, WT; Marrón, R.; Caughey, SJ; Garland, J. La física de la niebla de radiación: Parte I: Un estudio de campo. Meteorol QJR. Soc. 1976, 102, 313–333.
48. Pilie, RJ; Mack, EJ; Kocmond, WC; Rogers, CW; Eadie, WJ El ciclo de vida de la niebla del valle. Parte I: Características micrometeorológicas. J. Aplica. Meteorol. 1975, 14, 347–363. [Referencia cruzada]
49. Fuzzi, S.; Facchini, MC El experimento de niebla del valle del Po 1989, una descripción general. Tellus 1992, 44B, 448–468. [Referencia cruzada]
50. Justo, JE; Lala Grieser, JGG Estudios recientes de programas de campo de niebla radiactiva; Publicación no. 869; Centro de Investigación de Ciencias Atmosféricas , Universidad Estatal de Nueva York (ASRC, SUNY): Nueva York, NY, EE. UU., 1983.
51. Zihua, L.; Limin, Z.; Qinghong, Z. La estructura física de la niebla invernal en el área metropolitana de Chongqing y su formación. proceso. Acta Meteorol. Pecado. 1994, 8, 316–328.
52. Haiden, T.; Whiteman, CD Mecanismos de flujo catabático en una pendiente de ángulo bajo. J. Aplica. Meteorol. 2005, 44, 113-126. [Referencia cruzada]
53. Catalano, F.; Cenedese, A. Modelado numérico de alta resolución de vientos de ladera impulsados térmicamente en un valle con fuerte cobertura. Soy. Meteorol. Soc. 2010, 49, 1859–1880. [Referencia cruzada]
54. Clark, Pensilvania; Hopwood, WP Pronóstico unidimensional de niebla de radiación específico para un sitio. Parte 1: Formulación de modelos y estudios de sensibilidad idealizados. Meteorol. Aplica. 2001, 8, 279–286. [Referencia cruzada]
55. Baumbach, G.; Vogt, U. Determinación experimental del efecto de la circulación de la brisa entre montañas y valles sobre la contaminación del aire en el cercanías de Friburgo. Atmos. Reinar. 1999, 33, 4019–4027. [Referencia cruzada]
56. Lehner, M.; Gohm, A. Simulaciones idealizadas del transporte de contaminación diurna en un valle empinado y su sensibilidad a la temperatura. estratificación y albedo superficial. Encuadernado.-Capa Meteorol. 2010, 134, 327–351. [Referencia cruzada]
57. Liu, H.; Liang, B.; Zhu, F.; Zhang, B.; Sang, J. Experimento de tanque de agua sobre la circulación térmica inducida por el calentamiento del fondo en un valle asimétrico. Adv. Atmos. Ciencia. 2004, 21, 536–546. [Referencia cruzada]
58. Kenjeres, S. Mejora de la transferencia de calor inducida por la inclinación de la pared en convección térmica turbulenta. Física. Rev. E 2015, 92, 053006. [Referencia cruzada]
59. Kimura, F.; Noguchi, T.; Kitamura, K. Flujo de fluidos y transferencia de calor por convección natural alrededor de una cavidad calentada en forma de V. Mec. Ing. J. 2016, 3, 16–00330. [Referencia cruzada]
60. Bhowmick, S.; Saha, Carolina del Sur; Qiao, M.; Xu, F. Transición a un flujo caótico en una cavidad triangular en forma de V calentada desde abajo. Int. J. Transf. masa calor. 2019, 128, 76–86. [Referencia cruzada]
61. Bhowmick, S.; Xu, F.; Molla, MM; Saha, SC Fenómenos caóticos de convección natural del agua en un recinto en forma de V. Int. J. Termia. Ciencia. 2022, 176, 107526. [Referencia cruzada]
62. Bhowmick, S.; Xu, F.; Zhang, X.; Saha, SC Convección natural y transferencia de calor en una cavidad en forma de valle llena de agua inicialmente estratificada. Int. J. Terma. Ciencia. 2018, 128, 59–69. [Referencia cruzada]
63. Patankar, SV Transferencia de calor numérica y flujo de fluidos; Hemisphere Publishing Corporation: Nueva York, NY, EE. UU., 1980.
64. Saha, SC Convección natural adyacente a una placa plana inclinada y en un espacio del ático bajo diversas condiciones de forzamiento térmico. Doctor en Filosofía. Tesis, Facultad de Ingeniería y Ciencias Físicas, Townsville, Australia, 2009.
65. Drazin, PG Introducción a la estabilidad hidrodinámica; Cambridge University Press: Cambridge, Reino Unido, 2002.
66. McLaughlin, JB; Orszag, SA Transición de la convección térmica periódica a la caótica. J. Mec. de fluidos. 1982, 122, 123-142. [Referencia cruzada]

Descargo de responsabilidad/Nota del editor: Las declaraciones, opiniones y datos contenidos en todas las publicaciones son únicamente de los autores y contribuyentes individuales y no de MDPI ni de los editores. MDPI y/o los editores renuncian a toda responsabilidad por cualquier daño a personas o propiedad que resulte de cualquier idea, método, instrucción o producto mencionado en el contenido.

Machine Translated by Google

cálculo

MDPI

Artículo

Modelado de las propiedades de elementos magnetoestrictivos utilizando Emuladores cuánticos

Edvard Karpukhin [1], Alexey Bormotov [1,*] y Luiza Manukyan [2]

[1] Facultad de Tecnologías Industriales, Universidad Tecnológica del Estado de Penza, pr. Baiduková/ul. Gagarina, 1a, 11, 440039 Penza, Rusia;

[2] edvar1@rambler.ru Instituto de Ingeniería Aeroespacial, Universidad Nacional de Investigación de Samara, ul. Moskovskoe Highway 34, 443086 Samara,

Rusia; lu-iza03@mail.ru * Correspondencia: aleks21618@yandex.ru

Resumen: El artículo analiza métodos matemáticos y numéricos para modelar sistemas multielectrónicos magnetoestrictivos basados en una combinación de métodos cuánticos y clásicos. Se justifica el desarrollo de un algoritmo adecuado para la investigación de fenómenos magnetoestrictivos a nivel micro utilizando el método cuántico clásico implementado en una computadora clásica moderna. Se proporcionan los algoritmos y la estructura del paquete de software. La idoneidad del método clásico cuántico se verifica comparando los resultados calculados de las propiedades de materiales magnetoestrictivos conocidos con las propiedades reales de las aleaciones magnetoestrictivas.

Palabras clave: métodos numéricos cuánticos-clásicos; Investigación de fenómenos magnetoestrictivos a nivel micro.

1. Introducción

Al modelar fenómenos magnetoestrictivos a nivel micro, surge el problema de resolver la ecuación de Schrodinger (SE). Actualmente se conocen muchos métodos numéricos para resolverlo [1-10]. Dependiendo del tipo de computadora diseñada para su implementación, todos estos métodos se pueden dividir en clásicos y cuánticos. Los métodos clásicos están diseñados para implementarse en computadoras clásicas y se basan en el enfoque clásico para la solución numérica de ecuaciones diferenciales. Le permiten resolver eficazmente una amplia gama de tareas en un tiempo aceptable y con una precisión suficientemente alta. Sin embargo, en muchos casos, por ejemplo, al modelar sistemas poliatómicos, el uso de este enfoque conduce a un error excesivamente grande o a un tiempo de solución que aumenta exponencialmente, lo que es inaceptable con el poder moderno de las computadoras clásicas [11-19]. En artículos científicos [20-27] se proponen modificaciones de los métodos clásicos que pueden aumentar significativamente la precisión y reducir el tiempo de cálculo, pero este problema sigue siendo relevante.

Otra forma fundamentalmente nueva y en desarrollo activo de resolver numéricamente el SE es el uso de métodos cuánticos [11,12,28–31]. Estos métodos se basan en algoritmos diseñados para ser ejecutados por ordenadores cuánticos que, como se sabe [23,32-36], son más eficaces para resolver este tipo de problemas. El principal problema con el uso de la computación cuántica es el nivel insuficiente de desarrollo tecnológico moderno en esta dirección: la falta de computadoras cuánticas completamente funcionales disponibles y el pequeño número de algoritmos cuánticos efectivos conocidos y trabajos científicos en esta dirección. Sin embargo, los emuladores de computadoras cuánticas existentes permiten desarrollar y probar nuevos métodos numéricos cuánticos para resolver problemas particulares de modelado de sistemas poliatómicos y fundamentar la posibilidad teórica de utilizar estos métodos en el caso general en el futuro, cuando aparezcan computadoras cuánticas completas. [37–41].

También es posible aplicar un enfoque combinado para modelar sistemas cuánticos utilizando métodos cuánticos clásicos utilizando los recursos de computadoras convencionales y emuladores cuánticos. Se diseñan los algoritmos de los métodos numéricos cuánticos-clásicos (QCNM)

check for updates

Cita: Karpukhin, E.; Bormotov, A.; Manukyan, L. Modelado de las propiedades de elementos magnetoestrictivos mediante emuladores cuánticos. Computación 2024, 12, 147. https:// doi.org/ 10.3390/computation12070147

Editor Académico: Rafael Lahoz-Beltra

Recibido: 7 de mayo de 2024
Revisado: 24 de junio de 2024
Aceptado: 26 de junio de 2024
Publicado: 15 de julio de 2024

Copyright: © 2024 por los autores. Licenciatario MDPI, Basilea, Suiza.

Este artículo es un artículo de acceso abierto. distribuido bajo los términos y condiciones de los Creative Commons Licencia de atribución (CC BY) (https:// creativecommons.org/licenses/by/ 4.0/).

Machine Translated by Google

para ser ejecutado en una computadora clásica en un entorno de software equipado con un módulo de computación clásica y un módulo de emulación de computación cuántica, con posibilidad de intercambiar datos entre ellos (Figura 1).

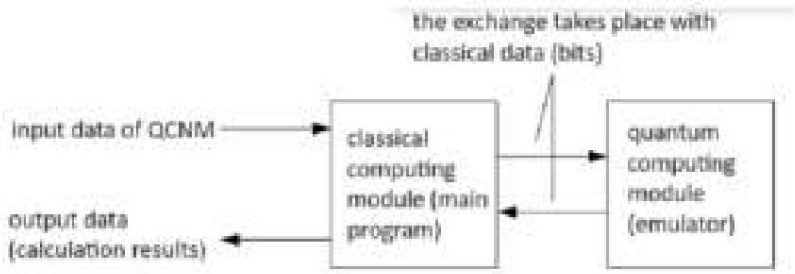


Figura 1. Estructura simplificada del paquete de software para la implementación del QCNM.

Este método de modelado permitirá utilizar las propiedades más útiles de Algoritmos cuánticos para acelerar el trabajo y aumentar la eficiencia de los clásicos.

La principal tarea considerada en este artículo es el desarrollo de un algoritmo QCNM adecuado para la investigación de fenómenos magnetoestrictivos mediante su modelado matemático a nivel micro utilizando una computadora clásica. Al mismo tiempo, hay que tener en cuenta que las capacidades de una computadora clásica para implementar emuladores de computación cuántica están actualmente muy limitadas por la cantidad de memoria cuántica, que es un máximo de unos 400 qubits (cuando se utilizan tecnologías en la nube). .

El algoritmo QCNM propuesto se implementa como parte de un paquete de software (Figura 1) y, con su ayuda, se ha llevado a cabo un estudio de los fenómenos magnetoestrictivos en aleaciones de Ni-Mn-Ga Geisler [42-47].

2. Materiales y métodos

Los átomos con electrones N se diferencian del átomo de hidrógeno y de los sistemas similares al hidrógeno. En primer lugar, el hamiltoniano tiene en cuenta las contribuciones a la energía cinética y potencial de todos los N electrones, y en la energía potencial surge un sumando que describe la interacción interelectrónica. En segundo lugar, la función de onda debe obedecer el principio de Pauli: debe ser antisimétrica al reorganizar las coordenadas de cualquier par de electrones.

Esto lleva al hecho de que la solución de la ecuación de Schrodinger para átomos multielectrónicos se vuelve mucho más complicada. No se puede obtener analíticamente y requiere métodos de solución numérica aproximada [13,20,48,49].

Sin embargo, las propiedades de los sistemas multielectrónicos pueden describirse cualitativamente de forma muy sencilla si aprovechamos el hecho de que para el átomo deben cumplirse ciertas relaciones relacionadas con el momento angular.

1. Cada estado del átomo debe tener un cierto valor del momento angular total.
2. El momento total de todos los electrones en un átomo debe obedecer las reglas de cuantificación y cuantización espacial.
3. Dado que el espín de los electrones es también el momento del momento, también debería contribuir al momento total del átomo.
4. Los momentos y espines de los electrones individuales deben combinarse de modo que el momento total siga siendo una cantidad observable y obedezca los postulados y ecuaciones de la mecánica cuántica.

El momento total está asociado con los momentos de los electrones individuales, pero dado que el momento de cada electrón está orientado de manera ambigua en el espacio (la cuantificación espacial no permite definir de manera única todas las proyecciones del vector), el momento total, según el principio de superposición , puede convertirse en una combinación de cualquier posible orientación de los vectores de momentos individuales. Estos principios se utilizaron en el modelado de aleaciones Geisler multielectrónicas del tipo Ni-Mn-Ga .

Machine Translated by Google

Considere la ecuación del tiempo de Schrodinger:

$$H\hat{}\,\Psi = -\frac{2h^{-}}{2} + U(r,t)\,\Psi(r,t) = jh^{-}\frac{\partial\Psi(r,t)}{\partial t}, \quad (1)$$

donde $H\hat{}$ —el hamiltoniano; $\Psi(r,t)$, $U(r,t)$: la función de onda y la energía potencial de una partícula ubicada en un punto del espacio con coordenadas (x, y, z) y un radiovector $\partial^2/\partial r^2 = i\partial/\partial x + j\partial/\partial y + k\partial/\partial z$ en un tiempo t; ∇^2 = —el operador de Laplace; m—masa de partícula; $h^{-} = h/2\pi$: constante de Planck reducida.

La solución de la ecuación (1) en una computadora cuántica se puede realizar mediante el método de Zalka-Wiesner [15], que es aplicable, incluso para sistemas poliatómicos. El esquema general de la solución numérica del SE por este método es el siguiente: 1. Escriba la solución formalmente exacta del SE (1) Ψen forma de un vector $|\psi(t)\rangle$:

$$|\psi(t)\rangle = mi^{-jH\hat{}t}\,|\psi(0)\rangle. \quad (2)$$

2. Establezca el estado inicial $|\psi(0)\rangle$, el punto de tiempo tf , o el que sea necesario para determinar la solución y el paso de discretización Δt, tal que $i\Delta t = tf$, para algún entero i. Para aceptar $|\psi 0\rangle = |\psi(0)\rangle$, i = 0.

3. Construya un circuito cuántico de $U\Delta t$ en la forma:

$$U\Delta t = IQFT\exp - \Delta t\,QFT\exp\frac{jjp^{2}}{2mh} = -V(r)\Delta t\,,\ h^{-} \quad (3)$$

donde V(r)—energía potencial de un sistema de partículas cuánticas, y QFT,IQFT— transformada de Fourier cuántica directa e inversa.

4. El comienzo del proceso iterativo.

5. En un paso de iteración, se calcula el valor $|\psi i+1\rangle = U\Delta t\,|\psi i\rangle$ y el contador i es incrementado en uno.

6. El proceso iterativo se detiene cuando se cumple la condición $i\Delta t \geq tf$. Se devuelve el resultado a $\psi\, tf = |\psi i\rangle$.

Este algoritmo se realiza en una computadora cuántica en tiempo polinómico, es el más versátil y adecuado para modelar una amplia gama de sistemas cuánticos, incluidos los fenómenos magnetoestrictivos. El resultado se obtiene con un error, cuyo valor se puede obtener de la estimación:

$$\left\| tf\,e^{-jH\hat{}t} - f\,\psi(0)\,\psi \right\|^{2} \geq 1 - \varepsilon. \quad (4)$$

El método Zalka-Wesner sin modificaciones se puede implementar en una computadora clásica usando el paquete de software de la Figura 1, pero solo es adecuado para modelar un sistema cuántico con una pequeña cantidad de partículas. Para aumentar su eficiencia, se propone utilizar el QCNM basado en la transformación de Trotter-Suzuki [24,50–52], que puede expresarse mediante las siguientes fórmulas recursivas:

$$\prod_{i=1}^{metro} mi^{-jHi\,t/2n} \prod_{i=m}^{1} e^{-jHola\,t/2n} = mi^{-jHt} + O\left(\frac{m3t}{nota^{2}}\right)^{3} = U2(t),$$

$$U2k(t) = [U2k-2(sk\,t)]2U2k-2([1-4sk\,]t)[U2k-2(sk\,t)]2 == e^{-jHt} + O\left(\frac{(monte)}{nota^{2}}\right)^{2k+1}, \quad sk = 4 - 4^{1/(2k-1)}. \quad (5)$$

El uso de esta transformación permite aumentar la precisión de la aproximación utilizando los mismos recursos informáticos. La eficacia del método Trotter-Suzuki se puede demostrar de forma clara y simplista utilizando la ilustración de la Figura 2. Si asumimos condicionalmente que el algoritmo cuántico debe pasar del estado 1 al estado 2, y las longitudes de los lados del triángulo A, B , y U2k(t): la cantidad total de recursos informáti

Machine Translated by Google

fuentes necesarias para esta transición, entonces el camino más corto es U2k(t), que es una transformada de Trotter-Suzuki de orden 2k.

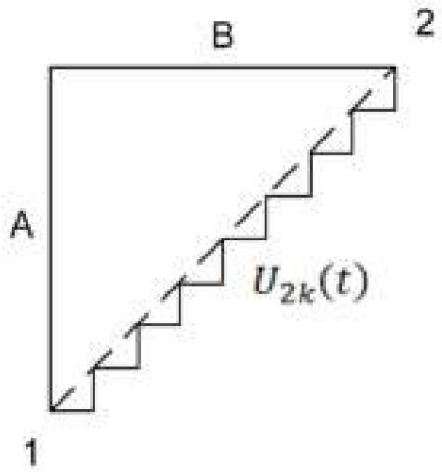


Figura 2. Principio de funcionamiento de la transformación Trotter-Suzuki.

Un punto importante en la implementación del QCNM propuesto es el uso de la transformada cuántica de Fourier (QFT). La peculiaridad de QFT en comparación con la transformada de Fourier habitual es que no acelera la transformación en sí, pero permite buscar de manera más eficiente aproximaciones iniciales para los valores propios de operadores unitarios, que son necesarios para otros métodos numéricos.

En base ortonormal | 0 , . . . | N − 1 Q QFT es un operador lineal que actúa de la siguiente manera [14]:

$$| x \rightarrow \frac{1}{\sqrt{norte}} \sum_{k=0}^{norte-1} mi\ -2\pi\ jkx/N| k \quad . \tag{6}$$

O si acepta N = 2 donde n es un número entero y representa el estado | x como número binario x = x1x2 . . . xn, (6), entonces puedes reescribirlo en una forma más conveniente para propósitos prácticos:

$$| x = | x1x2 \ldots xn \rightarrow \frac{(| 0 + e^{-2\pi\ j0.xn-1\ x} norte | 1 ...(| 0 + e^{-2\pi\ j0.x1\ x2\ ...xn} | 1)}{2n/2}, \tag{7}$$

donde la notación de tipo 0.x1x2 . . . xn denota una fracción binaria x1 $\frac{}{2}$ x2 $\frac{}{4}$ + . . . 2 $\frac{xn}{norte}$.

La representación (7) permite construir un esquema cuántico simple para calcular QFT basado en puertas cuánticas de Hadamard H y cambios de fase controlados Rk = Rφ en φ = π 2 como se $^{1-k}$, muestra en la Figura 3.

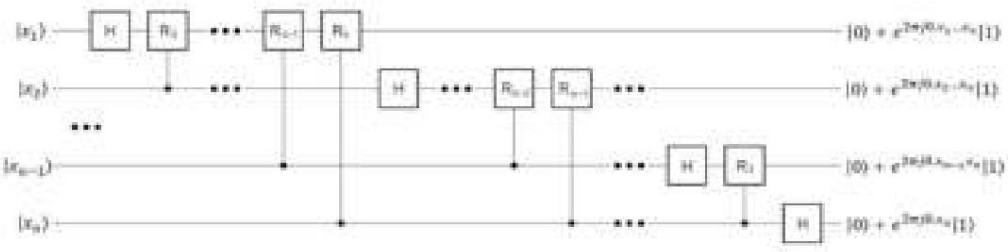


Figura 3. Un esquema cuántico para calcular el QFT.

Así, para realizar estudios de fenómenos magnetoestrictivos a nivel micro, se utilizó el QCNM propuesto, basado en el método Zalka-Wesner modificado, que puede implementarse en una computadora clásica debido a la simulación cuántica de la transformación Trotter-Suzuki y QFT.

Machine Translated by Google

La implementación del paquete de software para realizar la investigación de acuerdo con el algoritmo propuesto se realizó en el entorno MS Visual Studio utilizando los lenguajes de programación C# para el módulo de computación clásica y Q# para el módulo de emulador cuántico (ver Figura 1). El esquema del algoritmo del módulo informático clásico se muestra en la Figura 4.

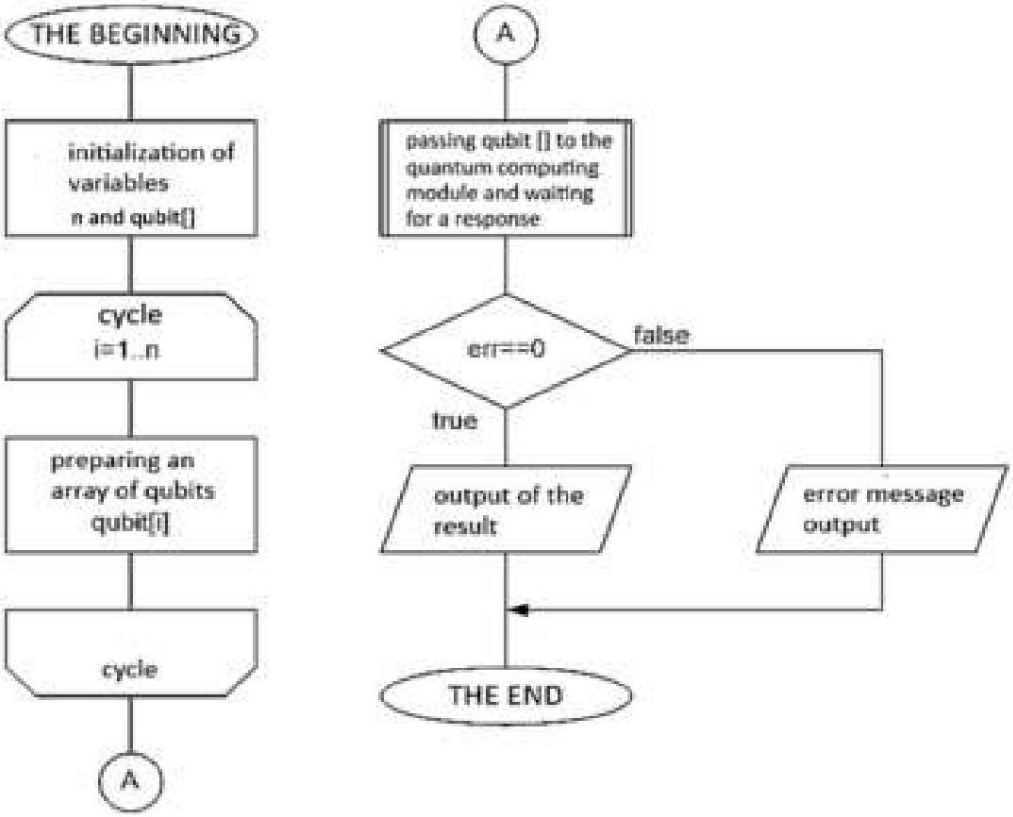


Figura 4. El esquema del algoritmo del módulo informático clásico.

El módulo de computación clásica es el módulo principal del programa y su tarea es gestionar el QCNM, es decir, preparar los datos iniciales, transferirlos al módulo emulador cuántico y procesar los resultados obtenidos. En la etapa inicial del algoritmo del módulo, se inicializa una matriz de qubits [i] de longitud n, que es necesaria para modelar el sistema cuántico considerado. A continuación, se preparan los elementos de esta matriz, dependiendo del tipo de Hamiltoniano Hˆ de SE (1), y se transfieren al módulo de computación cuántica para su simulación en un emulador cuántico. Después de recibir una respuesta de esto, en ausencia de un indicador de error, los datos de salida se generan en función de los resultados de la simulación obt

El esquema del algoritmo del módulo de computación cuántica se muestra en la Figura 5.

En la etapa inicial, este módulo convierte la matriz de qubits resultante en la matriz hamiltoniana correspondiente y simula su evolución cuántica utilizando el método Zalka-Wiesner modificado propuesto. Al mismo tiempo, para emular operaciones cuánticas, es posible utilizar operaciones integradas en el lenguaje Q#, como Exp , para calcular el exponente de la matriz, DcomposedIntoTimeStepsCA, para realizar un solo paso en la evolución del hamiltoniano, etc. 12,53,54]. La parte principal del algoritmo del módulo cuántico es el proceso iterativo de llamar al procedimiento de transformación Trotter-Suzuki, de acuerdo con la expresión (5). En este caso, se utiliza el algoritmo QFT, basado en las fórmulas (6) y (7), implementadas según el esquema de la Figura 3. Al finalizar el proceso iterativo, se forma una matriz de “resultado” que contiene los datos numéricos de la simulación y la variable “err”, igual a 1 en caso de errores en el funcionamiento del módulo y 0 en su ausencia. Estos datos se devuelven al módulo informático clásico para su procesamiento.

Machine Translated by Google

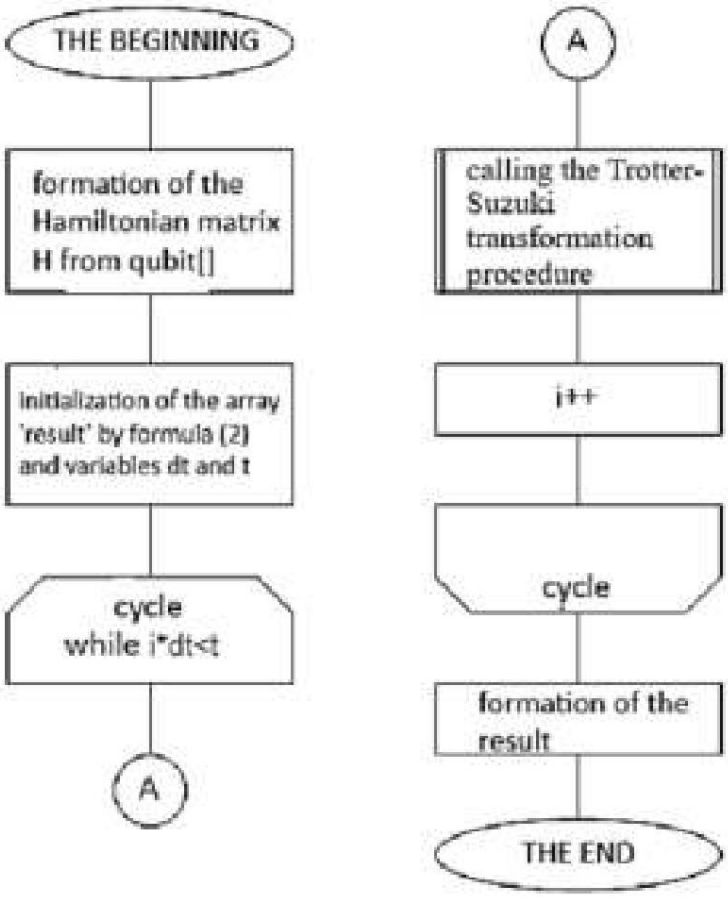


Figura 5. El esquema del algoritmo del módulo de computación cuántica.

3. Resultados

Utilizando el paquete de software desarrollado que implementa el algoritmo del QCNM propuesto, realizamos un estudio de una aleación magnetostrictiva de Geisler del tipo Ni-Mn-Ga , cuya estructura de red cristalina se muestra en la Figura 6. En el caso de que el átomo de La materia en cuestión contiene electrones, es necesario tener en cuenta la influencia de cada uno de ellos sobre la energía cinética y potencial total, así como la interacción interelectrónica entre ellos. El hamiltoniano del SE (1) para dicha aleación, como se conoce [42,53-57], puede escribirse en la aproximación de Born-Oppenheimer como:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{n} \frac{2\hbar}{2m_i}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2}\right) - \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\frac{Ze^2}{|r_i|} + \sum_{i=1}^{N}\sum_{j>i}^{N}\frac{ke^2}{|r_i - r_j|}, \quad (8)$$

donde mi—la masa de la partícula i, $\hbar$—la constante de Planck reducida, Z—la carga total del átomo, e—la carga del electrón, k—el coeficiente de proporcionalidad en la ley de Coulomb y ri—el radio -vectores de electrones.

Como resultado del modelado del sistema de micropartículas descrito por el hamiltoniano (8) utilizando el algoritmo QCNM en una computadora clásica, se obtuvieron datos numéricos de sus características energéticas . A la hora de estudiar los fenómenos magnetoestrictivos, los valores de las posibles deformaciones magnetoestrictivas de un material, en función de su estructura, temperatura, presencia de un campo magnético externo, etc., son de gran interés. A partir de los datos numéricos obtenidos, utilizando una técnica bien conocida, dada por ejemplo en [42], se construyeron gráficas de algunas de estas dependencias. La Figura 7 muestra gráficos de la dependencia de las deformaciones magnetoestrictivas ei del módulo de elasticidad a (Figura 7a) y la temperatura t (Figura 7b) cuando la aleación se encuentra en campos magnéticos de diferente intensidad.

Machine Translated by Google

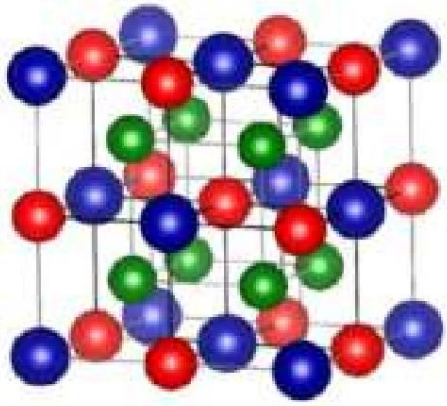


Figura 6. La celda de la red cristalina de la aleación Ni-Mn-Ga [42].

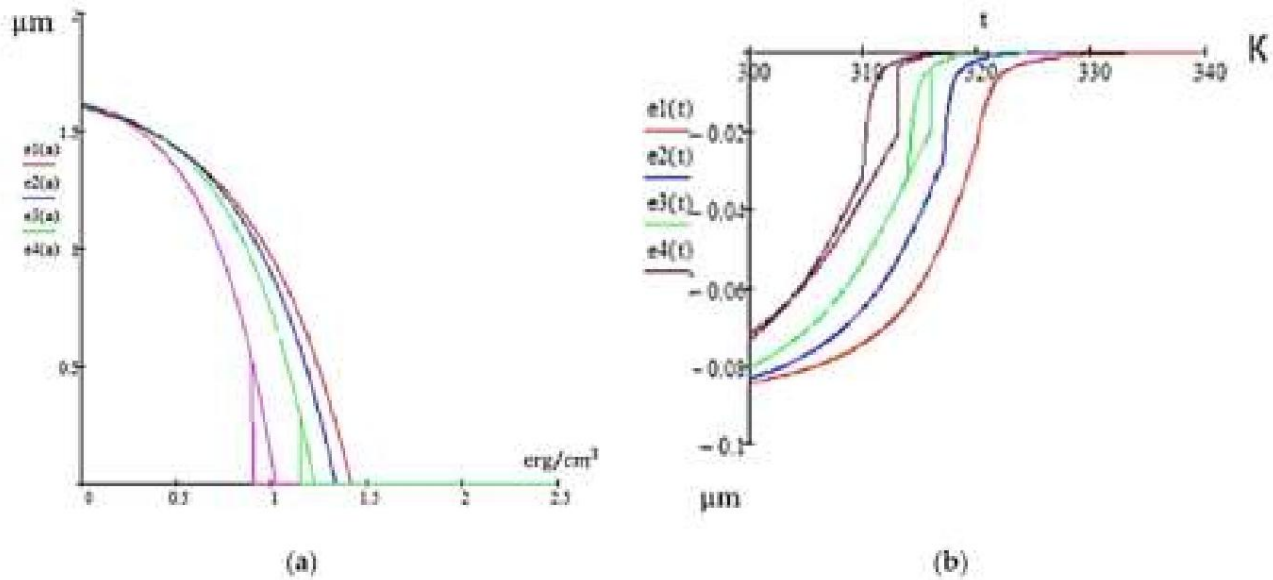


Figura 7. Gráficos de dependencia de las deformaciones magnetoestrictivas de la aleación Ni-Mn-Ga en campos magnéticos constantes de 5, 14, 25 y 30 T. (a) gráficos de la dependencia de las deformaciones magnetoestrictivas del módulo de elasticidad; (b) gráficas de la dependencia de las deformaciones magnetoestrictivas de la temperatura.

Las dependencias elásticas y de temperatura de las deformaciones en campos magnéticos constantes de 5, 14, 25 y 30 T, que se muestran en la Figura 7, muestran que el ancho de histéresis disminuye al aumentar el valor del campo externo, y en un campo con un valor de inducción de más de 25 T, la histéresis desaparece. Una comparación de los gráficos de la Figura 7 con los resultados conocidos del modelado de aleaciones de Ni-Mn-Ga y datos experimentales de características similares mostrados en la Figura 8 muestra desviaciones de no más del 5% al modelar la dependencia de la deformación del módulo de elasticidad y no más del 7% al construir su dependencia de la temperatura, en los puntos límite del bucle de histéresis o en los puntos de inflexión de los gráficos, en su ausencia. Esto indica la exactitud del algoritmo QCNM en la investigación de fenómenos magnetoestrictivos.

Machine Translated by Google

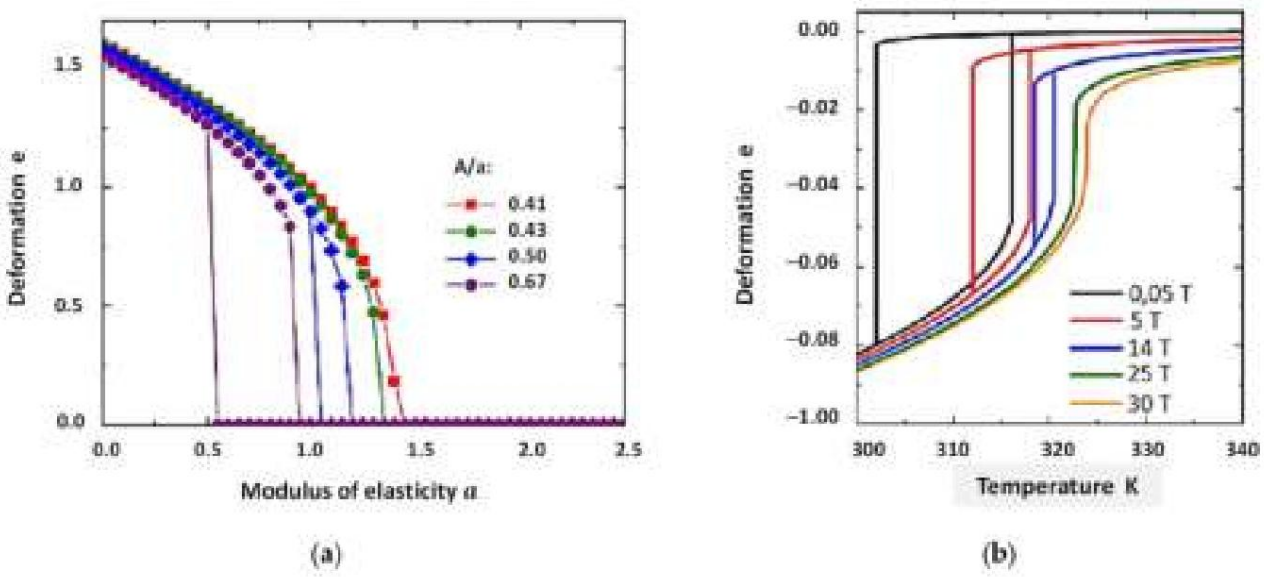


Figura 8. Características experimentales de las deformaciones magnetoestrictivas de la aleación Ni-Mn-Ga [42-47]. (a) gráficos de la dependencia de las deformaciones magnetoestrictivas del módulo de elasticidad; (b) gráficas de la dependencia de las deformaciones magnetoestrictivas de la temperatura.

4. Conclusiones

En el marco del estudio, se llevó a cabo el desarrollo de un algoritmo QCNM, adecuado para modelar sistemas poliatómicos, incluidos fenómenos magnetoestrictivos, a nivel micro, adecuado para modelar las propiedades magnetoestrictivas [58-61]. El enfoque utilizado para resolver el problema es el más eficaz porque permite combinar las capacidades de los métodos numéricos modernos, complementándolas con las ventajas de los métodos cuánticos.

El algoritmo QCNM propuesto se basa en una modificación del método Zalka-Wesner para resolver la ecuación de Schrodinger mediante el uso de la transformada de Trotter-Suzuki y la transformada cuántica de Fourier implementadas en un emulador cuántico.

Durante la investigación de los fenómenos magnetoestrictivos en aleaciones Ni-Mn-Ga Geisler utilizando el paquete de software desarrollado, se obtuvieron resultados similares a los experimentales conocidos , lo que confirma la exactitud del algoritmo del QCNM propuesto.

Contribuciones de los autores: Conceptualización, AB y EK; metodología, AB y EK; software, AB y EK; validación, AB y EK; análisis formal, AB y EK; investigación, AB y EK; recursos, AB, EK y LM; curación de datos, AB y EK; redacción: preparación del borrador original, AB, EK y LM; redacción: revisión y edición, AB, EK y LM; visualización, AB y EK; supervisión, AB; administración de proyectos, AB y LM; adquisición de financiación, AB Todos los autores han leído y aceptado la versión publicada del manuscrito.

Financiamiento: La investigación se llevó a cabo con una subvención de la Fundación Rusa para la Ciencia (proyecto № 23-29-00207), https://rscf.ru/project/23-29-00207/ (consultado el 13 de febrero de 2023).

Declaración de disponibilidad de datos: los datos sin procesar no se pueden compartir en este momento ya que también forman parte de un estudio en curso.

Conflictos de intereses: Los autores declaran no tener ningún conflicto de intereses.

Referencias

1. Barabanov, AL Mecánica Cuántica; MIPT: Dolgoprudny, Rusia, 2015; 97p.
2. Kashurnikov, VA; Krasavin, Métodos computacionales AV en física cuántica; MEPHI: Moscú, Rusia, 2005; 412p.
3. Linev, Técnica AV para resolver la ecuación de Schrodinger no estacionaria utilizando una versión paralela del método de Runge-Kutta; Linev, AV, Satanin, AM, Eds.; Universidad Estatal de Nizhny Novgorod: Nizhny Novgorod, Rusia, 2014; 89p.

Machine Translated by Google

4. Serov, VV Métodos numéricos para resolver problemas de mecánica cuántica; Universidad Estatal de Saratov: Saratov, Rusia, 2008; 39p.
5. Chuluunbaatar, O. Esquemas multicapa para la solución numérica de la ecuación de Schrodinger no estacionaria mediante el método de los elementos finitos. Toro. Matemáticas de la RUDN. Ser. Computadora. Ciencia. Física. 2008, 69–84. Disponible en línea: https://cyberleninka.ru/article/ n/mnogosloynye-shemy-dlya-chislennogo-resheniya-nestatsionarnogo-uravneniya-shryodingera-metodom-konechnyh- elenov/viewer (consultado el 6 de mayo de 2024).
6. Liu, Y.; Corrió, M.; Zhang, L. Esquemas de preservación hamiltonianos para las ecuaciones de ondas de Schrödinger no lineales fraccionarias bidimensionales . Computadora. Matemáticas. Aplica. 2023, 150, 54–69. [Referencia cruzada]
7. Zhang, Q.; Duan, J. Problema de minimización de restricciones de la ecuación de Schrödinger no lineal con el hamiltoniano de Anderson. J. Matemáticas. Anal. Aplica. 2024, 538, 128360. [Referencia cruzada]
8. Chen, YP; Wei, EI; Jiang, L.; Meng, M.; Wu, YM; Chew, WC Una solución hamiltoniana unificada a las ecuaciones de Maxwell-Schrödinger para modelar la interacción campo electromagnético-partícula. Computadora. Física. Comunitario. 2017, 215, 63–70. [Referencia cruzada]
9. Lorin, E.; Yang, X. Método de descomposición de dominio cuasi óptimo para el cálculo basado en redes neuronales de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. Computadora. Física. Comunitario. 2024, 299, 109129. [Referencia cruzada]
10. Gabrick, CE; Sayari, E.; de Castro, ASM; Trobia, J.; Batista, AM; Lenzi, EK Ecuación fraccionaria de Schrödinger y tiempo potenciales dependientes. Comunitario. Ciencia no lineal. Número. Simultáneo. 2023, 123, 107275. [Referencia cruzada]
11. Ignatov, SK Química Cuántica. Mecánica Cuántica y Estructura del Átomo; Universidad Estatal de Nizhny Novgorod: Nizhny Nóvgorod, Rusia, 2015; 113p.
12. Káiser, S.; Granad, K. Estudia Computación Cuántica en Python y Q#; Prensa DMK: Moscú, Rusia, 2021; 430p.
13. Karpukhin, EV; Bormotov, AN Métodos numéricos para calcular los campos magnéticos del convertidor de nivel de magnetoestricción EDP Sciences. En actas de la Conferencia científica y práctica internacional “Riesgos ambientales y seguridad en la ingeniería mecánica” (ERSME-2023), Rostov del Don, Rusia, 1 a 3 de marzo de 2023; Volumen 376, pág. 01101. [Referencia cruzada]
14. Bormotov, AN; Orlov, DI; Khnyreva, ES; Bratkova, ME Experiencia en el uso del algoritmo para descargar un motor de volante utilizando actuadores magnéticos para garantizar la estabilización del satélite de teledetección Aist-2D. Mod. Problema. Sensores remotos. Earth Space 2023, 20, 157–164.
15. Li, Z.; Sí, J.; Wang, Y.; Liu, L.; Shi, Y.; Li, Y.; Ye, J. Un nuevo método micromecánico para el análisis no lineal de compuestos magnetoestrictivos. Compos. Estructura. 2023, 311, 116633. [Referencia cruzada]
16. Chen, L.; Zhu, Y.; Ling, J.; Zhang, M. Modelado de dependencia de la temperatura y evaluación experimental de un actuador magnetoestrictivo discreto multidimensional. Aplica. Termia. Ing. 2023, 230, 120736. [Referencia cruzada]
17. Mizukawa, Y.; Ahmed, U.; Blaževi´c, D.; Rasilo, P. Modelado y maximización de la eficiencia del recolector de energía magnetoestrictivo. bajo vibración libre. J. Vibración de sonido. 2023, 558, 117759. [Referencia cruzada]
18. Xie, J.; Li, M. Un método rápido de elementos finitos BDF2 Galerkin para la ecuación de Schrödinger unidimensional dependiente del tiempo con condiciones de contorno artificiales. Aplica. Número. Matemáticas. 2023, 187, 89-106. [Referencia cruzada]
19. Navia, D.; Sanz, Á.S. Explorando la dinámica no clásica de la ecuación de Schrödinger "clásica". Ana. Física. 2024, 463, 169637. [Referencia cruzada]
20. Bormotov, AN; Proshin, IA; Vasilkov, AV Investigación de modelos matemáticos de formación de estructuras de materiales compuestos mediante métodos analíticos; Boletín de la Universidad Técnica Estatal de Bryansk: Bryansk, ruso, 2011; págs. 62–70. Disponible en línea: https://www.elibrary.ru/item.asp?id=16388945 (consultado el 10 de junio de 2024).
21. Bormotov, AN; Proshin, IA; Kuznetsova, MV Sistema de gestión de calidad en modelado matemático y síntesis multicriterio de compuestos nanomodificados para fines especiales. Proc. Inst. Sistema. Anal. Ruso. Acad. Ciencia. 2014, 64, 110-118.
22. Konovalova, II; Selezneva, SV; Konovalov, AN; Bormotov, AN Algoritmo para configurar reguladores adaptativos. Ciencia mundial. Descubrimiento. 2013, 22–33. Disponible en línea: https://www.elibrary.ru/item.asp?id=19049611 (consultado el 10 de junio de 2024).
23. Nielsen, M.; Chang, I. Computación cuántica e información cuántica; Editorial “Mir”: Moscú, Rusia, 2006; 824p.
24. Ozhigov, YI Esquema Zalka-Wiesner modificado para modelar sistemas cuánticos. Matemáticas. Modelo. 2012, 24, 109-119.
25. Satanin, AM Capítulos adicionales de la mecánica cuántica: métodos para resolver el problema de la dispersión utilizando alto rendimiento Computación; Universidad Estatal de Nizhny Novgorod: Nizhny Novgorod, Rusia, 2014; 56p.
26. Li, A.; Ir a, K.; Kobayashi, Y.; Hara, Y.; Jia, Y.; Shi, Y.; Soutis, C.; Kurita, H.; Narita, F.; Otsuka, K.; et al. Captación de energía mediante un transductor magnetoestrictivo basado en control de conmutación. Sens. Actuadores A Phys. 2023, 355, 114303. [Referencia cruzada]
27. Kurita, H.; Keino, T.; Senzaki, T.; Narita, F. Propiedades magnetoestrictivas directas e inversas de partículas dispersas de aleación de Fe-Co-V Láminas compuestas blandas de matriz de poliuretano. Sens. Actuadores A Phys. 2022, 337, 113427. [Referencia cruzada]
28. Bogdanov, YI; Bogdanova, NA; Fastovets, DV; Lukichev, VF La solución de la ecuación de Schrodinger en una computadora cuántica por el método Zalka-Wiesner teniendo en cuenta el ruido cuántico. Letón. JETF 2021, 114, 391–399.
29. De Raedt, H.; Jamones, AH; Michielsen, K.; De Raedt, K. Emulador de computadora cuántica. Computadora. Física. Comunitario. 2000, 132, 1–20. [Referencia cruzada]
30. Pfister, R.; Schubert, G.; Kröll, M. Transferencia de optimizaciones logísticas a optimizaciones de recursos de flujo de materiales mediante computación cuántica. Computación de procedimiento. Ciencia. 2024, 232, 32–42. [Referencia cruzada]
31. Lee, KF; Reilly, DR; Moraw, P.; Kanter, GS Emulación de un esquema de distribución de claves cuánticas basado en conversión ascendente utilizando activos selección de base controlada por bomba y umbral adaptativo. Optar. Comunitario. 2020, 475, 126258. [Referencia cruzada]
32. Osca, J.; Vala, J. Implementación de la distinguibilidad parcial de fotones en una simulación de circuito óptico cuántico. Computadora. Física. Comunitario. 2023, 289, 108773. [Referencia cruzada]

Machine Translated by Google

33. Rakyta, P.; Morse, G.; Nadori, J.; Majnay-Takács, Z.; Mencer, O.; Zimborás, Z. Circuitos cuánticos altamente optimizados sintetizados mediante motores de flujo de datos. J. Computación. Física. 2024, 500, 112756. [Referencia cruzada]

34. Islam, MT; Nandwana, D.; Healy, J.; Jaklich, JK; Dong, B.; Yu, A.; Moore, EE; Ijiri, Y.; McCall, SK; Willard, MA Estructural y Propiedades magnéticas de la aleación nanocristalina magnetostrictiva Fe-Ga-Zr. J. Compd. de aleaciones. 2023, 958, 170541. [Referencia cruzada]

35. Zhan, Y.-S.; Lin, C.-H. Modelado constitutivo basado en micromecánica de compuestos magnetoestrictivos 1–3 y 0–3. Compos. Estructura. 2021, 260, 113264. [Referencia cruzada]

36. Hubert, O.; Daniel, L.; Bernard, L. Modelado multiescala de materiales magnetoestrictivos. Encíclica. Madre inteligente. 2022, 5, 337–354. [Referencia cruzada]

37. Ajagekar, A.; Usted, F. Respuesta a la demanda basada en circuitos cuánticos variacionales en edificios aprovechando un híbrido cuántico-clásico estrategia. Aplica. Energía 2024, 364, 123244. [CrossRef]

38. Cranganore, SS; De Maio, V.; Brandic, I.; Deelman, E. Allanando el camino hacia flujos de trabajo científicos híbridos cuánticos y clásicos. Futuro Genero. Computadora. Sistema. 2024, 158, 346–366. [Referencia cruzada]

39. Hevia, JL; Peterssen, G.; Piattini, M. qSOA®: Integración dinámica para sistemas de software híbridos cuánticos/clásicos. J. Sistema. Software. 2024, 214, 112061. [Referencia cruzada]

40. Shukla, A.; Vedula, P. Un algoritmo híbrido clásico-cuántico para la solución de ecuaciones diferenciales ordinarias no lineales. Aplica. Matemáticas. Computadora. 2023, 442, 127708. [Referencia cruzada]

41. Gay-Balmaz, F.; Tronci, C. Evolución de funciones de onda híbridas cuánticas-clásicas. Física. D Fenómeno no lineal. 2022, 440, 133450. [Referencia cruzada]

42. Zagrebin, MA Estructura cristalina, diagramas de fases, propiedades electrónicas y magnéticas de aleaciones Geisler de tres, cuatro y cinco componentes: Tesis para el grado de Doctor en Ciencias Físicas y Matemáticas. Doctor en Filosofía. Tesis, Editorial de la Universidad Estatal de Chelyabinsk, Chelyabinsk, Rusia, 2021; 326p.

43. Chernenko, V. Aleaciones magnetoestrictivas de Heusler a base de Ni-Mn. Encíclica. Madre inteligente. 2022, 4, 160–176. [Referencia cruzada]

44. Chen, ZX; Sakuraba, Y.; Masuda, K.; Xu, XD; Kumara, LSR; Tajiri, H.; Kotani, Y.; Kushwaha, V.; Perumal, A.; Hono, K. Análisis de microestructura y orden atómico en películas delgadas de aleación de Co-Fe-Cr-Al Heusler: interpretación de las propiedades de transporte tipo semiconductor sin espacios de espín. Acta Mater. 2022, 232, 117958. [Referencia cruzada]

45. Pfeuffer, L.; Gràcia-Condal, A.; Gottschall, T.; Koch, D.; Faske, T.; Bruder, E.; Lemke, J.; Taubel, A.; Ener, S.; Scheibel, F.; et al. Influencia de la microestructura en la aplicación de compuestos de Ni-Mn-In Heusler para enfriamiento multicalórico mediante campo magnético y tensión uniaxial. Acta Mater. 2021, 217, 117157. [Referencia cruzada]

46. Budruk, A.; Phatak, C.; Petford-Long, Alaska; De Graef, M. Estudio de magnetización TEM de Lorentz in situ de un material ferromagnético de Ni-Mn-Ga Aleación con memoria de forma. Acta Mater. 2011, 59, 4895–4906. [Referencia cruzada]

47. Hao, Z.; Liu, R.; Fan, Y.; Wang, L. Cálculos de primeros principios de una nueva aleación semimetálica de Heusler Fe-Cr-As. J. Compd. de aleaciones. 2020, 820, 153118. [Referencia cruzada]

48. Mori, K.; Horibe, T.; Maejima, K. Evaluación de la fuerza axial en un perno de FeCo utilizando el efecto magnetoestrictivo inverso. Medida 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. Lograr un efecto magnetoestrictivo lineal. en aleaciones texturizadas de MnCoSiGe. Acta Mater. 2023, 242, 118486. [Referencia cruzada]

50. Wittek, P.; Cucchietti, FM Un solucionador Trotter-Suzuki distribuido de segundo orden con un núcleo híbrido CPU-GPU. Computadora. Física. Comunitario. 2013, 184, 1165–1171. [Referencia cruzada]

51. Ariasoca, TA; Sholihun; Santoso, I. Método de propagación en el tiempo de Trotter-Suzuki para calcular la densidad de estados de grafeno desordenado. Computadora. Madre. Ciencia. 2019, 156, 434–440. [Referencia cruzada]

52. Wittek, P.; Calderaro, L. Núcleos computacionales extendidos en una implementación masivamente paralela de la aproximación Trotter-Suzuki mación. Computadora. Física. Comunitario. 2015, 197, 339–340. [Referencia cruzada]

53. Semenova, A.; Dyachenko, SA; Korotkevich, AO; Lushnikov, PM Comparación de métodos de integración hamiltoniana y de paso dividido para la simulación de ecuaciones no lineales de tipo Schrödinger. J. Computación. Física. 2021, 427, 110061. [Referencia cruzada]

54. Zhang, X.; Yang, B.; Wei, C.; Luo, M. Método de cuantificación y ecuación de Schrödinger del tiempo fraccionario y sus efectos débiles en el hamiltoniano: transiciones de fase de energía y funciones de onda. Comunitario. Ciencia no lineal. Número. Simultáneo. 2021, 93, 105531. [Referencia cruzada]

55. Graf, T.; Felser, C.; Parkin, SSP Reglas simples para la comprensión de los compuestos de Heusler. Prog. Química de estado sólido. 2011, 39, 1–50. [Referencia cruzada]

56. Pirge, G.; Hyatt, CV; Altınta¸s, S. Caracterización de aleaciones con memoria de forma magnética de Ni-Mn-Ga. J. Mater. Proceso. Tecnología. 2004, 155–156, 1266–1272. [Referencia cruzada]

57. Webster, PJ; Ziebeck, KRA Propiedades magnéticas dinámicas de aleaciones ferromagnéticas y antiferromagnéticas de Heusler. J. Magn. Magn. Madre. 1985, 50, 7–18. [Referencia cruzada]

58. Scherban, AB; Meshcheryakova, EN Aproximación a la formalización de modelos de identificación y gestión estructural de sistemas complejos. J. Adv. Res. Din. Sistema de control 2019, 11, 124-131.

59. Vorontsov, AA; Slesarev, YN Modelado matemático y verificación experimental de señales de salida de convertidores de movimiento magnetoestrictivos . En Actas de la Conferencia Internacional Rusa de Automatización de 2019, RusAutoCon, Sochi, Rusia, 8 a 14 de septiembre de 2019.

Machine Translated by Google

60. Pashchenko, D.; Martyshkin, A.; Trokoz, D. Modelado de algoritmos de control de procesos para sistemas de computación paralela utilizando Autómatas no deterministas. Semental. Sistema. Decide. Controlar 2021, 337, 235–249.
61. Sedelnikov, A.; Kurkin, E.; Quijada-Pioquinto, JG; Lukyanov, O.; Nazarov, D.; Chertykov-tseva, V.; Kurkina, E.; Hoang, VH Algoritmo de optimización de hélices basado en evolución diferencial. Computación 2024, 12, 52. [CrossRef]

Descargo de responsabilidad/Nota del editor: Las declaraciones, opiniones y datos contenidos en todas las publicaciones son únicamente de los autores y contribuyentes individuales y no de MDPI ni de los editores. MDPI y/o los editores renuncian a toda responsabilidad por cualquier daño a personas o propiedad que resulte de cualquier idea, método, instrucción o producto mencionado en el contenido.

Machine Translated by Google

cálculo

MDPI

Artículo

Modelado Matemático del Proceso de Transferencia de Calor en Esféricos Objetos con defectos planos, cilíndricos y esféricos

Pavel Balabanov, Andrey Egorov y Huthefa Abu Zetoonh *, Alejandro Divino, Sergey Ponomarev, Victor Yudaev, Sergey Baranov

Departamento de Mecatrónica y Medidas Tecnológicas, Universidad Técnica Estatal de Tambov, 392000 Tambov, Rusia; 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.ru (HAZ)
* Correspondencia: egorov.andrey@list.ru; Tel.: +7-(910)-6522100

Resumen: Este artículo propone un método para determinar los parámetros óptimos para la prueba térmica de tejidos vegetales de frutas y verduras que contienen defectos superficiales y subsuperficiales en forma de áreas de tejidos vegetales con diferentes características termofísicas. Basándose en modelos matemáticos bien conocidos para objetos de formas predominantemente planas, cilíndricas y esféricas que contienen regiones de defectos planas, esféricas y cilíndricas, se encontraron soluciones numéricas de campos de temperatura tridimensionales no estacionarios, lo que permitió medir la potencia y Tiempo de exposición térmica de la superficie de la muestra a la radiación de lámparas infrarrojas utilizando el método de elementos finitos. De este modo se pudo garantizar la detección fiable de un contraste de temperatura de hasta 4 ◦C entre las zonas defectuosas y libres del objeto de prueba mediante modernas cámaras termográficas. En este caso, los defectos del subsuelo se pueden detectar a una profundidad de hasta 3 mm desde la superficie. Para determinar los parámetros de modelos matemáticos de campos de temperatura, como la conductividad térmica y el coeficiente de difusividad térmica de los tejidos vegetales, se propone un nuevo método de flujo de calor pulsado desde un calentador plano; esto difiere en el método de procesamiento de datos experimentales y permite determinar las características requeridas con alta precisión durante la etapa activa del experimento en un período que no exceda de 1 a 3 minutos.

Palabras clave: control termofísico; enfermedades de las plantas; modelado de campos de temperatura

check for updates

Cita: Balabanov, P.; Egórov, A.; Divin, A.; Ponomarev, S.; Yudayev, V.; Baranov, S.; Abu Zetoonh, H. Modelado Matemático del Proceso de Transferencia de Calor en Objetos Esféricos con Defectos Planos, Cilíndricos y Esféricos. Computación 2024, 12, 148. https://doi.org/10.3390/ computation12070148

Editor académico: Ali Cemal Benim

Recibido: 10 de junio de 2024
Revisado: 15 de julio de 2024
Aceptado: 15 de julio de 2024
Publicado: 17 de julio de 2024

Copyright: © 2024 por los autores. Licenciatario MDPI, Basilea, Suiza. Este artículo es un artículo de acceso abierto. distribuido bajo los términos y condiciones de los Creative Commons Licencia de atribución (CC BY) (https:// creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

1. Introducción

Los sistemas de visión por computadora pueden detectar eficazmente defectos en el tejido vegetal mediante el análisis de imágenes de frutas y verduras obtenidas en el rango de 8 a 13 micrones [1]. En este caso, las condiciones principales son diferencias significativas en las características termofísicas (TPC) de las zonas defectuosas y libres de defectos del objeto de prueba, así como los parámetros operativos correctamente seleccionados del proceso de prueba térmica no destructiva y sin contacto. que proporcionan el contraste de temperatura requerido entre las diferentes zonas de calidad del tejido vegetal [2]. Para determinar los parámetros operativos de las pruebas térmicas, es necesario resolver el problema del modelado matemático de la transferencia de calor en cuerpos esféricos heterogéneos que contienen inclusiones (defectos) con características térmicas que difieren de las características del material base. En este sentido, surge el problema de determinar los parámetros de los modelos matemáticos: el coeficiente de difusividad térmica y la conductividad térmica de las sustancias incluidas en las zonas defectuosas y libres de defectos del objeto de prueba.

El análisis de fuentes literarias permite concluir que, en la mayoría de los casos, los modelos matemáticos de transferencia de calor en cuerpos de materiales heterogéneos se desarrollan para objetos en forma de placa, cilindro o esfera. La formulación del problema de la transferencia de calor en un material heterogéneo en forma de placa ilimitada se describe en [3,4], donde se analiza el problema de la congelación de un suelo húmedo en estado descongelado y que tiene una cierta distribución específica de temperatura y La humedad puede considerarse clásica.

Machine Translated by Google

Al mismo tiempo, hay que tener en cuenta que el proceso de transferencia de calor en los tejidos vegetales de frutas y verduras difiere significativamente de procesos similares en el suelo debido a las diferentes formas de los objetos. En [3,5] se consideran los problemas acoplados de conductividad térmica estacionaria en un cuerpo no uniforme que consta de varias partes homogéneas, en cada una de las cuales el coeficiente de conductividad térmica del material depende de la distribución de temperatura en el cuerpo. Sin embargo, este enfoque no es aplicable al modelar el proceso de transferencia de calor inestable. Desde esta perspectiva, la Referencia [6] es de particular interés, ya que considera un modelo matemático del campo de temperatura en una bola multicapa no homogénea que consta de varias capas. Cada capa, en cada momento del tiempo, se caracteriza por radios internos y externos, temperatura, capacidad calorífica específica, densidad, conductividad térmica, humedad y densidad de liberación de calor. En este estudio se propuso una dependencia para calcular la temperatura de la capa en función del número de Fourier.

El modelo propuesto se puede utilizar para calcular el campo de temperatura en objetos de origen vegetal si su forma es casi esférica, como las manzanas. Sin embargo, no tiene en cuenta la influencia de defectos localizados en un volumen limitado del objeto. En [7] se considera un modelo matemático de un cilindro multicapa de dimensiones finitas con un defecto en la capa interior.
La solución se puede obtener mediante un método numérico. Al mismo tiempo, el modelo matemático propuesto permite determinar los campos de temperatura en un cilindro multicapa durante su enfriamiento y la presencia de defectos en la capa interna. El modelo presentado se puede utilizar para describir el campo de temperatura en objetos cilíndricos de origen vegetal (por ejemplo, zanahorias y cebollas). En [8] se propuso un modelo del campo de temperatura en un objeto plano con defectos cilíndricos. En [9], se considera la transferencia de calor en estructuras de varillas en capas [9]. En [10], a partir de un modelo estadístico, un modelo de red neuronal artificial y un modelo de elementos finitos, se estudian los campos de temperatura de objetos planos con diversas inclusiones .

En [11-14], se presentan modelos matemáticos de campos de temperatura de defectos en forma de grietas. Se observa que la propagación del calor en un objeto conduce a la aparición de una distribución compleja del campo de temperatura en su superficie. Al arreglar esto formalmente y resolver el problema inverso de la conductividad térmica no estacionaria, se pueden encontrar la posición y las dimensiones aproximadas del defecto. Así, para determinadas formas geométricas e inclusiones se pueden utilizar los métodos conocidos de modelización analítica de campos de temperatura en medios heterogéneos. Al mismo tiempo, debido a la necesidad de calcular campos de temperatura tridimensionales , los modelos contienen una serie de simplificaciones que pueden reducir significativamente su precisión. El más prometedor parece ser el modelado numérico de los parámetros de objetos heterogéneos [15], incluidos los campos de temperatura [16], utilizando el método de los elementos finitos [17]. En [18,19], este método de modelado se utilizó para objetos que contienen una fase sólida con poros y grietas [20] llenos de otra sustancia, lo que permitió calcular cambios de temperatura, tensión mecánica y deformación de fase en objetos heterogéneos de una forma arbitraria, incluidos los nanoobjetos. Modelar los procesos de transferencia de calor en los tejidos vegetales se complica por la necesidad de tener en cuenta la difusión de la humedad y su posterior evaporación. Se realizaron estudios similares para simular los procesos de secado de granos de maíz [21] y granos de cacao [22], papa [23], etc. Los modelos matemáticos utilizados para estudiar el proceso de secado permiten determinar los parámetros operativos óptimos que aseguran Consumo mínimo de energí Sin embargo, su complejidad conlleva inevitablemente costes de potencia informática y recursos de tiempo para calcular los campos de temperatura tridimensionales en los objetos de control. Al determinar los parámetros operativos óptimos de las pruebas térmicas activas, se debe tener en cuenta la necesidad de limitar el poder de la exposición térmica para garantizar la seguridad de los tejidos vege
Esto también permite calentar los tejidos vegetales para que las propiedades termofísicas se puedan considerar constantes. En [24,25] se desarrollaron modelos que permiten determinar los parámetros de funcionamiento de la radiación láser (potencia, área del punto de calentamiento, etc.) que actúa sobre la superficie de una muestra según una distribución de temperatura no estacionaria, proporcionando la contraste de temperatura necesario entre las zonas con defectos y libres de defectos de

Machine Translated by Google

el objeto de prueba, así como la determinación de sus parámetros geométricos, calculados mediante modelos de regresión.

La referencia [26], que se centra en el desarrollo de modelos matemáticos en problemas de diagnóstico térmico, sugiere que pronosticar la durabilidad de elementos estructurales compuestos (CSE) con defectos también puede ser útil en el desarrollo de algoritmos para determinar la vida útil de productos vegetales. Se considera que la tarea de predecir la durabilidad es calcular los parámetros de daño de los CSE con defectos diagnosticados bajo la influencia de factores mecánicos externos durante un período determinado, así como calcular el tiempo límite hasta la falla. El estudio también contiene una formulación matemática del problema geométrico inverso de la conductividad térmica para reconocer formas tridimensionales y tipos de defectos en CSE y un método numérico para resolverlo.

En [27-29], el proceso de conductividad térmica en un medio heterogéneo se modela mediante una matriz homogénea con inclusiones cilíndricas separadas por una capa de contacto. Asimismo, en estos trabajos se estudió la influencia del espesor y material de la capa sobre las propiedades efectivas del sistema matriz-capa-inclusión y se obtuvieron perfiles de temperatura para configuraciones con diferentes concentraciones de inclusiones y de la capa superficial. , así como para los diferentes coeficientes de conductividad térmica de los comp

Para determinar las características termofísicas de los materiales, se pueden utilizar datos experimentales sobre las características termofísicas de los tejidos vegetales tomados de publicaciones científicas autorizadas [30,31], o dependencias calculadas [30], incluidas las obtenidas mediante tecnologías de aprendizaje automático y neuronas artificiales. redes (ANN) [32]. Sin embargo, hay que tener en cuenta que las características termofísicas pueden diferir según la variedad, así como el lugar de crecimiento. Por lo tanto, el método más confiable para obtener información sobre los valores de las propiedades termofísicas sigue siendo un experimento termofísico.

Así, la revisión de la literatura mostró, por un lado, que los modelos matemáticos existentes de transferencia de calor en medios heterogéneos, por regla general, no tienen en cuenta las dimensiones finitas del objeto de prueba y están diseñados para determinar la presencia de inclusiones de un determinada forma geométrica. Por otro lado, su implementación numérica requiere importantes recursos informáticos debido a su complejidad y, por regla general, a su no linealidad. Los objetivos de la investigación descrita en este artículo son adaptar modelos matemáticos conocidos de campos de temperatura para objetos tales como árboles frutales y cultivos de hortalizas que contienen defectos superficiales y subterráneos; obtener una solución numérica de los modelos matemáticos presentados para determinar la potencia y el tiempo óptimos de exposición térmica externa, asegurando un contraste de temperatura aceptable entre las zonas con defectos y libres de defectos; y desarrollar un método y configurar un dispositivo de medición con el objetivo expreso de determinar las características termofísicas de los tejidos vegetales de objetos de control, cuyos valores se utilizan como parámetros de modelos matemáticos.

2. Materiales y métodos

2.1. Un modelo matemático del campo de temperatura de un objeto esférico con defectos

Al escribir modelos matemáticos en forma de problemas de valores límite de conductividad térmica, que permiten calcular los campos de temperatura de los objetos de prueba (TO) (o sus áreas locales), se hicieron las siguientes suposiciones. Los objetos de prueba de origen vegetal, como manzanas, patatas, naranjas y limones, tienen forma esférica (Figura 1). Los defectos que contienen, como podredumbre, magulladuras, granizo y costras, tienen una forma similar a la de la superficie del objeto en el que se encuentran. Supongamos que V1, V2, V3 y V4 son un conjunto de puntos x, y y z, que pertenecen a tejidos sanos 1 (Figura 1) del objeto de prueba, y tejidos que contienen defectos de forma plana 2 (grosor H), cilíndrico. forma 3 o forma esférica 4 (radio R), respectivamente. Los defectos se encuentran a una distancia h de la superficie del objeto. De manera similar, S1, S2, S3 y S4 son un conjunto de puntos x, y , z que pertenecen a la superficie exterior de tejidos sanos y tejidos dañados por defectos en la forma correspondiente. La temperatura inicial T0 de los tejidos vegetales se considerará constante y distribuida uniformemente por todo el volumen del objeto de prueba. Cuando el objeto de prueba está expuesto a

Machine Translated by Google

un flujo de calor de una fuente de calor, el cambio de temperatura T en la superficie y dentro del objeto no excede de 3 a 5 ◦C. Con tal cambio en la temperatura de la superficie del objeto de prueba, las propiedades termofísicas de los tejidos vegetales pueden considerarse independientes de la temperatura y constantes en el tiempo.

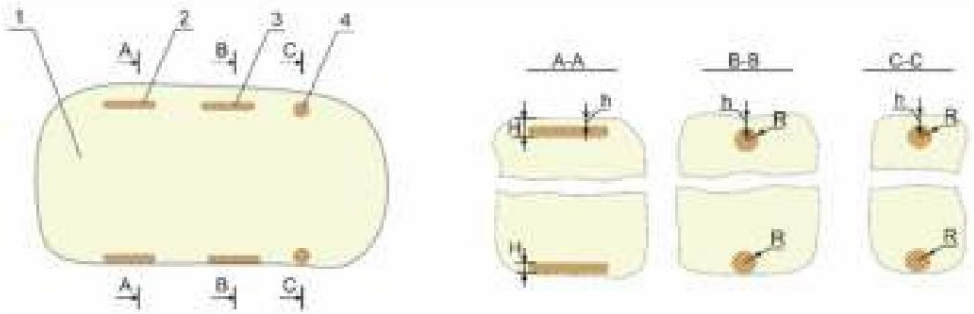


Figura 1. Modelo físico de objetos esféricos con defectos. A, B, C son los planos de corte para tejidos que contienen defectos de forma plana, cilíndrica y esférica, respectivamente.

Tomando como base el modelo del campo de temperatura de un cuerpo esférico [33,34] , propusimos un modelo matemático del campo de temperatura de un cuerpo esférico que contiene los tres tipos de defectos considerados. En el caso general, esto se puede escribir en forma de un problema de valor límite de conductividad térmica [35]:

$$\frac{\partial Ti(x, y, z, \tau)\,\lambda}{} = \operatorname{div}[\lambda i \operatorname{grad} Ti(x, y, z, \tau)], \quad \rho\, cipi\, \frac{\partial}{\partial \tau} \quad (1)$$

$$i = 1, 4, \quad \tau > 0, x, y, z \quad Vi$$

$$Ti(x, y, z, 0) = T0 = \text{constante}, \quad (2)$$

$$\frac{\partial T1(x, y, z, \tau)\,\lambda 1}{\lambda \quad \partial n}_{x,y,z \quad S1} = q(\tau) = \begin{cases} q = \text{constante}, & 0 < \tau < \tau 1, \\ 0, & \tau > \tau 1 \end{cases} \quad (3)$$

$$T1(x, y, z, \tau)|_{\tau \quad x,y,z \quad Si+1} = Ti+1(x, y, z, \tau)|_{\tau \quad x,y,z \quad Si+1}$$

$$\lambda 1 \frac{\partial T1(x,y,z,\tau)}{\lambda \quad \partial ni+1}_{x,y,z \quad Si+1} = \lambda i+1 \frac{\partial Ti+1(x,y,z,\tau)}{\partial ni+1}_{x,y,z \quad Si+1}, \quad \text{yo} = 1, 3, \quad (4)$$

$$\frac{\partial T1(x, y, z,}{\tau)\,\partial x}_{x=0} = \frac{\partial T1(x, y, z, \tau)}{\partial y}_{y=0} = \frac{\partial T1(x, y, z, \tau)\,\partial z}{}_{z=0} = 0, \quad (5)$$

donde λ, c, ρ y a son la conductividad térmica, la capacidad calorífica específica, la densidad y la difusividad térmica de los tejidos vegetales, respectivamente; τ es tiempo; n es un único vector normal a la superficie S de la región correspondiente del objeto de prueba; q es la densidad de flujo de calor específico de una fuente de calor externa. Dado que, durante el experimento, el objeto de prueba estuvo expuesto a un efecto térmico que duró aproximadamente 20 a 30 s, durante el tiempo especificado, en el centro del objeto de prueba (x = y = z = 0), la temperatura cambia de manera tan insignificante que descuidamos este cambio. Por lo tanto, en el centro de la muestra, se pueden utilizar las condiciones de contorno especificadas por la Ecuación (5). Además, debido al calentamiento insignificante del objeto de prueba, ignoramos el cambio en las propiedades termofísicas.

Tenga en cuenta que, teniendo en cuenta la diferencia de temperatura insignificante, en relación con los valores iniciales, en los tejidos vegetales durante la prueba térmica, en lugar de la condición límite especificada por la ley de Stefan-Boltzmann, utilizamos la condición límite del segundo tipo (3), donde τ1 es la duración de la exposición al calor del objeto de prueba al diagnosticar defectos.

Machine Translated by Google

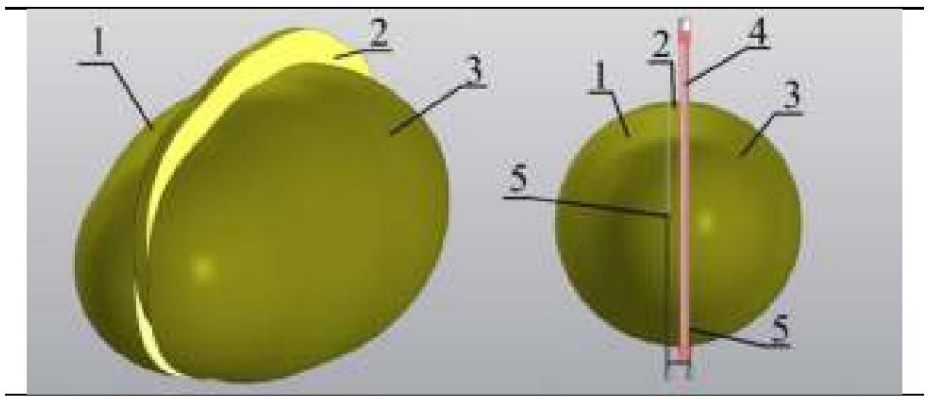
Al describir matemáticamente el campo de temperatura de un cuerpo esférico con defectos 2′ y 3′ ubicados en su superficie, complementamos la condición de frontera (3) con la siguiente ecuaciones:

$$\partial n_i \frac{\partial T_i(x, y, z, \tau)\, \lambda_i}{}_{x,y,z \quad Si} = q(\tau), \; yo = 2, 4.$$

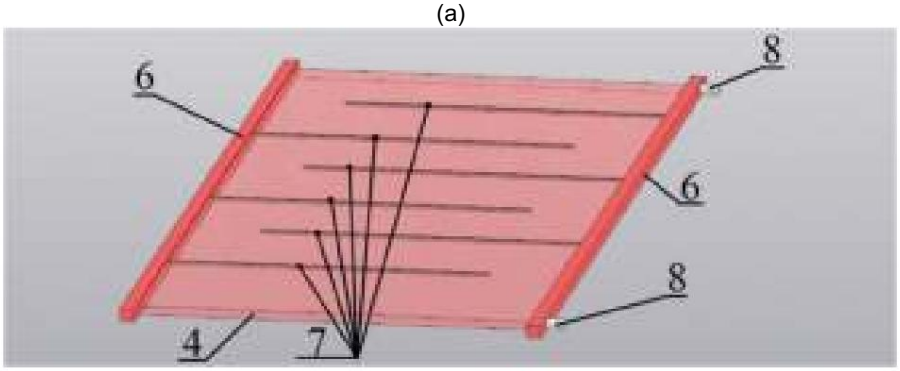
Al modelar el campo de temperatura de objetos de origen vegetal que tienen forma esférica y contienen defectos internos y externos, es necesario conocer las características termofísicas de los tejidos vegetales correspondientes. Para estudiar los TPC se propone el método que se describe a continuación.

2.2. Un modelo matemático del campo de temperatura en una muestra plana cuando se expone a una fuente de calor pulsado

Para determinar los TPC de los tejidos vegetales, se cortaron las muestras 1 a 3 del cuerpo esférico en estudio (Figura 2a), que tenían la forma de placas con un espesor l. Se colocó un calentador plano de baja inercia 4 entre las muestras 2 y 3. El calentador eléctrico (Figura 2b) estaba hecho de lámina de permalloy 4, fijada en soportes dieléctricos 6. Se hicieron ranuras 7 en la lámina para asegurar la resistencia eléctrica especificada de la calentador: 1,57 ohmios. Los elementos más externos del calentador estaban equipados con contactos eléctricos 8, a los que se conectan cables para suministrar voltaje eléctrico. Dado que el calentador estaba hecho de lámina delgada, la duración del pulso de potencia que se le suministraba era de 20 a 30 s; luego, durante el modelado matemático, descuidamos la inercia durante el calentamiento. La unión principal de un termopar diferencial 5 se instaló entre las muestras 1 y 2, y se instaló una unión adicional del mismo termopar en la superficie inferior de la muestra 3.



(a)



(b)

Figura 2. Modelo físico del dispositivo de medición (a) y calentador eléctrico (b).

Machine Translated by Google

Cuando se aplica un pulso de voltaje eléctrico al calentador, el campo de temperatura en La muestra 2 se puede escribir en forma de un problema de valores en la frontera:

$$\frac{\partial T(x,\tau)}{\partial \tau} = un\frac{\partial\, 2T(x,\tau)}{\partial x\, 2}, \tau > 0,\ 0 < x < \infty, \quad (6)$$

$$T(x,0) = T0 = 0,\ \partial T(0, \quad (7)$$

$$\frac{\tau) = q\, h(\tau)}{} - h\,\tau - \tau imp,\ -\lambda\,\partial x \quad (8)$$

$$T(\infty,\tau) = T0 = 0, \quad (9)$$

donde T(x, τ) es la temperatura de la muestra en estudio en el plano de coordenada x en el tiempo τ, contado desde el momento en que comienza a suministrarse el pulso térmico; T0 es la temperatura inicial; q es el flujo de calor suministrado a la muestra durante un período de tiempo 0 < τ ≤ τimp; h(τ), h(τ − τimp) son funciones escalonadas unitarias asimétricas especificadas por las siguientes relaciones:

$$h(\tau) = \begin{matrix} 0, \tau < 0, \\ \tau \geq 0; \end{matrix} \quad h\,\tau - \tau\,imp = 1, \quad \begin{matrix} 0\ \tau < \tau imp, \\ 1\ \tau \geq \tau imp; \end{matrix} \quad (10)$$

τimp es la duración del pulso térmico al determinar los TPC. Despreciamos la dependencia de las propiedades termofísicas deseadas de la temperatura, ya que la temperatura de los tejidos vegetales en el área de exposición térmica durante el experimento no cambió más de 5 ◦C.

La solución al problema de valores en la frontera (6)–(9) tiene la forma $T(x,\tau) - T0 = \cdot f\ x, \tau, \tau imp, a$ donde $\frac{2q}{\lambda}$,

$$fx, \tau, \tau imp, a = \begin{matrix} \sqrt{a\tau}\cdot ier\ fc\ \frac{}{2\sqrt{a\tau}} & si\ 0 < \tau \leq \tau imp, \\ \sqrt{a\tau}\cdot ier\ fc\ \frac{}{2\sqrt{a\tau}} - a\,\tau - \tau imp\cdot ier\ fc\ \frac{}{2\,a(\tau-\tau imp)} & si\ \tau > \tau imp, \end{matrix}$$

$ier\ f\ c(u) = er\ f\ c(W)dW = \sqrt{}$ la función $er\ f\ c(W) = 1 - erf(W);\ \frac{1}{-W2}\ \frac{2-u}{mi\,\pi}$ − uer f c(u) es una función especial que es integral de dW es la función de error gaussiana. $2\ erf(W) = \sqrt{}$

$\frac{}{\pi}$ Nosotros

Para el tiempo τ ≥ τimp, la solución anterior tomará la forma

$$T(x,\tau) - T0 = \lambda\ \frac{qx}{}\ \frac{ier\ f\ c[U(x,\tau)]}{U(x,\tau)} - \frac{ier\ fc\ U\ x, \tau - \tau imp}{Ux\ ,\ \tau - \tau imp}\ , \quad (11)$$

donde $U(x,\tau) = 2\sqrt{}\ a\tau$, U x, τ − τimp = son funciones adimensionales que dependen de $2\ a(\tau-\tau imp)$

ing en x, τ, τimp, a y $U\ x, \tau - \tau imp = 2$ $\frac{}{a(\tau-\tau imp)} = \frac{}{a\tau\ \frac{\tau-\tau imp\ 2}{\tau}} = U(x,\tau)$ $\frac{\tau}{\tau-\tau imp}$.

Del análisis de la Expresión (11), queda claro que, en algún momento, τ = τmax el cambio en la diferencia de temperatura [T(x, τ) − T0] alcanzó su valor máximo [Tmax − T0] = [T(x, τmáx) − T0]. Y, en el momento especificado, τ = τmax corresponde a un cierto valor de la función adimensional Um = U(x, τmax) = $2\ \sqrt{}\ a\tau max$

$\frac{}{}$.

3. Resultados

El algoritmo utilizado para realizar el experimento y determinar los TPC deseados garantiza que, durante el tiempo τimp, se suministre una potencia P constante a un calentador eléctrico plano de área S (P = 2qS), y que el cambio en el tiempo corresponda a las diferencias de temperatura. T(l, τ) − T0 se registra utilizando una señal de un termopar diferencial. Con base en los datos experimentales obtenidos, se encuentra el valor máximo de la diferencia de temperatura Tmax −

Machine Translated by Google

el experimento se completa cuando la condición (T(l, τ) − T0)/(Tmax − T0) > 0,8 . . . 0,9 se cumple. Los datos experimentales obtenidos se utilizan para determinar la conductividad térmica y difusividad térmica. Para lograr esto, para un conjunto de valores λx, ax, seleccionados de los rangos amin < ax < amax, λmin < λx < λmax en los que pueden encontrarse los TPC requeridos, los valores de los $\lambda x) = \sum_{yo=1}^{norte} [Tt(l, \tau i) - T(l, \tau i)]2$, donde Tt(l, τi) es el teofuncional F(ax, temperatura retical calculada en el momento τi utilizando el modelo (11) para un TPC determinado; n es el numero de los valores de temperatura registrados durante la medición experimental de parámetros termofísicos. propiedades. Para el par ax, λx, F → min se toma como el TPC deseado.

Utilizando el algoritmo descrito, se determinaron los TPC de tejidos vegetales de frutas y verduras. obtenido. Como ejemplo, la Tabla 1 muestra la expectativa matemática M y el estándar desviación D de los resultados de cinco mediciones de los TPC de personas sanas y afectadas por enfermedades Tejidos vegetales de papa. Utilizando los valores de TPC obtenidos y los matemáticos descritos arriba, el modelado de campos de temperatura en objetos esféricos con defectos de varios Se realizaron formas.

Tabla 1. TPCs de tejidos vegetales de frutas y hortalizas.

Muestra de prueba	λ, W/(m·K)	un, (×107) m2 /s	cρ, (×103) kJ/(m3 ·K)
M (tejido sano)	0.507	1.417	3.56
D (tejido sano)	0.010	0.022	0.011
M (tejido del tizón tardío)	0.550	1.420	3.800
D (tejido del tizón tardío)	0.009	0,046	0,017
M (tejido de podredumbre seca)	0.384	1.272	3.015
D (tejido de podredumbre seca)	0.007	0.053	0,178

Como ejemplo, consideramos el procedimiento para validar un modelo matemático de transferencia de calor en un objeto con forma de elipsoide (Figura 3a) con los semiejes mayor y menor que tienen dimensiones de 64 a 70 mm y 23 a 65 mm, respectivamente. El tamaño indicado Los rangos corresponden al rango de tamaños promedio de los tubérculos de papa utilizados como semillas para siembra. El defecto tiene forma esférica y se encuentra a una profundidad h de hasta 3 mm por debajo del superficie. Los defectos situados a una profundidad de más de tres milímetros no pueden detectarse mediante el método térmico propuesto. La relación entre el volumen del defecto V3 y el volumen total. El V0 del objeto simulado estaba en el rango de 1 a 3%, lo que corresponde aproximadamente a el rango de radios de defectos esféricos de 2,3 a 10,5 mm en los tubérculos más pequeños y más grandes. Los cálculos del campo de temperatura en la superficie del modelo se llevaron a cabo en el temperatura inicial del objeto de T0 = 20 ◦C. En la superficie externa del objeto de prueba, un calor Se fijó un flujo q con una potencia específica de 50-3000 W/m2 , actuando durante un tiempo τm en el rango 1 a 5 s. Al elegir los rangos especificados de densidad de flujo de calor y tiempo de exposición térmica Para el objeto de prueba, nos guiamos por las siguientes consideraciones. Cuanto más actuemos sobre una tubérculo de papa y cuanto mayor es la densidad del flujo de calor, más se calienta el tubérculo. esto lleva a la destrucción térmica de sus tejidos y reduce su vida útil. Cuanto menor sea el flujo de calor densidad en la superficie del tubérculo y más corto será el período durante el cual se aplica calor tubérculo, menos probable será que se detecte un defecto. Teniendo esto en cuenta, fue encontrado experimentalmente que la elección de los rangos indicados permitirá, por un lado, para que se detecte un defecto; por otro lado, no provocará que el tejido de la patata se caliente. por encima de 5 ◦C respecto a la temperatura inicial de 20 ◦C. Para valores dados de τm y q, la Se calculó el campo de temperatura en la superficie del objeto de prueba (Figura 3b), y luego el Valor absoluto de la diferencia máxima de temperatura ΔTmax en la región del defecto y en Se calculó la región de tejido no dañado. Se realizó un experimento en el que un objeto de prueba real, un tubérculo de papa (Figura 3c), fue expuesto a un flujo de calor q durante el tiempo τm y El campo de temperatura se midió utilizando una cámara termográfica Fluke Ti32 (Figura 3d). Próximo, Se calculó ΔTmax .

Machine Translated by Google

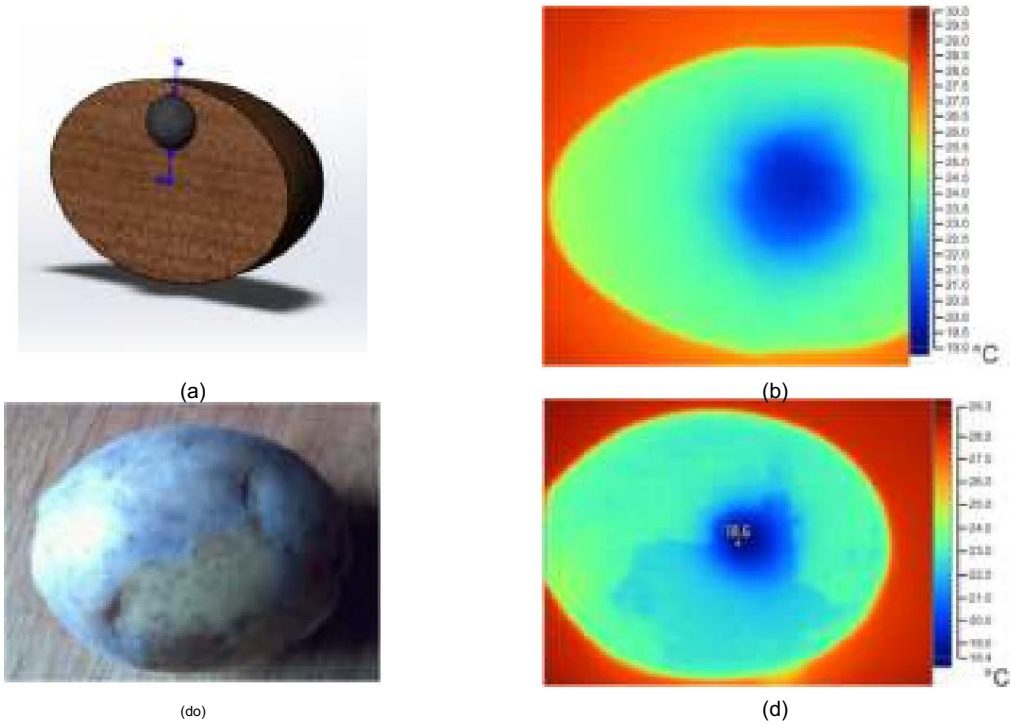


Figura 3. Un modelo 3D de un objeto esférico con un defecto esférico en el subsuelo (a), el campo de temperatura en su superficie en el área del defecto (vista superior) (b), un tubérculo de papa real con un defecto interno (c) y la temperatura. campo en su superficie (d).

La Figura 4 muestra ejemplos de una comparación de valores teóricos (línea continua) y experimentales (líneas punteadas) de ΔTmax, calculados para objetos de prueba con defectos esféricos como pudrición seca (Figura 4a) y tizón tardío (Figura 4b), obtenidos para flujo de calor q en el rango de 50 a 1500 W/m2 en el tiempo τm de exposición térmica del objeto en el rango de 1 a 5 s.

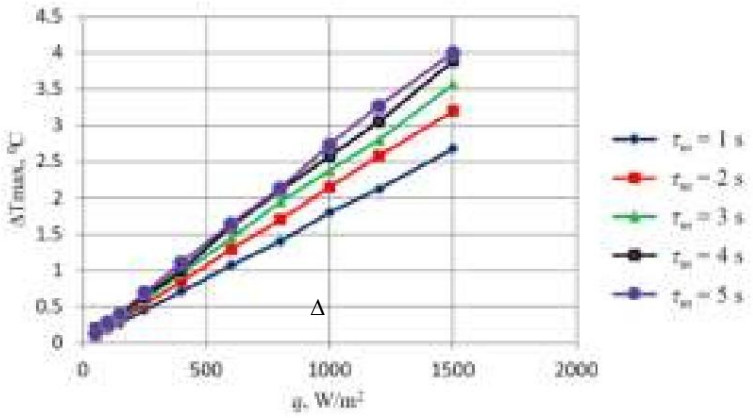
Los datos de cálculo obtenidos permiten, dependiendo de la sensibilidad del equipo termográfico utilizado para la inspección térmica, seleccionar la potencia mínima de exposición térmica y su duración, asegurando el reconocimiento de defectos. Por ejemplo, como se muestra en la Figura 4, está claro que cuando se produce un defecto a una profundidad de hasta 3 mm con q = 300 W/m2 y τ1 = 1 s, se producirá una diferencia de temperatura ΔTmax de aproximadamente 0,5 ◦C. observarse en la región donde se produce el defecto, lo cual es suficiente para ser detectado por una cámara termográfica con una sensibilidad de 0,05 ◦C.

Las recomendaciones desarrolladas permitieron seleccionar los parámetros óptimos de impacto térmico en el objeto de prueba. Como ejemplo, la Figura 5 muestra fotografías de patatas defectuosas obtenidas en las regiones visible e infrarroja del espectro de radiación cuando los objetos fueron expuestos a un flujo de calor con una densidad de 300 W/m2 durante un tiempo de 2,4 s.

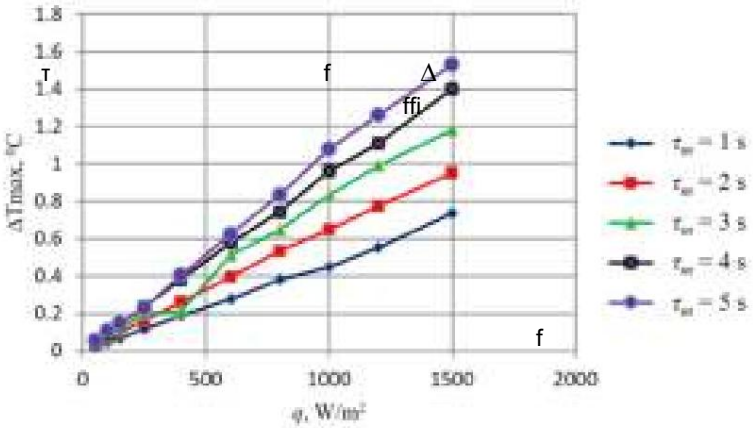
La Figura 5 muestra que la temperatura en el área con defecto y en el área libre de defectos del tejido de un tubérculo de papa después de la exposición térmica difiere en 1,4 ◦C. El campo de temperatura del tejido de patata sin defectos es uniforme. Sin embargo, se observa un gradiente de temperatura en la zona del defecto. Esto permite el uso de una cámara termográfica para detectar defectos como la pudrición seca (Figura 5a) o el tizón tardío (Figura 5b). Esto se puede lograr de la siguiente manera. Cuando un tubérculo de patata se calienta brevemente, durante un máximo de 5 s, mediante una fuente de calor externa con una potencia de hasta 1500 W/m2, se observará en la imagen térmica un contraste de temperatura en el área del defecto, lo que permite detectado.

Machine Translated by Google

T



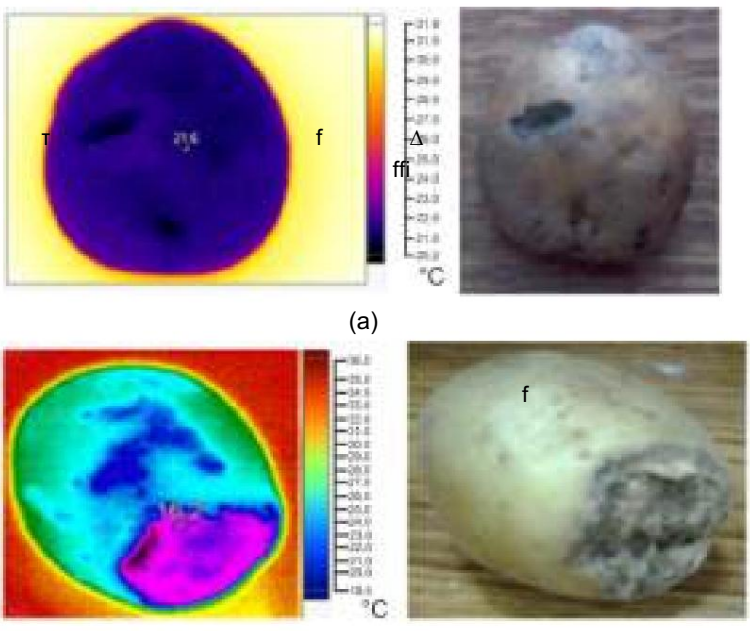
(a)



(b)

Δ

Figura 4. Gráficos de dependencia |ΔTmax| = f(q) para subsuelo esférico: (a) podredumbre seca; (b) tizón tardío defecto.



(a)

(b)

Figura 5. Fotografías de tejidos de papa sin defectos y con defectos en las regiones infrarroja y visible de el espectro: (a) podredumbre seca; (b) tizón tardío.

ffi

Machine Translated by Google

4. Conclusiones

Al inspeccionar térmicamente defectos en objetos de origen vegetal, existen riesgos de daño térmico al tejido vegetal debido a una exposición térmica prolongada o de alta intensidad. Por otro lado, una potencia insuficiente de la influencia térmica puede provocar que algunos defectos, especialmente los que se encuentran debajo de la superficie de los objetos de prueba, no se detecten. Por lo tanto, es necesario determinar los parámetros óptimos de exposición térmica, particularmente el tiempo de exposición y la potencia de las fuentes de radiación. Para resolver el problema, basándose en modelos matemáticos bien conocidos para objetos de formas predominantemente planas, cilíndricas y esféricas que contienen áreas de defectos planas, esféricas y cilíndricas, se obtuvieron soluciones numéricas de campos de temperatura no estacionarios tridimensionales , lo que hizo posible determinar, mediante el método de los elementos finitos, la potencia y el tiempo del impacto térmico sobre la superficie de la muestra debido a la radiación de las lámparas infrarrojas. Esto permitió que las modernas cámaras termográficas detectaran de forma fiable un contraste de temperatura de hasta 4 ◦C entre las zonas defectuosas y libres de defectos del objeto de prueba. En este caso, los defectos subsuperficiales pueden encontrarse a una profundidad de hasta 3 mm desde la superficie.

Para determinar los parámetros de los modelos matemáticos de campos de temperatura, como la conductividad térmica y el coeficiente de difusividad térmica de los tejidos vegetales, se propone un nuevo método de fuente pulsada de flujo de calor desde un calentador plano, que se diferencia en el método de procesamiento. datos experimentales y permite determinar las características requeridas con alta precisión durante la etapa activa del experimento, en un período que no exceda de 1 a 3 minutos.

Los experimentos realizados para probar el método de prueba térmica para detectar tejidos vegetales dañados en un tubérculo de papa mostraron que cuando se exponen al calor de lámparas infrarrojas con una potencia de hasta 1500 W durante 3 a 5 s, los defectos superficiales y subterráneos se distinguen claramente en el infrarrojo. Imágenes obtenidas mediante un sistema de visión técnica de cámara termográfica Fluke Ti32, que permite utilizar pruebas térmicas para clasificar las patatas antes de almacenarlas o antes de enviarlas al consumidor.

Contribuciones de los autores: PB, AD, AE, SP y HAZ: conceptualización, software, curación de datos, redacción (preparación del borrador original, redacción), revisión y edición, supervisión y adquisición de financiación ; PB, VY y SB: validación, análisis formal, investigación, visualización y redacción: preparación del borrador original. Todos los autores han leído y aceptado la versión publicada del manuscrito.

Financiamiento: Esta investigación fue financiada con el apoyo financiero del Ministerio de Ciencia y Educación Superior de la Federación de Rusia en el marco del proyecto “Desarrollo de un complejo robótico de plataformas terrestres y aéreas no tripuladas para su uso en tecnologías agrícolas” (124062100023-3) .

Declaración de disponibilidad de datos: los datos están contenidos en el artículo.

Conflictos de intereses: Los autores declaran no tener conflictos de intereses.

Referencias

1. Samanian, N.; Mohebbi, M. La termografía, un nuevo enfoque en los estudios de ciencias de los alimentos: una revisión. Proceso de alimentos del Ministerio de Justicia. Tecnología. 2016, 2, 110-119. [Referencia cruzada]
2. Ballester, C.; Jiménez-Bello, MA; Castel, JR; Intrigliolo, DS Utilidad de la termografía para la detección del estrés hídrico en plantas de cítricos y caqui. Agrícola. Para. Meteorol. 2013, 168, 120-129. [Referencia cruzada]
3. Zhao, L.; Gris, DM; Hombre, DH Análisis numérico de transferencia simultánea de calor y masa durante la infiltración en congelados. suelo. J. hidrol. 1997, 200, 345–363. [Referencia cruzada]
4. Lykov, AV Teoría de la conductividad térmica; Vysshaya Shkola: Moscú, Rusia, 1967; pag. 600. (En ruso)
5. Zarubin, VS; Rodikov, AV Simulación matemática del estado de temperatura de un cuerpo no homogéneo. Alta temperatura. 2007, 45, 243–254. [Referencia cruzada]
6. Kurmachev, YUF Modelado matemático del campo térmico de una bola no homogénea multicapa en modo inestable; Ciencia y Educación Edición Científica de Bauman; MSTU: Murfreesboro, TN, EE. UU., 2007. Disponible en línea: https : // cyberleninka.ru/article/n/matematicheskoe-modelirovanie-teplovogo-polya-mnogosloynogo-neodnorodnogo-shara-pri-nestatsionarnom-rezhime/viewer (consultado el 5 de julio de 2024).

Machine Translated by Google

7. Sinitsyn, NN; Shestakov, IV Modelado matemático del campo de temperatura de la armadura del mezclador teniendo en cuenta un defecto en la superficie interior. Universidad Estatal de Cherepovets. Toro. 2008, 4, 118–120.
8. Sinitsyn, NN; Makonkov, AV; Belozor, MY Modelado de un campo de temperatura no estacionario de pavimento asfáltico con relleno de caucho. En Modern Materials, Equipment and Technology, Actas de la 4ª Conferencia Científica y Práctica Internacional, Kursk, Rusia, 25 y 26 de diciembre de 2014; Libro Universitario Sociedad Anónima Cerrada: Kursk, Rusia, 2014; págs. 400–403.
9. Stankevich, IV Modelado matemático del estado de temperatura de estructuras espaciales de varillas hechas de materiales no homogéneos. Símb. Ciencia. 2016, 13, 53–57.
10. Li, J.; Yang, Y.; Liu, M. Avances de la investigación en la predicción de las propiedades de transferencia de calor de los tejidos en función de sus características estructurales. Adv. Texto. Tecnología. 2022, 30, 18-25. [Referencia cruzada]
11. Kotel'nikov, VV Modelado matemático del proceso de formación de un campo de temperatura en un defecto en forma de grieta en la región de un generador de estrés. Ocupar. Seguro. Indiana 2008, 5, 51–58. (En ruso)
12. Rittel, D. Aspectos termomecánicos de la iniciación dinámica de grietas. Int. J. Fracta. 1999, 99, 201–212. [Referencia cruzada]
13. Zviagin, AV; Udalov, AS; Shamina, AA Modelado numérico de la conducción de calor en cuerpos con grietas. Acta Astronauta. 2024, 214, 196–201. [Referencia cruzada]
14. Esfarjani, AA; Nazarí, MB; Bayat, SH Propagación dinámica de grietas en laminados compuestos de rigidez variable bajo choque térmico. Teor. Aplica. Fracta. Mec. 2024, 130, 104325. [Referencia cruzada]
15. Salmán, M.; Schmauder, S. Modelado multiescala de nanocompuestos de espumas de polímeros con memoria de forma. Computadora. Madre. Ciencia. 2024, 232, 112658. [Referencia cruzada]
16. Jin, L.; Zhang, R.; Du, X. Caracterización de la conducción de calor dependiente de la temperatura en hormigón heterogéneo. revista Concr. Res. 2018, 70, 325–339. [Referencia cruzada]
17. Ella, Z.; Wang, K.; Li, P. Elementos poligonales híbridos de Trefftz para problemas de conducción de calor con inclusiones/huecos. Computadora. Matemáticas. Aplica. 2019, 78, 1978–1992. [Referencia cruzada]
18. Marín, M.; Hobiny, A.; Abbas, I. Los efectos de las derivadas de tiempo fraccional en materiales porotermoelásticos utilizando elementos finitos. método. Matemáticas 2021, 9, 1606. [CrossRef]
19. Chen, Y.; Sandhofer, SN; Wong, BM SHORYUKEN: Un paquete de software de código abierto para calcular interacciones de intercambio no local en nanocables. Computadora. Física. Comunitario. 2024, 300, 109197. [Referencia cruzada]
20. Zhou, L.; Zhu, Z.; Que, X. Simulación de conducción de calor no Fourier en materiales heterogéneos discontinuos basada en el método peridinámico. Termia. Ciencia. 2023, 27, 917–931. [Referencia cruzada]
21. Wei, S.; Wang, Z.; Wang, F.; Xie, W.; Chen, P.; Yang, D. Simulación y estudios experimentales de transferencia de calor y masa en granos de maíz durante el secado con aire caliente. Bioproductos alimentarios. Proceso. 2019, 117, 170–182. [Referencia cruzada]
22. Hola, CL; Derecho, CL; Law, MC Simulación de transferencia de calor y masa de granos de cacao en condiciones de secado por pasos en una secadora con bomba de calor. Aplica. Termia. Ing. 2013, 54, 264–271. [Referencia cruzada]
23. Heshmati, MK; Khiavi, HD; Dehghannya, J.; Baghban, H. Simulación 3D de transferencia de impulso, calor y masa en cubos de papa durante el secado intermitente con aire caliente por convección por microondas. Transf. masa calor. 2023, 59, 239–254. [Referencia cruzada]
24. Divin, AG; Karpov, SV Uso de termografía de escaneo de puntos láser para el control de la calidad de productos fabricados con materiales compuestos. Ing. Tecnología. Sistema. 2024, 34, 145–163. [Referencia cruzada]
25. Divin, AG; Ponomarev, SV Aplicación de termografía de escaneo láser y análisis de regresión para determinar características de defectos en materiales compuestos poliméricos. Ruso. J. No destrucción. Prueba. 2024, 60, 40–48. [Referencia cruzada]
26. Nikolaev, AA Modelado matemático en problemas de diagnóstico térmico y previsión de la durabilidad de elementos estructurales compuestos con defectos. Tver: Doctorado. Disentimiento. en Física. y Matemáticas. Sci.: 13.05.18 Modelado Matemático, Métodos Numéricos y Paquetes de Software. 2010, pág. 148. Disponible en línea : https://www.dissercat.com/content/matematicheskoe-modelirovanie-v-zadachakh-teplovoi-diagnostiki-i-prognozirovaniya-dolgovechn (consultado el 5 de julio de 2024). (En ruso)
27. Savatorova, VL; Talonov, AV; Vlasov, AN Homogeneización de procesos de termoelasticidad en materiales compuestos con periodicidad. estructura de heterogeneidades. ZAMM Zeitschrift Angew. Matemáticas. Mec. 2013, 93, 575–596. [Referencia cruzada]
28. Vlasov, AN; Savatorova, VL; Talonov, AV Técnica de promedio asintótico para problemas de conducción de calor con transiciones de fase en medios en capas. J. Aplica. Mec. Tecnología. Física. 1995, 36, 773–780. [Referencia cruzada]
29. Savatorova, VL; Talonov, AV Transferencia de calor en un material compuesto con jerarquía estructural. Compos. Mec. Computadora. Aplica. 2021, 12, 45–59. [Referencia cruzada]
30. Donsì, G.; Ferrari, G.; Nigro, R. Determinación experimental de la conductividad térmica de manzanas y patatas a diferentes niveles de humedad. contenido. J. Ing. de Alimentos. 1996, 30, 263–268. [Referencia cruzada]
31. Muniandy, A.; Beniathiar, P.; Mishra, DK; Ozadali, F. Estimación de propiedades térmicas dinámicas utilizando coeficientes de sensibilidad para proceso de calentamiento rápido. Alimentos 2021, 10, 1954. [CrossRef] [PubMed]
32. Sablani, SS; Rahman, MS Uso de redes neuronales para predecir la conductividad térmica de los alimentos en función del contenido de humedad, temperatura y porosidad aparente. Res. alimentaria. Int. 2003, 36, 617–623. [Referencia cruzada]
33. Carslaw, HS; Jaeger, JC Conducción de calor en sólidos; Clarendon Press: Oxford, Reino Unido, 1984; pag. 532.

Machine Translated by Google

34. Polyanin, AD Manual de ecuaciones diferenciales parciales lineales para ingenieros y científicos; Chapman & Hall/CRC: Boca Ratón, FL, EE.UU., 2002; pag. 735. [Referencia cruzada]
35. Ponomarev, SV; Divin, AG; Ponomareva, ES Modelos matemáticos de campos de temperatura de tubérculos de papa con superficie y Defectos Internos. Adv. Madre. Tecnología. 2017, 4, 65–75. [Referencia cruzada]

Descargo de responsabilidad/Nota del editor: Las declaraciones, opiniones y datos contenidos en todas las publicaciones son únicamente de los autores y contribuyentes individuales y no de MDPI ni de los editores. MDPI y/o los editores renuncian a toda responsabilidad por cualquier daño a personas o propiedad que resulte de cualquier idea, método, instrucción o producto mencionado en el contenido.

Machine Translated by Google

cálculo

MDPI

Artículo

Cuasiinterpolación multinivel en cuadrículas dispersas de Chebyshev

Faisal Al Sharif

Departamento de Matemáticas, Facultad de Ciencias, Universidad de
Taibah, Al-Madinah Al-Munawarah 30002, Arabia Saudita; fsharif@taibahu.edu.sa

Resumen: Este artículo investiga el potencial de utilizar técnicas de cuasi-interpolación multinivel en grillas dispersas de Chebyshev para cálculos numéricos complejos. El artículo comienza estableciendo las motivaciones para elegir las grillas dispersas de Chebyshev y los métodos de cuasi-interpolación con núcleos gaussianos. Se profundiza en los aspectos prácticos de la implementación de estas técnicas. Se realizan varios experimentos numéricos para evaluar la eficiencia y las limitaciones de los métodos de interpolación cuasi dispersa multinivel con dimensiones bidimensionales y tridimensionales. En última instancia, el trabajo tiene como objetivo proporcionar una comprensión integral de la eficiencia y precisión computacional que se pueden lograr mediante este enfoque, comparando su rendimiento con los métodos tradicional

Palabras clave: multinivel; cuasi-interpolación; escaso; Chebyshev; núcleo gaussiano; rejilla sin malla

1. Introducción

Los métodos de interpolación tradicionales, como la interpolación de funciones de base radial o basada en cuadrículas, encuentran dificultades computacionales cuando se trata de conjuntos de datos multidimensionales. La complejidad computacional de estos métodos crece exponencialmente con el número de dimensiones, haciéndolos igualmente inviables en plazos razonables. En consecuencia, se necesitan enfoques novedosos para abordar el desafío de la interpolación en espacios multidimensionales.

La necesidad de soluciones innovadoras ha impulsado el desarrollo de métodos numéricos novedosos que sean capaces de manejar eficientemente datos 2D, 3D o de alta dimensión utilizando computadoras de mayor rendimiento [1,2]. Como resultado, los investigadores han podido realizar avances significativos en los diversos dominios científicos mencionados, permitiendo el desarrollo de soluciones innovadoras a problemas complejos [3].

check for updates

Cita: Alsharif, F. Multinivel
Cuasiinterpolación en cuadrículas dispersas de
Chebyshev. Computación 2024, 12, 149. https://
doi.org/10.3390/ computation12070149

Recibido: 24 de mayo de 2024
Revisado: 25 de junio de 2024
Aceptado: 3 de julio de 2024
Publicado: 18 de julio de 2024

Copyright: © 2024 por el autor.
Licenciatario MDPI, Basilea, Suiza.
Este artículo es un artículo de acceso abierto.
distribuido bajo los términos y
condiciones de los Creative Commons
Licencia de atribución (CC BY)
(https:// creativecommons.org/licenses/by/
4.0/).

2. Técnica de cuadrículas dispersas de Chebyshev

En la literatura, se ha propuesto una técnica de cuadrícula dispersa para superar la maldición de la dimensionalidad con cuadrículas igualmente espaciadas para dominios de dimensiones superiores [4]. Georgoulis et al. [4] propusieron un algoritmo que reduce el requisito de una gran cantidad de puntos de datos en una cuadrícula igualmente espaciada pero mantiene la simplicidad de una estructura de cuadrícula al evaluar el interpolante.
La construcción de una cuadrícula dispersa se define de la siguiente manera.

Defina el índice múltiple ℓ = (l1, . . . , ld) Nd y (i1, . . . , id) Nd como posiciones espaciales.
Defina el punto para esa posición de la siguiente manera:

$$x_{\ell,i} = (x_{l1,i1}, \ldots, x_{ld,id}) \text{ con } x_{l\,j,i\,j} = 2(i_j \cdot 2^{-l_j} - 0.5) \text{ para } j = 1, \ldots, d.$$

Ahora podemos definir la familia de grillas uniformes Gℓ como el siguiente conjunto de puntos:

$$G_\ell = \{x_{\ell,i} : i = (i1, \ldots, id),\ ij = 0, 1, \ldots, j = 1, \ldots, 2^{l_d}\}.$$

El número de puntos Nℓ en Gℓ se da de la siguiente manera:

$$N_\ell = \prod_{j=1}^{d} (2^{l_j} + 1).$$

Machine Translated by Google

Si tenemos ℓ = (n, . . . , n), Gℓ es la cuadrícula completa uniforme de puntos equiespaciados de . El tamaño de la nivel n con distancias entre los puntos dadas por h = 2 −norte cuadrícula Gℓ es N = (2 n + 1) d . Denotamos esta cuadrícula completa como Gn,d . Ahora, consideramos un subconjunto escaso de rejillas completas uniformes, Gn,d , como sigue:

$$\text{Dios} = \bigcup_{|\ell|=n+(d-1)} G\ell, \quad (1)$$

con |ℓ| = l1 + l2 + · · · + ld . Nos referimos a G˜ nd como la cuadrícula dispersa de nivel en la dimensión d. La Figura 1 muestra una representación visual de la cuadrícula dispersa para n = 4 y d = 2. Observe que algunos de los puntos de la cuadrícula están incluidos en más de una subcuadrícula; por lo tanto, existen algunas redundancias.

Figura 1. Cuadrícula dispersa G˜ 4.2.

En una formulación alternativa de la cuadrícula dispersa, existen argumentos de que en lugar de usar una cuadrícula equiespaciada, se pueden usar puntos de Chebyshev para crear cuadrículas en [−1, 1]. Para el índice múltiple ℓ = (l1, . . . , ld) Nd y (i1, . . . , id) Nd , podemos definir

$$\text{cxl}_{j,ij} = -\text{porque}\ \frac{2ij-1}{l\,2\times 2\,j} \quad \text{para } j = 1, \ldots, d$$

para tener el punto x ℓ,i do = (x C ,j1 , . . . , ld , identificación x c). De manera similar, podemos definir a la familia de Chebyshev. cuadrículas de la siguiente manera:

$$\text{GRAMO}^{\text{do}}_{\ell} = \{\text{xc}\ell, \text{yo} \quad j : i = (i1, \ldots, id),\ ij = 0, 1, \ldots, , j = 1, 2l, \ldots, d\},$$

y el escaso subconjunto de cuadrículas de Chebyshev de la siguiente manera:

$$\tilde{G}^{c}_{nd} = \bigcup_{|\ell|=n+(d-1)} \text{GRAMO}^{\text{do}}_{\ell}, \quad (2)$$

donde G˜ c nd se conoce como la cuadrícula dispersa de Chebyshev de nivel n en dimensión d. La Figura 2 muestra una representación visual de la cuadrícula dispersa de Chebyshev para n = 4 y d − 2. Observamos que los puntos de la cuadrícula dispersa no están igualmente espaciados.

Figura 2. Cuadrícula dispersa de Chebyshev G˜ c 4.2.

3. Interpolación cuasi dispersa con núcleos gaussianos

En la formulación anterior de la interpolación usando RBF, observamos que se requiere resolver un sistema de N ecuaciones lineales, donde N es el número total de puntos.
El uso de una cuadrícula dispersa de puntos como se define en la subsección anterior reducirá el número total de puntos y, posteriormente, el número total de ecuaciones para la dimensión superior en comparación con una cuadrícula completa de puntos. Sin embargo, esto no elimina por completo el mal condicionamiento de los problemas. Otro método propuesto en la literatura para evitar resolver el sistema de ecuaciones lineales es utilizar cuasi-interpolación. Existe una amplia discusión sobre las estimaciones de error en cuasiinterpolación en la literatura [5–7].

Machine Translated by Google

Usamos la idea de cuasi-interpolación en la cuadrícula dispersa con funciones de base gaussiana anisotrópica. Si ci,j = |xi+1,j − xi,j |, la distancia entre los puntos xi y xi+1 en la dimensión j para j = 1, . . . , d. Entonces, la matriz diagonal se puede definir de la siguiente manera:

$$A_i = \mathrm{diag}(c_{i1}, 1, \ldots, c_{id}, d),$$

donde i = (i1, . . . , id). Para cada índice múltiple ℓ, ahora podemos definir el cuasi interpolante anisiotrópicamente:

$$Q_\ell f(x) = \sum f(x_{\ell,i})\varphi_c(A_{x_{\ell,i}} G_\ell{}^{-1}_i (x - x_{\ell,i})), \quad x \in \Omega. \tag{3}$$

Aquí, consideramos el núcleo gaussiano.

$$\varphi_c(x) = \exp\left(-\frac{1}{\sqrt{2\pi}c}, 2c^2 x^2\right)$$

donde c determina el grado de suavidad del interpolante.

Para construir el interpolante basado en kernel cuasi disperso en la cuadrícula dispersa $G_{n,d}$, el $\tilde{G}$, los interpoladores anisotrópicos en las subcuadrículas Gℓ deben combinarse linealmente usando la siguiente fórmula:

$$Q_{n,d} f(x) = \sum_{j=0}^{re-1} (-1)^j \binom{re-1}{j} \sum_{=n+(d-1)-j} Q_\ell f(x). \quad |\ell| \tag{4}$$

Por ejemplo, la interpolación basada en kernel casi dispersa para d = 2 sería

$$Q_{n,2} f(x) = \sum_{|\ell|=n+1} Q_\ell f(x) - \sum_{|\ell|=n} Q_\ell f(x),$$

y para d = 3, sería

$$Q_{n,3} f(x) = \sum_{|\ell|=n+2} Q_\ell f(x) - 2\sum_{|\ell|=n+1} Q_\ell f(x) + \sum_{|\ell|=n} Q_\ell f(x).$$

De manera similar, podemos construir la interpolación basada en kernel casi dispersa fórmula para las cuadrículas dispersas basada en puntos de Chebyshev reemplazando las cuadrículas Gℓ con G¢.

4. Interpolación cuasi dispersa multinivel

A partir de la construcción de rejillas dispersas, es obvio que las rejillas dispersas de la parte inferior nivel al nivel superior están anidados; eso es,

$$\tilde{G}_{n,d} \quad \tilde{G}_{norte+1,d}$$

para todo n ≥ 1. Hemos ilustrado esta naturaleza anidada en la Figura 3 para puntos de cuadrícula igualmente espaciados . Para los puntos de Chebysheb, también hemos mostrado la naturaleza anidada de las cuadrículas, que se presenta en la Figura 4. Además, al combinar interpoladores anisotrópicos basados en kernel para cada subcuadrícula, se escalaron adecuadamente, siendo la escala proporcional a la densidad de la subcuadrícula constituyente correspondiente. Se pueden utilizar estas propiedades anidadas de las subcuadrículas para proponer un método de interpolación multinivel con ellas sin agregar ninguna complejidad adicional a la interpolación casi dispersa basada en el núcleo introducida anteriormente. En la literatura anterior [8-10], se utilizaron métodos multinivel para funciones de base radial para combinar interpoladores estacionarios y no estacionarios para acelerar la convergencia y mejorar la estabilidad numérica de problemas mal condicionados.

Machine Translated by Google

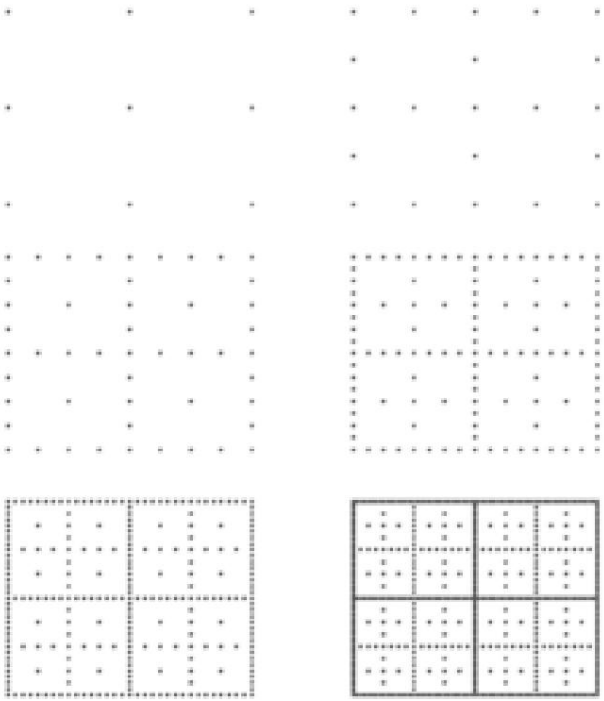


Figura 3. Naturaleza anidada de grillas dispersas $\tilde{G}_{n,2}$ con puntos equidistantes para n = 1, 2, . . . , 6.

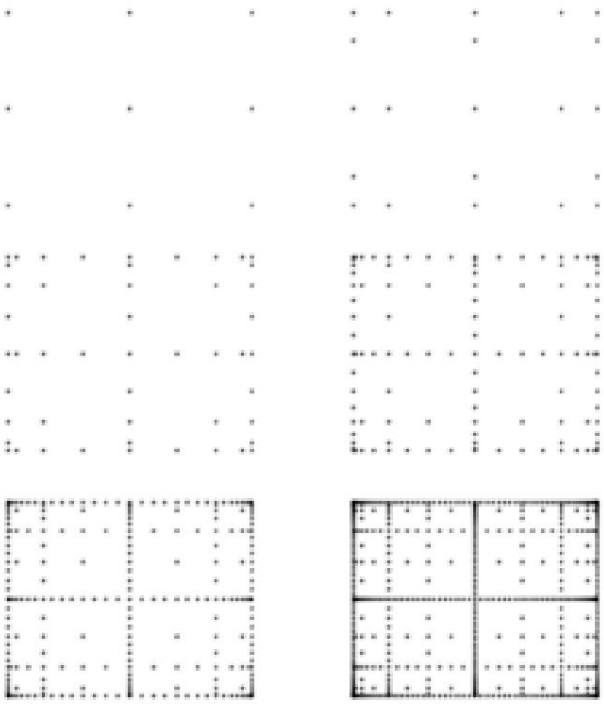


Figura 4. Naturaleza anidada de grillas dispersas $\tilde{G}^{c}_{n,2}$ con puntos de Chebyshev para n = 1, 2, . . . , 6.

La idea principal de la cuasi-interpolación basada en cuadrículas dispersas multinivel es interpolar la función en el nivel más bajo, es decir, para n = 1, y luego actualizar en cada nivel de las subcuadrículas calculando los residuos en cada nivel, interpolando ellos en el nivel superior. Más formalmente, obtenemos la interpolación basada en kernel cuasi dispersa Qn0,d f(x) en el nivel más aproximado 1; es decir, el nivel de aproximación más aproximado es S0,d f(x) = Qn0,du(x). Entonces, definimo

Machine Translated by Google

la función residual en el nivel j como rj(x) = f(x) − Sj−1,d f(x) e interpolar la función residual en el nivel j funcionar como

$$\Delta j(x) = Qn0+j,d\ rj(x)$$

en el nivel n0 + j cuadrícula dispersa G˜ y luego actualice el interpolante multinivel de la siguiente manera: n0+j,d

$$Sj,d\ f(x) = Sj−1,d\ f(x) + \Delta j(x), \text{ para } 1 \le j \le n.$$

Nos referimos a este algoritmo como interpolación basada en kernel cuasi-disperso multinivel. Como la interpolación basada en kernel casi dispersa se utiliza en todos los niveles, la complejidad temporal del método multinivel es lineal con estos niveles. Sin embargo, lleva más tiempo que la interpolación casi escasa habitual para un nivel fijo, ya que evalúa los residuos en cada punto de la cuadrícula. Nuevamente, el algoritmo se adapta fácilmente a la computación paralela.

5. Implementación En

este artículo, todos los algoritmos y experimentos numéricos se implementan en el software MATLAB 23.2. Esto es necesario hacerlo, de lo contrario afectará la publicación. ambiente.
La implementación se divide en tres partes principales: • Crear

cuadrículas dispersas utilizando cuadrículas igualmente espaciadas o puntos de Chebyshev para cada una. nivel de la cuadrícula multinivel;

• Cuasiinterpolación anisotrópica Qℓ f(x) utilizando un núcleo gaussiano; • El

desarrollo de un algoritmo para la interpolación cuasi dispersa, que combina cuasi interpoladores anisotrópicos, como se describió anteriormente.

Para la cuasiinterpolación multinivel, implementamos otra función para aplicar el algoritmo.

Interpolación cuasi dispersa multinivel

El esquema para el algoritmo de interpolación cuasi dispersa multinivel se proporciona en el Algoritmo 1. En la implementación de la interpolación cuasi dispersa multinivel, después de las comprobaciones iniciales y la creación de una cuadrícula dispersa de puntos, si es necesario, calculamos la aproximación de cuasi-interpolación usando la función QSIK para el nivel n = 1. Para todos los demás niveles i > 1, evaluamos la aproximación de interpolación cuasi-dispersa en todos los puntos dispersos de la cuadrícula y luego la restamos del valor de la función original para calcular la función residual y luego calcule nuevamente la aproximación cuasi dispersa para la función residual en el nivel i y agregue esa estimación a la aproximación de la función, donde ya tenemos hasta el nivel i. Continuamos calculando las funciones residuales y actualizando nuestra aproximación en cada nivel hasta alcanzar el nivel máximo de evaluación n . Esta aproximación multinivel devuelve las aproximaciones de funciones en todos los niveles 1 ≤ i ≤ n. Aunque requiere muchas aproximaciones de interpolación casi dispersas en todos los niveles, podemos reducir el tiempo de cálculo calculando las aproximaciones de funciones en todos los niveles juntas en lugar de llamar a la función por separado para cada nivel.

Algoritmo 1: Interpolación cuasi dispersa multinivel Datos del algoritmo:

Descomposición de datos de cuadrícula

dispersa Resultado: Interpolación cuasi dispersa multinivel Sn,d f(x).

1: Inicialice el primer valor de interpolación en cero, es decir S0,d f(x) = 0.; 2. Construya las grillas dispersas anidadas como G˜ j,d G˜ j+1,d .; 3. para j = 1, . . . , n do Calcularrj(x)

= f(x) − Sj−1,d f(x) para todo x G˜ j,d ; Calcule Δj(x) = Qj,d rj(x) usando el algoritmo descrito en la Sección 4; Actualización Sj,d f(x) = Sj−1,d f(x) + Δj(x).

fin

Machine Translated by Google

6. Experimentos numéricos para interpolación cuasi dispersa con d = 2

Ahora ilustramos el rendimiento de la interposición propuesta basada en kernel cuasi disperso. lación para las siguientes funciones de prueba:

2d • F 1 (x, y) (función de Franke)

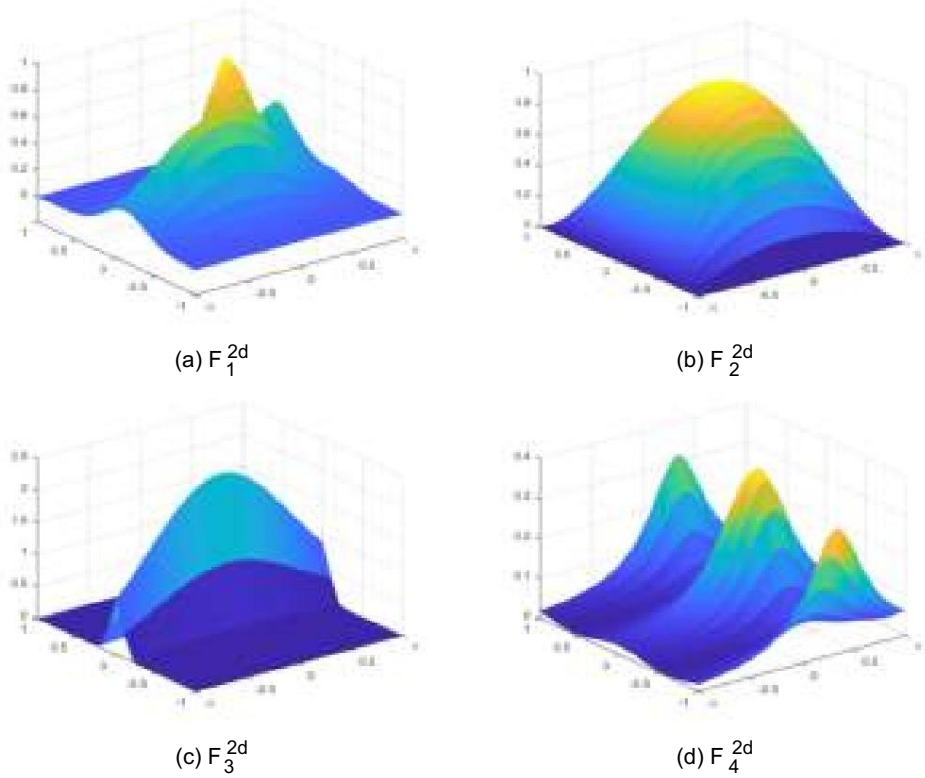
$$F_1^{2d}(x, y) = 0.75e^{-((9x-2)^2+(9y-2)^2+0.5e^{-}} + 0.75e^{-(9x+1)^2/49-(9y+1)^2/10} - 0.2e^{-((9x-4)^2+(9y-7)^2)}$$

2d • F 2 $(x, y) = (1 - x^2)(1 - y^2)$.

2d • F 3 $(x, y) = \frac{18}{\pi}(x^2+81y^2)$.

2d • F 4 $(x, y) = \frac{1,25+\cos(5,4y)}{6+6(3x-1)^2}$.

La función de Franke se utiliza muy comúnmente como función de prueba en la literatura sobre interpolación con núcleos RBF [11]. Los demás se pueden encontrar en [12-14], respectivamente. Estas funciones de prueba se ilustran en la Figura 5.



(a) F_1^{2d} (b) F_2^{2d}

(c) F_3^{2d} (d) F_4^{2d}

Figura 5. Funciones de prueba en dos dimensiones.

En todos estos experimentos numéricos, hemos utilizado una cuadrícula uniforme de puntos de 50 × 50 en el rectángulo [−1, 1] × [−1, 1]. El error de aproximación se informa como el error de módulo máximo; es decir, $\|f - Q_{n,d} f\|_\infty$, y la raíz del error cuadrático medio se define de la siguiente manera:

$$\sqrt{\frac{1}{Nei}\sum_{i=1}^{Nei}(f(xi) - Q_{n,d} f(xi))^2},$$

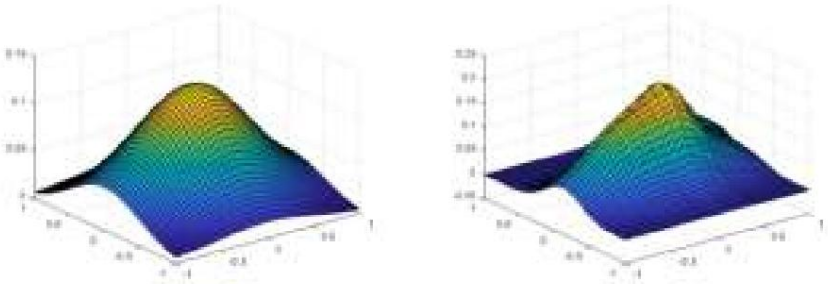
donde xi i = 1, . . . , Ne son los puntos de evaluación y Ne es el número total de puntos de evaluación. También informamos el número de puntos en la cuadrícula dispersa $\tilde{G}_{n,d}$ (o $\tilde{G}_c$ el) como SGnode y n,d número de puntos realmente utilizados en el cálculo, ya que algunos de los puntos se revisan en los cálculos de la cuadrícula dispersa como DoF.

Machine Translated by Google

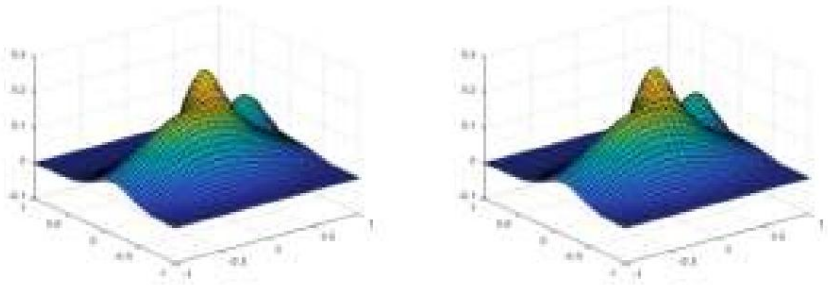
La Figura 6 muestra la aproximación utilizando nuestra propuesta basada en kernel cuasi disperso. interpolación con una cuadrícula equiespaciada $\tilde{G}_{n,2}$ para diferentes valores de n. La tabla 1 también muestra las estimaciones de error. Observamos que el error máximo o error RMS no disminuye sustancialmente a medida que aumentamos el nivel n de la cuadrícula dispersa, pero los gráficos muestran que las aproximaciones están muy cerca de la verdadera función F_1^{2d} para n > 6. Con los puntos de Chebyshev, observamos mucho mejores aproximaciones con el error máximo y el error RMS disminuyendo con el aumento en el nivel n. Los gráficos de la función de interpolación evaluados en la cuadrícula de 50 × 50. Los puntos para el algoritmo con puntos de Chebyshev se muestran en la Figura 7. Nuevamente, observamos que las aproximaciones son bastante buenas para n > 6.

Tabla 1. Interpolación cuasi dispersa con un núcleo gaussiano utilizando cuadrículas igualmente espaciadas y Chebyshev resultados de la cuadrícula de puntos para la función de prueba F_1^{2d}.

DoF de nodos SG		Igual			Chebyshev		
		máx. Error	RMS Error	Tiempo	máx. Error	RMS Error	Tiempo
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



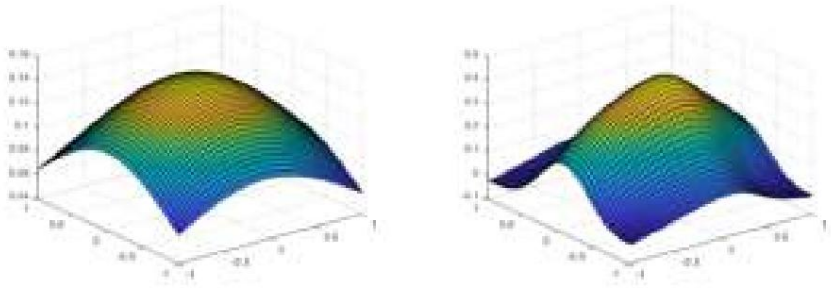
(a) norte = 1 (b) norte = 4



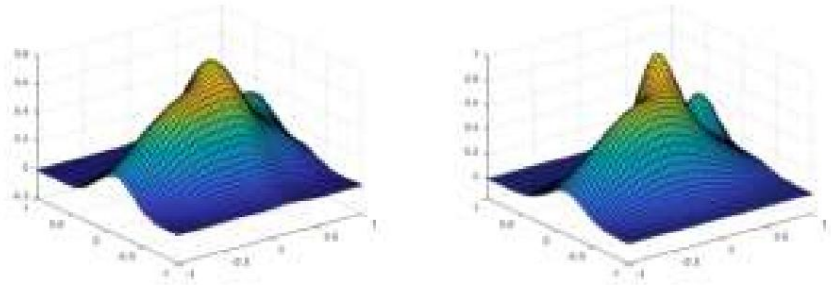
(c) norte = 7 (d) norte = 10

Figura 6. Aproximaciones utilizando una cuadrícula dispersa equiespaciada con nivel n y un núcleo gaussiano para la función de prueba F_1^{2d}.

Machine Translated by Google



(a) norte = 1 (b) norte = 4



(c) norte = 7 (d) norte = 10

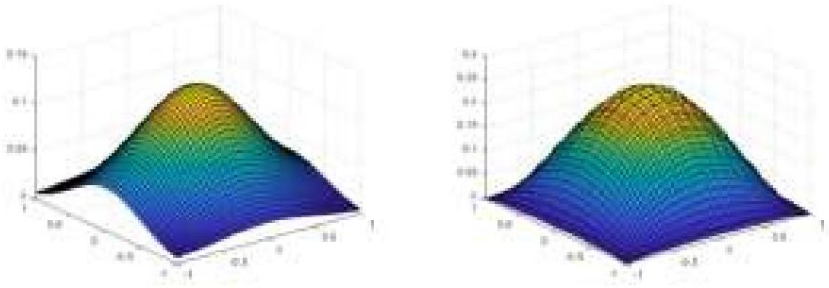
Figura 7. Aproximaciones utilizando grillas dispersas de Chebyshev con nivel n y un núcleo gaussiano para el función de prueba F_1^{2d}.

La Figura 8 muestra las aproximaciones utilizando nuestra propuesta basada en kernel cuasi disperso. interpolación con rejillas equiespaciadas $\tilde{G}_{n,2}$ para diferentes valores de n para la función de prueba $F_2^{2d}(x, y)$. La Tabla 2 también muestra las estimaciones de error. Observamos que el error máximo o el error RMS no disminuye sustancialmente a medida que aumentamos el nivel de cuadrícula n, pero los gráficos muestran que las aproximaciones están muy cerca de la función verdadera F_2^{2d} para norte > 2 cuando utilizamos rejillas equiespaciadas. Con los puntos de Chebyshev observamos mucho mejor. aproximaciones, donde tanto el error máximo como el error RMS disminuyen con el nivel norte. Los gráficos de la función de interpolación evaluados en 50 × 50 puntos de cuadrícula para el algoritmo. con puntos de Chebyshev se muestran en la Figura 9. Para n = 1, las aproximaciones son pobres, pero se aproxima muy bien a medida que n aumenta. Por otro lado, cuando hay equidistantes cuadrículas, el interpolador comienza a sobreajustarse a la superficie y carece de suavidad para valores más grandes de norte. Por lo tanto, al aumentar el número de niveles de la cuadrícula, la aproximación en realidad se deteriora. para rejillas equiespaciadas.

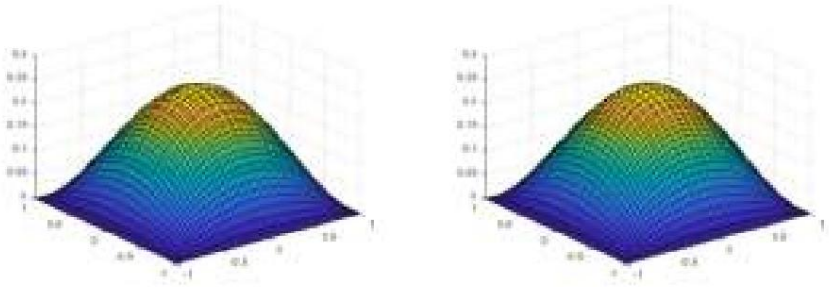
Tabla 2. Interpolación cuasi dispersa con un núcleo gaussiano utilizando cuadrículas igualmente espaciadas y Chebyshev resultados de la cuadrícula de puntos para la función de prueba F_2^{2d}.

DoF de nodos SG		Igual			Chebyshev		
		máx. Error	RM SError	Tiempo	máx. Error	RMS Error	Tiempo
		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

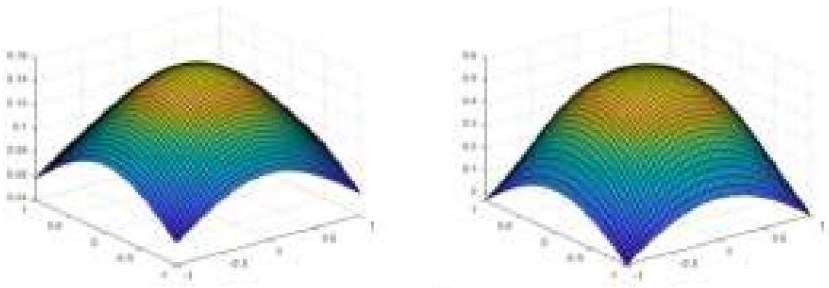


(a) norte = 1 (b) norte = 4

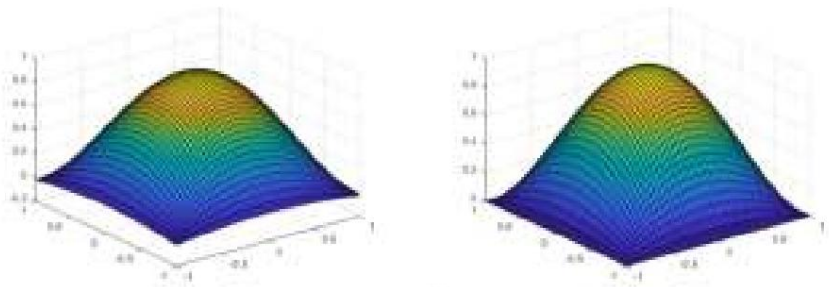


(c) norte = 7 (d) norte = 10

Figura 8. Aproximaciones utilizando una cuadrícula dispersa equiespaciada con nivel n y un núcleo gaussiano para 2d la función de prueba F_2 .



(a) norte = 1 (b) norte = 4



(c) norte = 7 (d) norte = 10

Figura 9. Aproximaciones utilizando una grilla dispersa de Chebyshev con nivel n y un núcleo gaussiano para la función de prueba 2d F_2 .

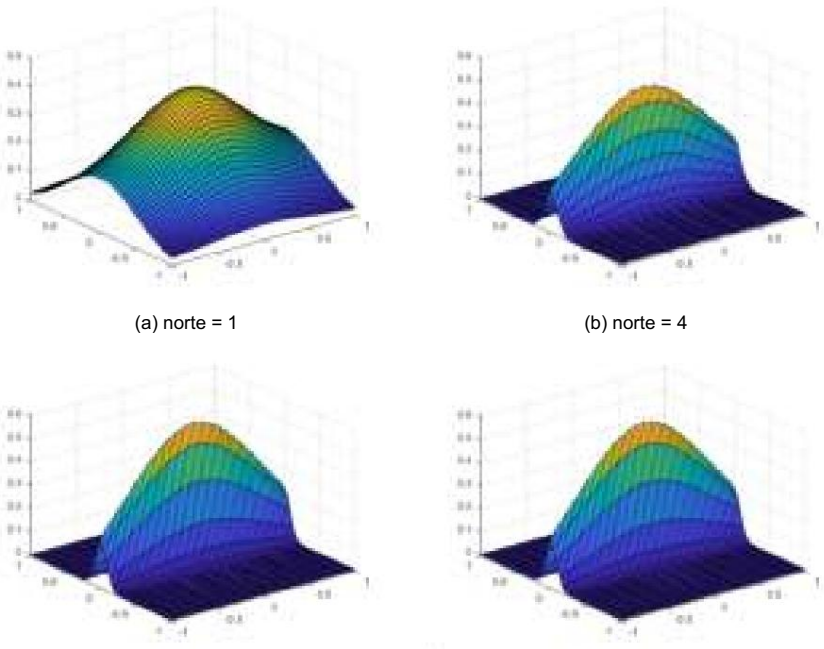
La Figura 10 muestra las aproximaciones utilizando nuestra propuesta basada en kernel cuasi disperso para diferentes valores de n para la función de prueba n,2 interpolación con rejillas equiespaciadas $\tilde{G}$ $F_3^{2d}(x, y)$. La Tabla 3 muestra las estimaciones de error. Observamos que el error máximo o el error RMS no disminuye sustancialmente a medida que aumentamos el nivel de cuadrícula n, pero los gráficos muestran que las aproximaciones están muy cerca de la función verdadera F_3^{2d} para n > 4 cuando usamos cuadrículas equiespaciadas. Con los puntos de Chebyshev, observamos aproximaciones mucho mejores, con

Machine Translated by Google

tanto el error máximo como el error RMS disminuyen con el nivel n. Las tramas de la función de interpolación evaluada en 50 × 50 puntos de cuadrícula para el algoritmo con Chebyshev Los puntos se muestran en la Figura 11. Para n = 1, las aproximaciones son pobres y el resultado general La forma no es similar a la forma de la función, pero se aproxima muy bien a medida que n aumenta. Por otro lado, cuando hay cuadrículas equiespaciadas, el interpolante comienza a sobreajustar las superficie y carece de suavidad para valores mayores de n. Por lo tanto, al aumentar el número de cuadrículas niveles, la aproximación en realidad se deteriora para cuadrículas igualmente espaciadas.

Tabla 3. Interpolación cuasi dispersa con un núcleo gaussiano utilizando cuadrículas igualmente espaciadas y Chebyshev resultados de la cuadrícula de puntos para la función de prueba F_3^{2d}.

DoF de nodos SG		Igual			Chebyshev		
		máx. Error	RMS Error	Tiempo	máx. Error	RMS Error	Tiempo
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

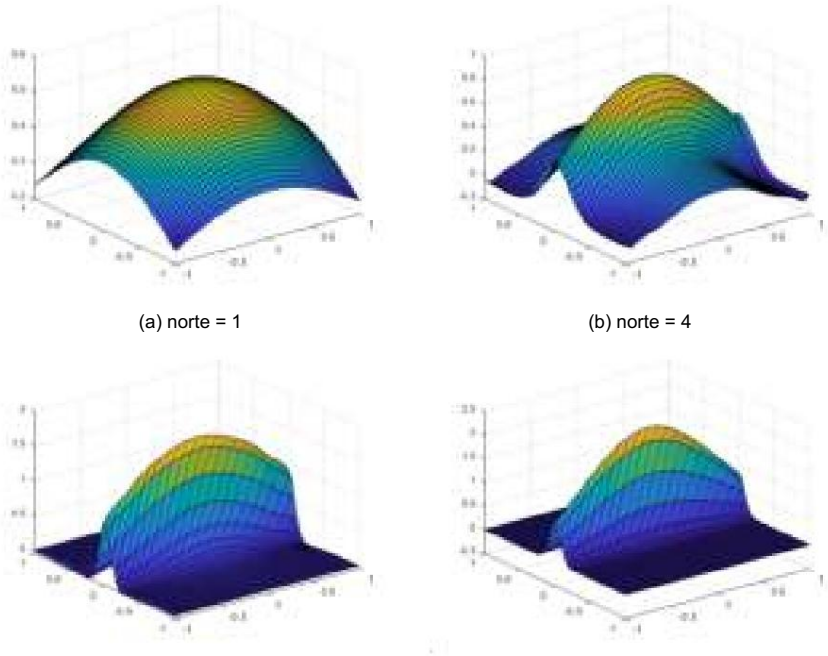


(a) norte = 1 (b) norte = 4

(c) norte = 7 (d) norte = 10

Figura 10. Aproximaciones utilizando una cuadrícula dispersa equiespaciada con nivel n y un núcleo gaussiano para la función de prueba F_3^{2d}.

Machine Translated by Google



(a) norte = 1 (b) norte = 4

(c) norte = 7 (d) norte = 10

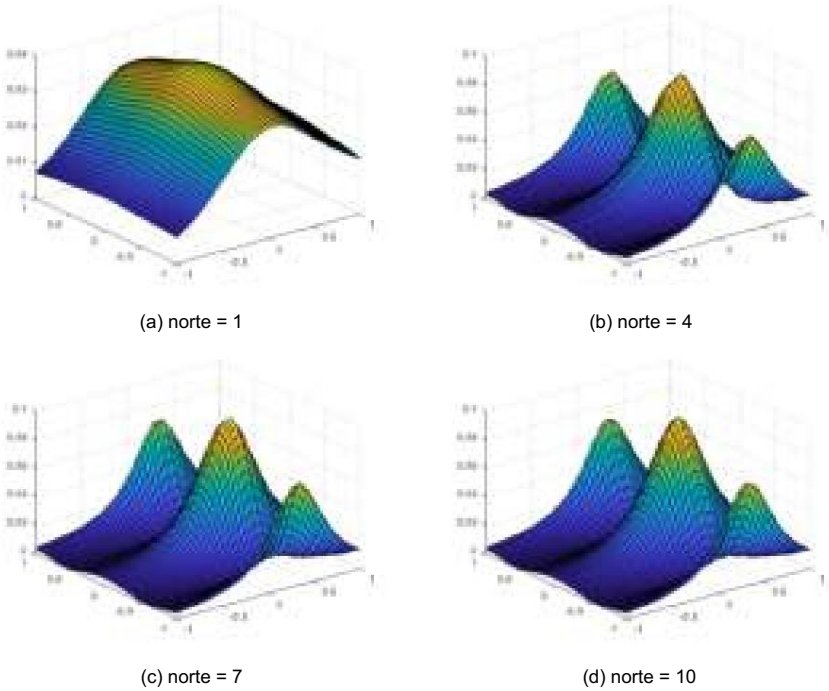
Figura 11. Aproximaciones utilizando una grilla dispersa de Chebyshev con nivel n y un kernel gaussiano para el función de prueba F_3^{2d}.

La Figura 12 muestra las aproximaciones utilizando nuestra propuesta basada en kernel cuasi disperso. interpolación con rejillas equiespaciadas $\tilde{G}_{n,2}$ para diferentes valores de n para la función de prueba $F_4^{2d}(x, y)$. La Tabla 4 muestra las estimaciones de error. Observamos que el error máximo o el El error RMS no disminuye sustancialmente a medida que aumentamos el nivel de la cuadrícula n, pero los gráficos muestran que las aproximaciones están muy cerca de la función verdadera F_4^{2d} para n > 4 cuando usamos igualmente rejillas espaciadas. Con los puntos de Chebyshev, observamos aproximaciones mucho mejores, con tanto el error máximo como el error RMS disminuyen con el nivel n. Las tramas de la función de interpolación evaluada en 50 × 50 puntos de cuadrícula para el algoritmo con Chebyshev Los puntos se muestran en la Figura 13. Para n = 2, las aproximaciones son pobres y el resultado general La forma no es similar a la forma de la función, pero se aproxima muy bien a medida que n aumenta.

Tabla 4. Interpolación cuasi dispersa con un núcleo gaussiano utilizando cuadrículas igualmente espaciadas y Chebyshev resultados de la cuadrícula de puntos para la función de prueba F_4^{2d}.

DoF de nodos SG		Igual			Chebyshev		
		máx. Error	RMS Error	Tiempo	máx. Error	RMS Error	Tiempo
	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

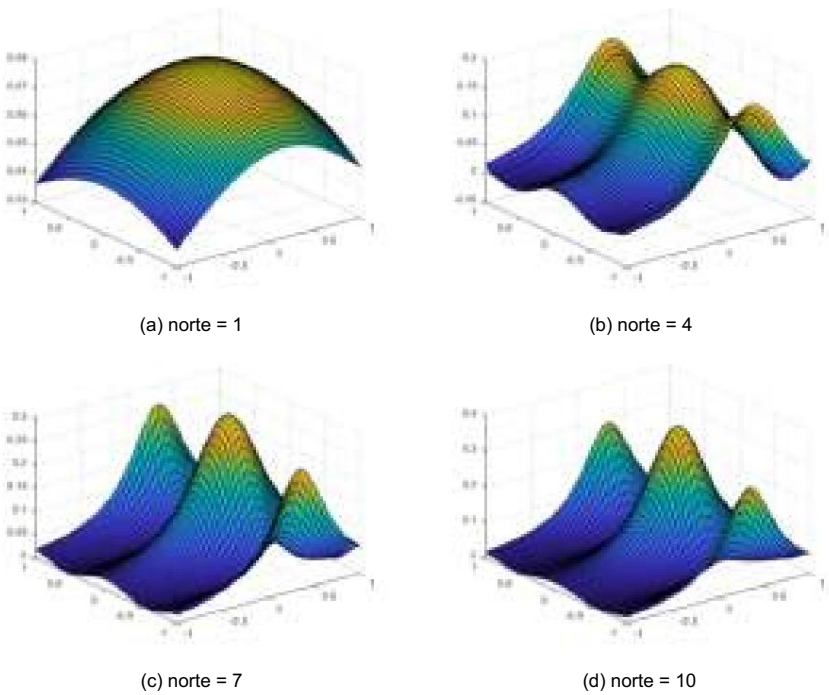
Machine Translated by Google



(a) norte = 1 (b) norte = 4

(c) norte = 7 (d) norte = 10

Figura 12. Aproximaciones utilizando una cuadrícula dispersa equiespaciada con nivel n y un núcleo gaussiano 2d para la función de prueba F 4 .



(a) norte = 1 (b) norte = 4

(c) norte = 7 (d) norte = 10

Figura 13. Aproximaciones utilizando una cuadrícula dispersa de Chebyshev con nivel n y un núcleo gaussiano para la función de prueba 2d F 4 .

En estos resultados, la interpolación cuasi dispersa con cuadrículas igualmente espaciales alcanza un error absoluto máximo estable y errores cuadráticos medios en un nivel inferior con una pequeña cantidad de puntos de cuadrícula dispersos. Sin embargo, la interpolación casi dispersa con puntos de Chebyshev alcanza valores mucho más pequeños para errores máximos y errores RMS para todas las funciones de prueba y se estabiliza para valores mayores del nivel n. Además, dado que los errores permanecen estables cuando aumenta el número de puntos de la cuadrícula, la interpolación casi dispersa va bien con

Machine Translated by Google

el algoritmo cuasi-disperso multinivel, que se examinará en una subsección posterior. La principal observación de estos resultados es que la interpolación cuasi dispersa no converge para cuadrículas igualmente espaciadas, pero converge para puntos de la cuadrícula de Chebyshev. la tasa de la convergencia depende de la función de prueba.

7. Experimentos numéricos para interpolaciones cuasi dispersas con d = 3

En esta sección, presentamos el análisis de rendimiento para algunas funciones de prueba con dominio $\Omega = [-1, 1]^3$ en dimensión d = 3. Las siguientes funciones se utilizan como prueba funciones:

- $F_1^{3d}(x, y)$ (función de Franke)

$$F_1^{3d}(x, y) = 0.75e^{-((9x-2)^2+(9y-2)^2+(9z-2)^2)/4} + 0.75e^{-(9x+1)^2/49-(9y+1)^2/10-(9z+1)^2/10} + 0.5e^{-((9x-7)^2+(9y-3)^2+(9z-5)^2)/4} - 0.2e^{-((9x-4)^2+(9y-7)^2+(9z-5)^2)}.$$

- $F_2^{3d}(x, y) = (1 - x^2)(1 - y^2)(1 - z^2)$.
- $F_3^{3d}(x, y) = \frac{18}{\pi^{mi}} e^{-(x^2+81y^2+z^2)}$.
- $F_4^{3d}(x, y) = \cos(6z)\frac{1,25+\cos(5,4y)}{6+6(3x-1)^2}$.

El rendimiento de nuestro interpolante basado en kernel casi disperso se evalúa en una cuadrícula de 20 × 20 × 20 puntos equidistantes en el cubo $[-1, 1]^3$. Los resultados se resumen en Tablas 5 a 8. Debido al largo tiempo de computación y a la falta de disponibilidad de una computación paralela entorno, evaluamos sólo n = 7 niveles para el algoritmo multinivel. Los resultados son similar a nuestra observación para los experimentos numéricos en d = 2 ya que no observamos cualquier convergencia de la interpolación casi dispersa con cuadrículas igualmente espaciadas, pero la las aproximaciones convergen para los puntos de Chebyshev en todas las funciones de prueba.

Tabla 5. Interpolación cuasi dispersa con un núcleo gaussiano utilizando cuadrículas igualmente espaciadas y Chebyshev resultados de la cuadrícula de puntos para la función de prueba F_1^{3d}.

DoF de nodos SG		Igual			Chebyshev		
		máx. Error	RMS Error	Tiempo	máx. Error	RMS Error	Tiempo
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

Tabla 6. Interpolación cuasi dispersa con un núcleo gaussiano utilizando cuadrículas igualmente espaciadas y Chebyshev resultados de la cuadrícula de puntos para la función de prueba F_2^{3d}.

DoF de nodos SG		Igual			Chebyshev		
		máx. Error	RMS Error	Tiempo	máx. Error	RMS Error	Tiempo
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

Tabla 7. Interpolación cuasi dispersa con un núcleo gaussiano utilizando cuadrículas igualmente espaciadas y Chebyshev resultados de la cuadrícula de puntos para la función de prueba F_3^{3d}.

DoF de nodos SG		Igual			Chebyshev		
		máx. Error	RMS Error	Tiempo	máx. Error	RMS Error	Tiempo
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

Tabla 8. Interpolación cuasi dispersa con un núcleo gaussiano utilizando cuadrículas igualmente espaciadas y Chebyshev resultados de la cuadrícula de puntos para la función de prueba F_4^{3d}.

DoF de nodos SG		Igual			Chebyshev		
		máx. Error	RMS Error	Tiempo	máx. Error	RMS Error	Tiempo
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. Experimentos numéricos para la interpolación cuasi dispersa multinivel

En esta sección, ilustramos el rendimiento de nuestra propuesta cuasi-escasa multinivel. método de interpolación kernel b-sed para las mismas funciones de prueba, $F_{1,2,3,4}^{2d}$, F^{2d} y f^{2d} como introducido anteriormente. Evaluamos las interpolaciones en una cuadrícula de 50 × 50 puntos en el rectángulo. [-1, 1] × [-1, 1]. Los resultados se muestran en las tablas 9 a 12 para las funciones de prueba en d = 2. Algunos Algunas de las funciones aproximadas también se representan en las figuras 14 a 21. Para ambos igualmente espaciados cuadrículas dispersas y cuadrículas dispersas basadas en puntos de Chebyshev, observamos que el máximo El error y el error cuadrático medio disminuyen con el aumento del nivel n. El multinivel Los resultados de interpolación casi dispersos son aún mejores con puntos de Chebyshev en lugar de puntos igualmente rejillas espaciadas.

Tabla 9. Interpolación cuasi dispersa multinivel con un núcleo gaussiano utilizando cuadrículas igualmente espaciadas y Resultados de la cuadrícula de Chebyshev para la función de prueba F_1^{2d}.

DoF de nodos SG		Igual			Chebyshev		
		máx. Error	RMS Error	Tiempo	máx. Error	RMS Error	Tiempo
		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

Tabla 10. Interpolación cuasi dispersa multinivel con un núcleo gaussiano utilizando cuadrículas equiespaciadas y resultados de la cuadrícula de Chebyshev para la función de prueba F_2^{2d}.

DoF de nodos SG		Igual			Chebyshev		
		máx. Error	RMS Error	Tiempo	máx. Error	RMS Error	Tiempo
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

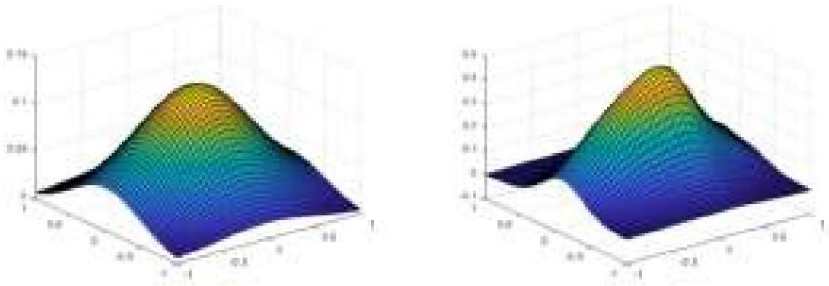
Tabla 11. Interpolación cuasi dispersa multinivel con un núcleo gaussiano utilizando cuadrículas igualmente espaciadas y resultados de la cuadrícula de Chebyshev para la función de prueba F_3^{2d}.

DoF de nodos SG		Igual			Chebyshev		
		máx. Error	RMS Error	Tiempo	máx. Error	RMS Error	Tiempo
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

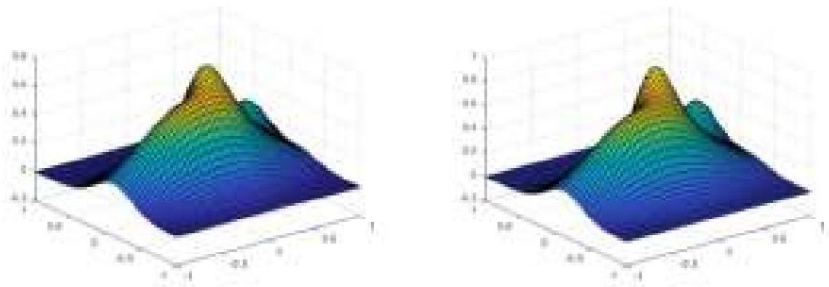
Tabla 12. Interpolación cuasi dispersa multinivel con un núcleo gaussiano utilizando cuadrículas igualmente espaciadas y resultados de la cuadrícula de Chebyshev para la función de prueba F_4^{2d}.

DoF de nodos SG		Igual			Chebyshev		
		máx. Error	RMS Error	Tiempo	máx. Error	RMS Error	Tiempo
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

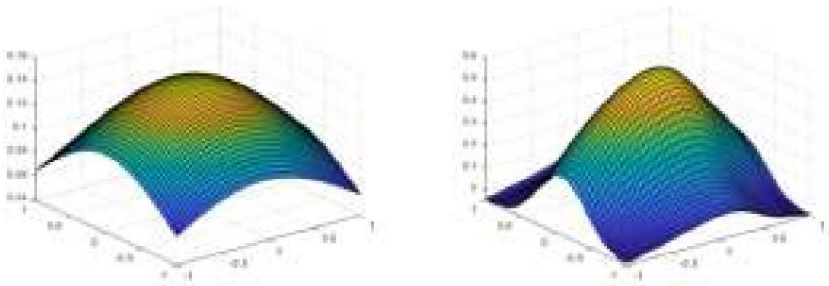


(a) norte = 1 (b) norte = 4

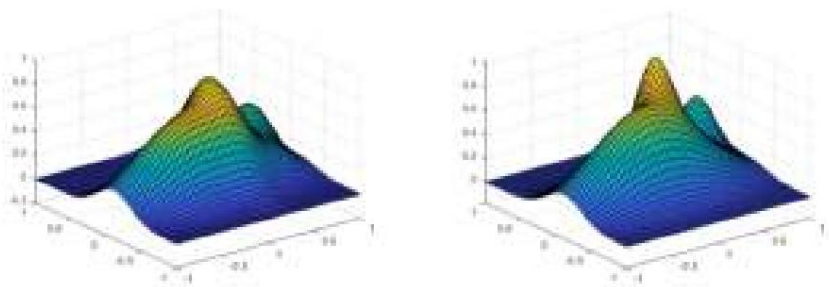


(c) norte = 7 (d) norte = 10

Figura 14. Aproximaciones cuasi-dispersas multinivel utilizando una cuadrícula equiespaciada con nivel n y un núcleo gaussiano 2d para la función de prueba F 1 .



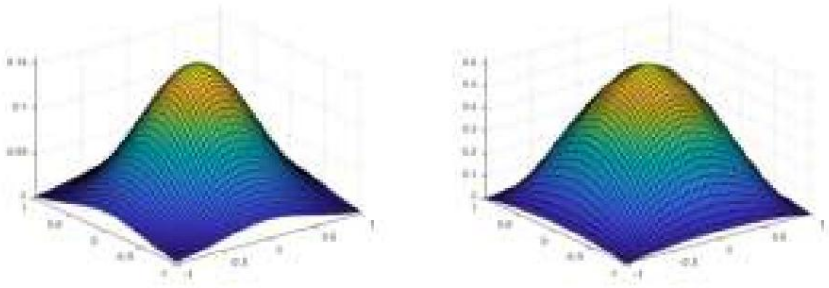
(a) norte = 1 (b) norte = 4



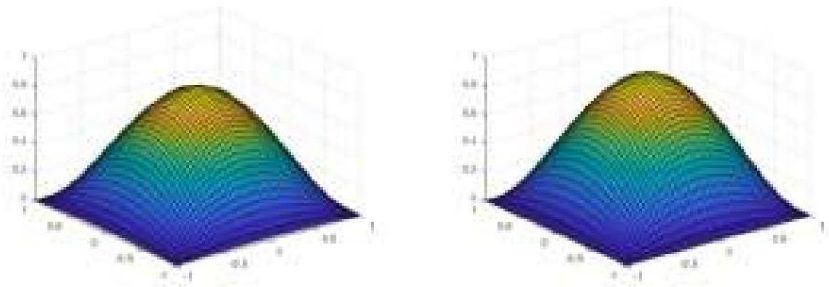
(c) norte = 7 (d) norte = 10

Figura 15. Aproximaciones cuasi-dispersas multinivel utilizando una grilla de Chebyshev con nivel n y un núcleo gaussiano 2d para la función de prueba F 1 .

Machine Translated by Google

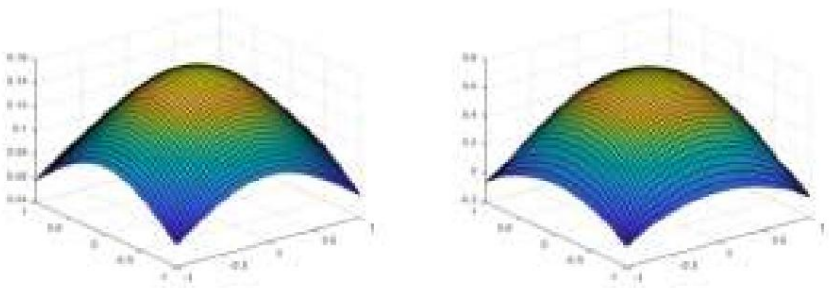


(a) norte = 1 (b) norte = 4

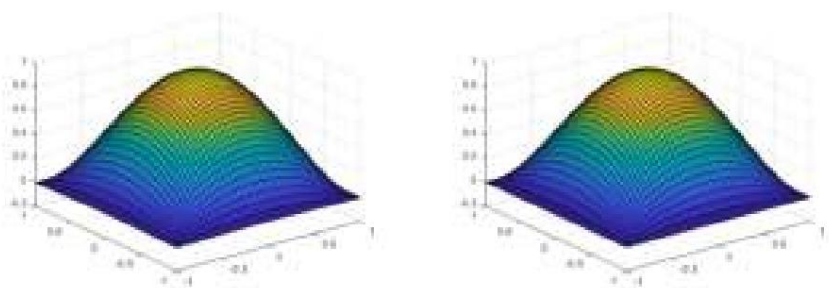


(c) norte = 7 (d) norte = 10

Figura 16. Aproximaciones cuasi-dispersas multinivel utilizando una cuadrícula equiespaciada con nivel n y un núcleo gaussiano 2d para la función de prueba F 2 .



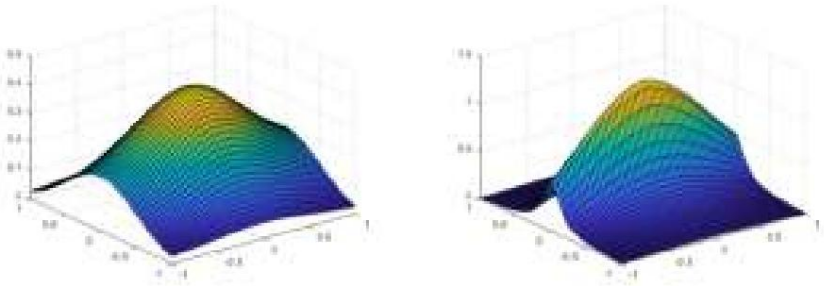
(a) norte = 1 (b) norte = 4



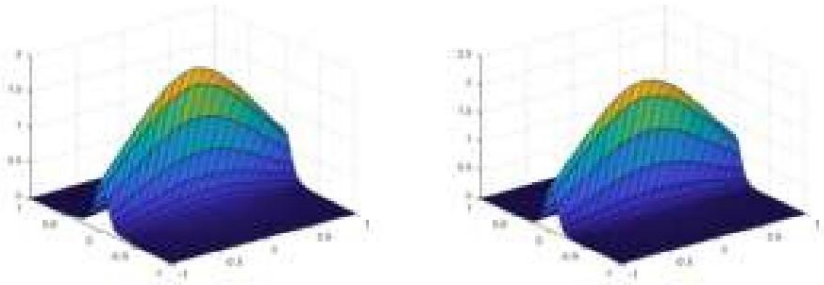
(c) norte = 7 (d) norte = 10

Figura 17. Aproximaciones cuasi-dispersas multinivel utilizando una grilla de Chebyshev con nivel n y un núcleo gaussiano 2d para la función de prueba F 2 .

Machine Translated by Google

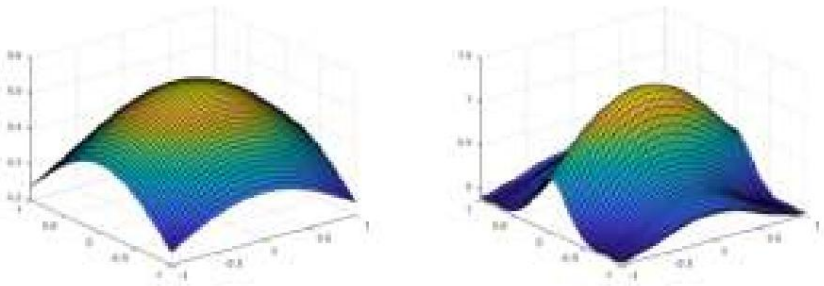


(a) norte = 1 (b) norte = 4

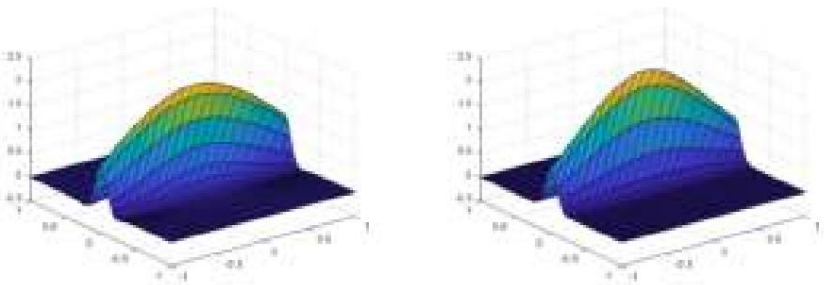


(c) norte = 7 (d) norte = 10

Figura 18. Aproximaciones cuasi-dispersas multinivel utilizando una cuadrícula equiespaciada con nivel n y un núcleo gaussiano 2d para la función de prueba F 3 .



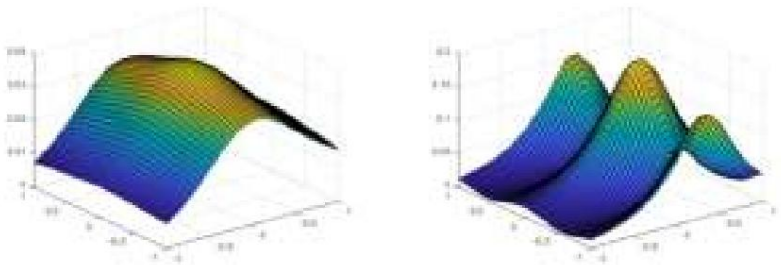
(a) norte = 1 (b) norte = 4



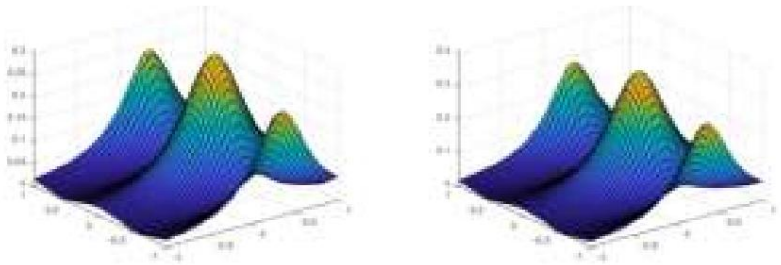
(c) norte = 7 (d) norte = 10

Figura 19. Aproximaciones cuasi-dispersas multinivel utilizando una grilla de Chebyshev con nivel n y un núcleo gaussiano 2d para la función de prueba F 3 .

Machine Translated by Google

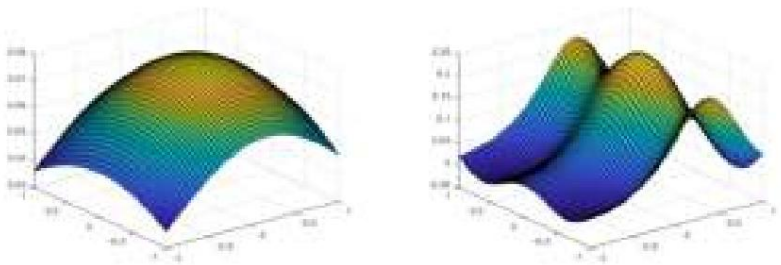


(a) norte = 1 (b) norte = 4

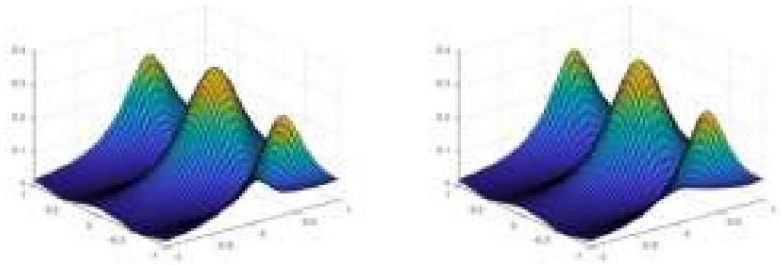


(c) norte = 7 (d) norte = 10

Figura 20. Aproximaciones cuasi-dispersas multinivel utilizando una cuadrícula equiespaciada con nivel n y un núcleo gaussiano 2d para la función de prueba F 4 .



(a) norte = 1 (b) norte = 4



(c) norte = 7 (d) norte = 10

Figura 21. Aproximaciones cuasi-dispersas multinivel utilizando una grilla de Chebyshev con nivel n y un núcleo gaussiano 2d para la función de prueba F 4 .

A continuación, ilustramos la aplicación de nuestra interpolación cuasi dispersa multinivel con 3d 3d 3d FF y F en la dimensión d = 3, como se introdujo anteriormente en 2 , 3 , 4 . un núcleo gaussiano para las funciones de prueba F 1 , Para d = 3, evaluamos la interpolación multinivel usando una cuadrícula de $20 \times 20 \times 20$ puntos en el cubo [−1, 1] error absoluto máximo y errores cuadráticos medios para el interpolante propuesto para niveles hasta n = 7. Nuevamente , observamos que los errores disminuyen con el nivel n para el procedimiento multinivel tanto 3 . Las tablas 13 a 16 muestran las estimaciones de error con para cuadrículas equiespaciadas como para puntos de Chebyshev. Sin embargo, los errores son mucho menores en los puntos de Chebyshev en niveles superiores.

Machine Translated by Google

Tabla 13. Interpolación cuasi dispersa multinivel con un núcleo gaussiano utilizando cuadrículas igualmente espaciadas y resultados de la cuadrícula de Chebyshev para la función de prueba F_1^{3d}.

DoF de nodos SG		Igual			Chebyshev		
		máx. Error	RMS Error	Tiempo	máx. Error	RMS Error	Tiempo
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

Tabla 14. Interpolación cuasi dispersa multinivel con un núcleo gaussiano utilizando cuadrículas igualmente espaciadas y resultados de las cuadrículas de Chebyshev para la función de prueba F_2^{3d}.

DoF de nodos SG		Igual			Chebyshev		
		máx. Error	RMS Error	Tiempo	máx. Error	RMS Error	Tiempo
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

Tabla 15. Interpolación cuasi dispersa multinivel con un núcleo gaussiano utilizando cuadrículas igualmente espaciadas y resultados de la cuadrícula de Chebyshev para la función de prueba F_3^{3d}.

DoF de nodos SG		Igual			Chebyshev		
		máx. Error	RMS Error	Tiempo	máx. Error	RMS Error	Tiempo
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

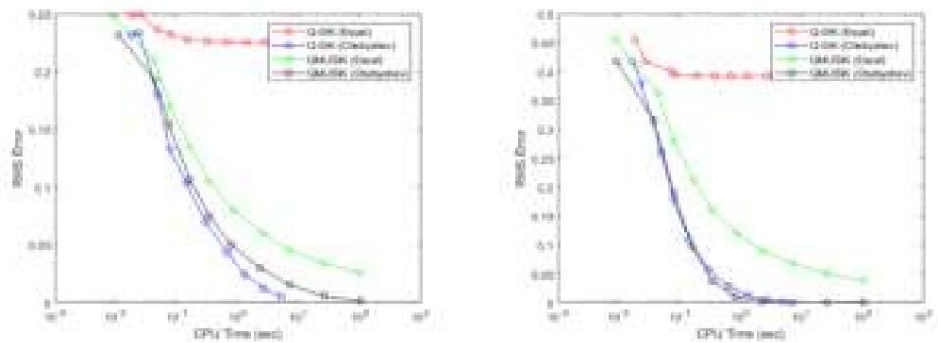
Tabla 16. Interpolación cuasi dispersa multinivel con un núcleo gaussiano utilizando cuadrículas igualmente espaciadas y resultados de la cuadrícula de Chebyshev para la función de prueba F_4^{3d}.

DoF de nodos SG		Igual			Chebyshev		
		máx. Error	RMS error	Tiempo	máx. Error	RMS Error	Tiempo
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. Convergencia con el tiempo de cálculo

En la Figura 22, el error cuadrático medio (RMS) se representa frente al tiempo de cálculo para las mismas funciones de prueba en d = 2, y en la Figura 23 se representan gráficos similares del error RMS frente al tiempo para las funciones de prueba en d = 3 . Estas figuras muestran que la interpolación casi dispersa con cuadrículas igualmente espaciadas no converge por error a medida que aumenta el tiempo de cálculo. Por otro lado, los errores disminuyen bastante rápido y convergen para una interpolación casi dispersa con puntos de Chebyshev. La interpolación cuasi dispersa de varios niveles con una cuadrícula equiespaciada mejora los errores de aproximación y muestra cierta convergencia. Aún así, los puntos de Chebyshev presentan resultados de convergencia mucho mejores que los puntos igualmente espaciados. También es interesante observar que, en un tiempo de cálculo similar (en segundos), la interpolación casi dispersa con puntos de Chebyshev produce mejores resultados que el método multinivel, aunque los métodos multinivel se ejecutan sólo en un número menor de niveles en un tiempo comparable.



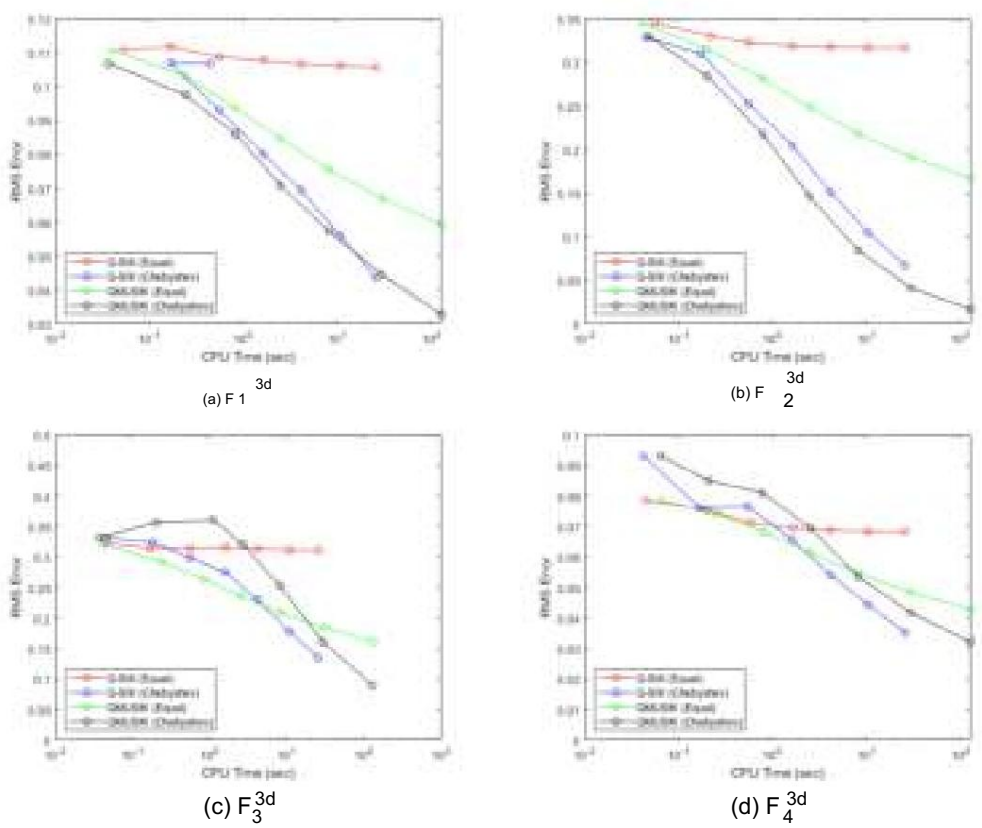
(a) F_1^{2d} (b) F_2^{2d}

(c) F_3^{2d} (d) F_4^{2d}

Figura 22. Error RMS frente al tiempo de cálculo de las funciones de prueba en d = 2.

La Figura 23 muestra el error RMS en aproximación frente al tiempo de cálculo (en segundos) para las funciones de prueba en la dimensión d = 3. Aquí, no observamos la convergencia en ninguno de los algoritmos, excepto en los puntos equidistantes con interpolación cuasi dispersa. muestran una tendencia decreciente en los errores con el tiempo de cálculo. Aquí, también se obtiene un mejor rendimiento para los puntos de Chebyshev y los puntos de Chebyshev con interpolaciones casi dispersas, que son competitivos con los algoritmos multinivel para un tiempo de cálculo similar y mejores que los algoritmos multinivel con puntos igualmente espaciados.

Machine Translated by Google



(a) F_1^{3d} (b) F_2^{3d}

(c) F_3^{3d} (d) F_4^{3d}

Figura 23. Error RMS frente al tiempo de cálculo de las funciones de prueba en d = 3.

10. Discusión y hallazgos

En este artículo, exploramos un algoritmo de cuasi-interpolación con un núcleo gaussiano basado en cuadrículas dispersas. Observamos que la interpolación basada en kernel casi dispersa se aproxima de manera bastante razonable a funciones bidimensionales y tridimensionales. Sin embargo, no se garantiza que la cuasi-interpolación converja. Observamos que incluso para valores grandes del nivel n de las cuadrículas, el error cuadrático medio de la aproximación no converge a 0 si utilizamos cuadrículas dispersas igualmente espaciadas. Sin embargo, si utilizamos puntos de Chebyshev, el error cuadrático medio de la aproximación disminuye constantemente con el nivel n. Obtenemos una aproximación mucho mejor con puntos de Chebyshev que con una cuadrícula igualmente espaciada para valores mayores de n. Sin embargo, los puntos de Chebyshev son más densos a lo largo del límite del dominio y más dispersos en el centro. Por esta razón, los puntos de Chebyshev producen una aproximación muy pobre en el centro para valores más pequeños de n, lo cual es evidente en los gráficos con aproximaciones de Chebyshev con n = 1 o n = 2.

De la forma en que se construyen las cuadrículas G_ℓ , es posible implementar el algoritmo en paralelo para hacerlo más rápido. De lo contrario, la repetición de la evaluación del interpolante anisotrópico en muchos puntos de la cuadrícula para diferentes valores de n ralentiza la ejecución. Podemos ver que para d = 2, el nivel n = 10 tiene solo 13313 puntos distintos, pero estos puntos se revisan muchas veces, lo que arroja un número total de 35851 puntos utilizados para el cálculo. Esto aumenta la evaluación de la función casi tres veces. Para d = 3 y el nivel n = 7, el número de puntos únicos de la cuadrícula es solo 8961, pero los puntos utilizados para el cálculo llegan a 38868. Debido a esto, la complejidad temporal del algoritmo aumenta muchas veces; se debe implementar el algoritmo solo para computación paralela o mejorar el algoritmo para evitar volver a visitar los puntos de la cuadrícula para diferentes índices múltiples ℓ.

En este artículo, también propusimos una interpolación multinivel basada en kernel cuasi dispersa basada en cuadrículas igualmente espaciadas, así como cuadrículas dispersas basadas en puntos de Chebyshev. Ilustramos nuestros métodos propuestos utilizando algunas funciones de prueba numéricas. Observamos que el cuasiprocedimiento multinivel propuesto funciona mejor que el cuasiprocedimiento propuesto.

Machine Translated by Google

método de interpolación escasa. Sin embargo, el tiempo de cálculo para el método multinivel es considerablemente mayor que para la interpolación cuasi dispersa simple. Esto se debe a que el método multinivel requiere que se evalúen funciones residuales en cada punto disperso de la cuadrícula y, a medida que aumenta el nivel n , el número de puntos dispersos de la cuadrícula también aumenta exponencialmente, lo que conduce a un enorme aumento en el tiempo de cálculo. Como nota positiva, nos gustaría mencionar que debido a la naturaleza de la construcción de grid dispersa, es posible implementar el algoritmo para computación paralela, lo que reducirá considerablemente el

Además, el algoritmo cuasi-disperso multinivel requiere sustancialmente menos tiempo de cálculo en comparación con otros métodos multinivel propuestos en la literatura, ya que no requiere resolver un sistema de ecuaciones lineales en cada nivel de aproximaciones con las funciones residuales. Debido a la implementación del algoritmo cuasi-disperso en cada nivel, el método cuasi-disperso multinivel propuesto tendrá una complejidad de tiempo lineal con el nivel n.

11. Conclusiones

El artículo ha demostrado con éxito la viabilidad y las ventajas de utilizar técnicas de cuasiinterpolación multinivel en redes dispersas de Chebyshev. En comparación con los métodos convencionales, la interpolación cuasi dispersa multinivel con núcleos gaussianos mostró métricas de rendimiento prometedoras. Este documento también detalló las complejidades y desafíos de la implementación, proporcionando una manera eficiente de construir redes dispersas y calcular cuasi-interplantas anisotrópicas. Si bien la metodología fue eficaz en dimensiones inferiores, es decir, dos dimensiones y tres dimensiones, comenzaron a aparecer limitaciones a medida que aumentaban el tiempo de cálculo y la complejidad, lo que indica áreas para futuras investigaciones y optimización.

Los experimentos numéricos arrojaron datos esclarecedores sobre el rendimiento de esta técnica, mostrando su capacidad para una convergencia más rápida con el tiempo de cálculo en entornos específicos. El estudio actúa como un recurso fundamental para futuras investigaciones que tengan como objetivo emplear técnicas de cuasi-interpolación multinivel para diversas aplicaciones, especialmente en problemas computacionales de alta dimensión.

Financiamiento: Esta investigación no recibió financiamiento externo.

Declaración de disponibilidad de datos: los datos están contenidos en el artículo.

Agradecimientos: El autor agradece a la Universidad de Leicester por proporcionar el entorno académico y los recursos. Además, agradecemos sinceramente a sus supervisores, Ruslan Davidchack y Jeremy Levesley, por su invaluable orientación y tutoría. También agradecemos especialmente a la Universidad de Taibah por su generoso apoyo financiero a lo largo de sus estudios de doctorado.

Conflictos de intereses: El autor declara no tener ningún conflicto de intereses.

Referencias

1. Alsharif, F. Cuasiinterpolación multinivel con un núcleo gaussiano utilizando puntos de Chebyshev: estudios numéricos y teóricos utilizando el enfoque de la función de base radial. Doctor en Filosofía. Tesis, Universidad de Leicester, Leicester, Reino Unido, 2023. [CrossRef]
2. Alsharif, F. Cuasiinterpolación en cuadrículas de Chebyshev con correcciones de límites. Computación 2024, 12, 100. [CrossRef]
3. Franz, T.; Wendland, H. Cuasiinterpolación multinivel. IMA J. Número. Anal. 2022, 43, 2934–2964. [Referencia cruzada]
4. Georgoulis, E.; Levesley, J.; Subhan, F. Interpolación basada en kernel disperso multinivel. SIAM J. Ciencias. Computadora. 2013, 35, 815–832. [Referencia cruzada]
5. Beatson, R.; Powell, M. Aproximación multicuadrática univariada: cuasiinterpolación a datos dispersos. Construcción Aproximadamente 1992, 8, 275–288. [Referencia cruzada]
6. Wu, Z.; Robert, S. Propiedades de preservación de la forma y convergencia de la cuasiinterpolación multicuadrática univariada. Acta Matemáticas. Aplica. Pecado. 1994, 10, 441–446. [Referencia cruzada]
7. Wu, Z.; Liu, J. Condición extraña generalizada para cuasiinterpolación de datos dispersos. Adv. Computadora. Matemáticas. 2005, 23, 201–214. [Referencia cruzada]
8. Flotador, MS; Iske, A. Interpolación de datos dispersos de varios pasos utilizando funciones de base radial con soporte compacto. J. Computación. Aplica. Matemáticas 1996, 73, 65–78. [Referencia cruzada]
9. Hales, SJ; Levesley, J. Estimaciones de error para la aproximación multinivel utilizando splines poliarmónicos. Número. Algoritmos 2002, 30, 1–10. [Referencia cruzada]
10. Hubert, S.; Levesley, J. Convergencia de la cuasiinterpolación gaussiana estacionaria multinivel. arXiv 2017, arXiv:1609.02457.
11. Franke, R. Interpolación de datos dispersos: pruebas de algunos métodos. Matemáticas. Computadora. 1982, 38, 181–200.

Machine Translated by Google

12. Fasshauer, GE Meshfree Métodos de aproximación con MATLAB de Ciencias Matemáticas Interdisciplinarias; World Scientific Publishing Co. Pte. Limitado. Ltd.: Hackensack, Nueva Jersey, EE. UU., 2007; Volumen 6.
13. Beatson, R.; Davydov, D.; Levesley, J. Límites de error para la interpolación rbf anisotrópica. J. Aprox. Teoría 2010, 162, 512–527. [Referencia cruzada]
14. Casciola, G.; Montefusco, LB; Morigi, S. Las propiedades regularizadoras de las funciones de base radial anisotrópica. Aplica. Matemáticas. Computadora. 2007, 190, 1050–1062. [Referencia cruzada]

Descargo de responsabilidad/Nota del editor: Las declaraciones, opiniones y datos contenidos en todas las publicaciones son únicamente de los autores y contribuyentes individuales y no de MDPI ni de los editores. MDPI y/o los editores renuncian a toda responsabilidad por cualquier daño a personas o propiedad que resulte de cualquier idea, método, instrucción o producto mencionado en el contenido.

Machine Translated by Google

cálculo

MDPI

Artículo

Uso de algoritmos de aprendizaje automático para desarrollar una predicción Modelo para calcular la deflexión máxima horizontal Vigas en I de acero curvadas

Elvis Ababu 1,*, George Markou 1,2,* y Sarah Skorpen [1]

[1] Departamento de Ingeniería Civil Hatfield Campus, Universidad de Pretoria, Pretoria 0028, Sudáfrica; sarah.skorpen@up.ac.za
[2] Departamento de Ingeniería Civil, Universidad de Neapolis, Pafos, Danais Avenue, Paphos 8042, Chipre
* Correspondencia: u17061785@tuks.co.za (EA); george.markou@up.ac.za (GM)

Resumen: Las vigas en I de acero curvadas horizontalmente exhiben una respuesta mecánica complicada ya que experimentan una combinación de flexión, corte y torsión, que varía según la geometría de la viga en cuestión. Por lo tanto, el comportamiento de estas vigas es bastante difícil de predecir, ya que pueden fallar debido a flexión, corte, torsión, pandeo lateral por torsión o una combinación de estos tipos de falla. Por lo tanto, esto requiere el uso de análisis no lineales complicados para modelar con precisión su comportamiento. Actualmente, las normas internacionales de diseño proporcionan poca orientación en la consideración de los estados límite de servicio de las vigas en I de acero curvadas horizontalmente. En esta investigación, se creó un conjunto de datos validado experimentalmente y se utilizó para entrenar numerosos algoritmos de aprendizaje automático (ML) para predecir la deflexión media del tramo en el momento de la falla, así como la carga de falla de numerosas vigas en I de acero curvadas horizontalmente. Según la investigación experimental y numérica, se descubrió que el modelo de red neuronal artificial profunda era el más preciso cuando se utiliza para predecir el conjunto de datos de validación, donde se observó un error absoluto medio de 6,4 mm (16,20%). Esta precisión superó con creces la del segundo teorema de Castigliano, donde se encontró que el error absoluto medio era igual a 49,84 mm (126%). La red neuronal artificial profunda también fue capaz de estimar la carga de falla con un error absoluto medio de 30,43 kN (22,42%). Este modelo predictivo, que es el primero de su tipo en la literatura internacional, puede ser utilizado por ingenieros profesionales para el diseño de vigas en I de acero curvadas, ya que actualmente es el modelo más preciso jamás desa

Palabras clave: ingeniería estructural; acero estructural; vigas curvas; aprendizaje automático; modelado de elementos finitos

check for updates

Cita: Ababu, E.; Markou, G.; Skorpen, S. Uso de algoritmos de aprendizaje automático para desarrollar un modelo predictivo para calcular la deflexión máxima de vigas en I de acero curvadas horizontalmente. Computación 2024, 12, 151. https://doi.org/10.3390/ computation12080151

Editores académicos: Manolis Georgioudakis, Vagelis Plevris y Mahdi Kioumarsi

Recibido: 6 de marzo de 2024
Revisado: 26 de mayo de 2024
Aceptado: 27 de mayo de 2024
Publicado: 24 de julio de 2024

Copyright: © 2024 por los autores. Licenciatario MDPI, Basilea, Suiza. Este artículo es un artículo de acceso abierto. distribuido bajo los términos y condiciones de los Creative Commons Licencia de atribución (CC BY) (https:// creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

1. Introducción

Aunque las vigas curvas existen desde hace siglos, se dispone de una orientación mínima sobre el diseño de elementos de acero curvados. La fabricación de vigas de acero curvadas comenzó en el siglo XIX, cuando las vigas de acero se fundían en un perfil curvo o se construían a partir de componentes para formar un perfil curvo. La fabricación avanzó, utilizando prensado de tres rodillos o doblado por inducción en situaciones donde las tensiones residuales eran particularmente significativas o se requerían radios más pequeños [1]. Sin embargo, la mayor parte del acero utilizado para la construcción se forma mediante el uso de doblado con rodillos, que es un proceso en frío. Al curvar secciones abiertas mediante procesos en frío, las alas ejercen una fuerza significativa sobre el alma, lo que podría provocar pandeo local. Por lo tanto, se proporcionan rollos adicionales dentro del ala tensada para secciones que son susceptibles al pandeo local (Figura 1).

Las vigas curvadas horizontalmente experimentan importantes tensiones residuales debido a la forma en que están formadas. Un miembro de acero laminado a temperatura ambiente experimenta tensiones mecánicas residuales (compresión y tracción) que reducen la resistencia última del miembro al aumentar su flexibilidad, lo que posteriormente provoca una disminución en la resistencia al pandeo [2]. Las tensiones residuales de tracción son particularmente perjudiciales ya que a menudo son la causa

Machine Translated by Google

de falla por fatiga y agrietamiento por corrosión bajo tensión, mientras que las tensiones residuales de compresión pueden ser algo beneficiosas ya que pueden mitigar el origen y la propagación de grietas [3].

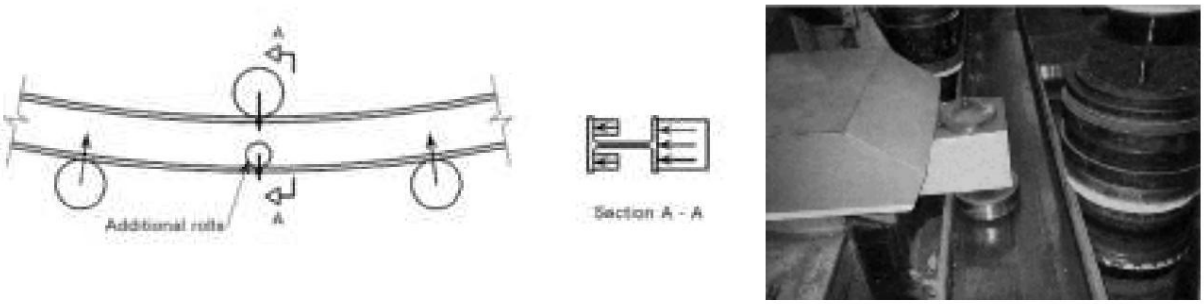


Figura 1. Rollos adicionales para evitar el pandeo del alma en una sección en I [4].

El principal desafío encontrado con las vigas curvadas horizontalmente es que, debido a la geometría de la viga, cuando se aplican cargas normales, la viga experimenta una combinación compleja de flexión, corte y torsión simultáneamente. Los momentos de torsión se pueden visualizar a partir de la forma desviada, ya que el ala comprimida tiende a desviarse lateralmente lejos del centro de curvatura [5]. Cuando se aplican simultáneamente momentos de flexión y torsión a una viga, el acoplamiento de estas fuerzas tiende a reducir la capacidad de carga del miembro. Las investigaciones han demostrado que el comportamiento de vigas curvadas horizontalmente depende de la relación R/L , que también se puede representar como el ángulo de luz. Se ha observado que cuando el ángulo del claro es menor que 1◦ la viga responde de manera similar a una viga recta y está dominada por la flexión (flexión). Cuando el ángulo de luz es mayor que 20◦, el comportamiento de la viga está dominado principalmente por la torsión. Cuando el ángulo de luz está entre 1◦ y 20◦, tanto la flexión , el como la torsión impactan significativamente el comportamiento de la viga [6].

,

En vigas en I rectas, el pandeo lateral por torsión es fácilmente observable a través del desplazamiento lateral y la rotación del miembro. Sin embargo, en vigas I curvas este comportamiento siempre está presente debido a los momentos de torsión experimentados. Este comportamiento fue denominado comportamiento lateral-torsional-vertical por Lee, et al. [7]. Por lo tanto, debido a la curvatura inicial, similar a la rectitud inicial en las columnas, es posible que no se observe pandeo por torsión lateral de tipo bifurcación en vigas en I de acero curvadas. Sin embargo, se ha observado que, como se ve con las vigas rectas, la resistencia a la flexión de las vigas curvas disminuye en los miembros que son susceptibles al pandeo lateral por torsión [6]. El efecto del pandeo lateral por torsión es insignificante cuando el ángulo entre las restricciones por torsión es menor que 22,5° . Si este ángulo es mayor que 22,5◦, el Instituto Americano de Construcción en Acero (AISC) recomienda que la viga se maneje como una viga recta con un factor de modificación de pandeo lateral-torsional ajustado que tenga en cuenta la curvatura.

A lo largo de los años, numerosos investigadores han intentado proporcionar fórmulas analíticas para miembros curvados horizontalmente; sin embargo, muy pocos se han centrado en ecuaciones relativas a la deflexión y la rotación. Wong [8] modificó el segundo teorema de Castigliano, que fue desarrollado originalmente para vigas rectas, y lo hizo aplicable a vigas curvadas horizon
El segundo teorema de Castigliano es un método de energía de deformación que se utiliza para calcular la deflexión. La ecuación generada se puede ver en la Ecuación (1). Cd se puede calcular a partir de la Figura 2. Es importante señalar aquí que la ecuación (1) se limita a vigas que están fijadas en ambos lados y se aplica una carga puntual en el punto central. Dahlberg [9] creó varias ecuaciones que pueden usarse para diversas condiciones de contorno y de carga. Sin embargo, estas ecuaciones son bastante difíciles de implementar y, por lo tanto, rara vez se utilizan en la práctica. Además, Dahlberg [9] ffi no comparó la fórmula con resultados experimentales o de elementos finitos.

$$\Delta 0.5\theta = \frac{Pr3}{EI} Cd \quad (1)$$

Machine Translated by Google

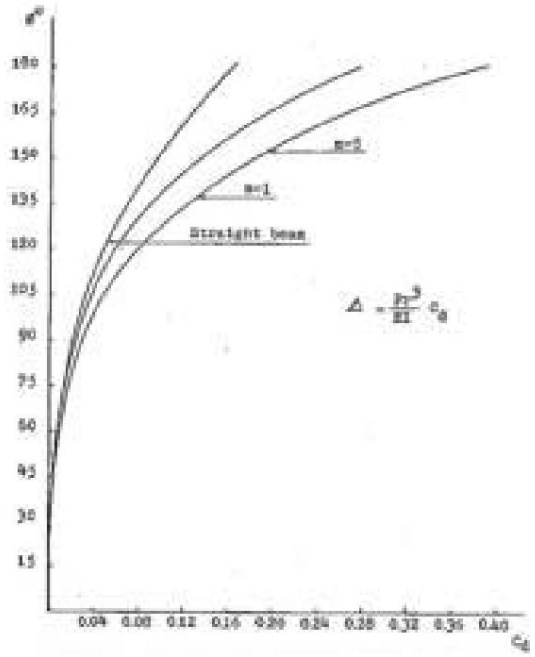


Figura 2. Variación de los coeficientes de deflexión con el ángulo de luz para vigas curvas cargadas con una carga concentrada [8].

El segundo teorema de Castigliano también se puede aplicar para determinar la rotación de vigas curvas; sin embargo, esto suele ser incluso más tedioso que las ecuaciones necesarias para la deflexión . Sin embargo, AISC proporciona una ecuación simplificada (Ecuación (2)). El símbolo h0 representa la altura del miembro y Δmax representa el desplazamiento máximo del miembro [6].

Esta ecuación se deriva usando el método M/R, que se usa ampliamente en el diseño de vigas curvadas horizontalmente, donde la viga curva se modela como una viga recta con una longitud igual a la longitud del miembro curvado. El momento de torsión se explica entonces mediante una ecuación separada:

$$\theta_{máx} = \tan^{-1}\frac{2\Delta_{máx}}{h_0} \quad (2)$$

Se han realizado varias suposiciones durante la derivación de esta fórmula, incluido el hecho de que el espesor de cada elemento de placa es pequeño en relación con el ancho, que, a su vez, es pequeño en relación con el claro. Se supone que las tensiones debidas al alabeo son insignificantes.

El modelado de vigas curvas en FEM genera más complejidades. La mayoría de las aplicaciones de software disponibles comercialmente modelan vigas curvas como una serie de vigas rectas, lo que proporciona suficiente precisión para la mayoría de los propósitos de diseño. Si el modelo experimenta un comportamiento no lineal significativo, se requiere un estudio de convergencia para optimizar el número de elementos requeridos, mientras que el desarrollo de la torsión complica aún más el proceso de análisis. Los elementos finitos de vigas (FE) convencionales no se pueden utilizar para modelar horizontes. Tally vigas en I de acero curvadas que experimentan torsión, debido a la existencia de torsión de alabeo. Las FE de vigas convencionales sólo tienen en cuenta la rigidez de St Venant, lo que provoca un error numérico al calcular la deformación torsional. Se encuentran disponibles FE de vigas actuales que incorporan rigidez al alabeo; sin embargo, estos rara vez se incorporan en productos comerciales. software disponible y también tienden a ser menos precisos. FE tridimensionales como carcasa o

Los elementos sólidos son comúnmente utilizados por los investigadores que intentan modelar el comportamiento de vigas curvas. Estos elementos representan con precisión el comportamiento de torsión sin necesidad de numerosas constantes de torsión. Investigadores anteriores descubrieron que el uso de FE sólidas combinadas con análisis no lineales conducía a estimaciones precisas de los resultados experimentales tanto para la carga última como para la deflexión media del tramo ([10-13]).

Machine Translated by Google

La combinación de flexión y corte, así como desplazamientos y rotaciones de torsión, provoca acciones de flexión de segundo orden en el plano de una viga en I curva. Con un aumento en la carga, estas interacciones crecen rápidamente y, en última instancia, pueden causar un comportamiento no lineal temprano y fluencia, lo que lleva a reducciones en la capacidad de carga última de la viga. Por lo tanto, esto requiere el uso de análisis no lineales al analizar vigas curvadas horizontalmente, en contraposición al análisis estático (lineal) general. Dada la complejidad del problema, también se recomienda el uso de EF que se integren con modelos numéricos de materiales 3D, como en este trabajo de investigación.

2. Algoritmos de aprendizaje automático

Esta sección presenta brevemente las diversas formas en que se ha utilizado el aprendizaje automático (ML) para desarrollar fórmulas que permiten el diseño o la investigación mecánica de estructuras de ingeniería civil . El aprendizaje automático y la inteligencia artificial (IA) se han implementado en las últimas décadas en diferentes campos como herramientas eficientes utilizadas para predecir resultados de análisis para problemas de ingeniería que se consideran exigentes desde el punto de vista computacional y altamente complicados de resolver analíticamente. El uso de ML ha eliminado en gran medida la necesidad de realizar grandes análisis numéricos, ya que contiene la capacidad de proporcionar estimaciones adecuadas de los resultados deseados. Sin embargo, el principal problema que nos ocupa es que para entrenar un algoritmo de aprendizaje automático se requiere un conjunto de datos Por lo tanto, la tarea principal de la mayoría del trabajo de investigación en esta etapa es la generación de conjuntos de datos para diversos problemas relacionados con el hormigón armado y el acero mediante experimentos físicos o numéricos validados. Markou et al. presentaron un metanálisis de varios estudios de casos . [14]; sin embargo, el artículo actual se centró en un único problema de respuesta mecánica en un intento de proporcionar una solución a un problema que nunca se ha resuelto en el pasado. Es importante señalar que todos los algoritmos de ML que se utilizaron para realizar la capacitación, las pruebas y la validación para las necesidades de este trabajo de investigación se pueden encontrar en GitHub (https://github.com/nbakas/nbml/, consultado el 21 de junio de 2023), mediante la descarga del software gratuito nbml. Además, los conjuntos de datos que se desarrollaron para las necesidades de este trabajo de investigación se pueden encontrar a través del siguiente enlace (https://github.com/nbakas/ nbml/tree/a0d27c94dd590688815180ebf6428963a24ca245/conjuntos de datos, consultado el 1 de julio de 2024), mientras que los modelos propuestos pueden ser desarrollados directamente por el lector.

En esta investigación se utilizaron varios algoritmos de ML, a saber, regresión lineal (LR), regresión polinómica con ajuste de hiperparámetros (POLYREG-HYT), ajuste de hiperparámetros de aumento de gradiente extremo (XGBoost-HYT-CV) y redes neuronales artificiales de aprendizaje profundo paralelo. con ajuste de hiperparámetros (DANN-MPIH-HYT). El método LR se utilizó como punto de comparación para los otros algoritmos de ML (Markou, Bakas, Papadrakakis y Chatzichristofis [14]).

POLYREG-HYT es útil para generar fórmulas de forma cerrada relativamente precisas y se aplica para desarrollar modelos predictivos en clases de orden superior. Este método relativamente simplista proporciona una fórmula basada en la combinación no lineal de todas las variables independientes [14]. Este modelo se basa en la creación de términos no lineales que se basan en las variables independientes hasta el tercer grado. Luego, el algoritmo selecciona las características no lineales que corresponden al error mínimo. Originalmente, esta metodología fue utilizada por Gravett, et al. [15], quienes utilizaron un enfoque simplista para determinar la cantidad de funciones a utilizar durante el entrenamiento. Posteriormente, se mejoró ese algoritmo y se introdujo el uso de ajuste de hiperparámetros, como se muestra en Markou, Bakas, Papadrakakis y Chatzichristofis [14], que muestran el algoritmo ML propuesto que se ha utilizado para las necesidades de este trabajo de investigación. El algoritmo mejorado se describe en el Algoritmo 1.

XGBoost-HYT-CV es una modificación del algoritmo de aumento de gradiente extremo de código abierto actualmente. El XGBoost original es una biblioteca que aumenta el gradiente para problemas de aprendizaje automático, como clasificación y regresión. El algoritmo implementa el marco de aumento de gradiente , que está diseñado para ser rápido y escalable, lo que lo hace adecuado para grandes conjuntos de datos [1 Para mejorar el algoritmo XGBoost actual, se utilizó el ajuste de hiperparámetros. Se descubrió que este ajuste presenta resultados precisos en comparación con los del aprendizaje profundo y requiere

Machine Translated by Google

Menos demanda informática [14]. Un beneficio de este algoritmo es su capacidad para localizar y reemplazar valores faltantes en los conjuntos de datos de entrenamiento y prueba.

Algoritmo 1: Algoritmo de selección de características para regresión polinómica [14]

```
Datos: X, y, mf (número máximo de características)
Resultado: Inicializar [o] = 1 con el término constante [p]
Resolver el sistema lineal ′ × a = y, donde X ′ X, con [o] columnas.
X Calcular los errores de regresión e1.
Establecer como error óptimo eˆ ← e1.
Establecer como índices óptimos [oˆ] ←
[o]. para i [1, 2, . . . , l]
    repetir
        Seleccione un índice d [p] aleatoriamente.
        si d [o] entonces
            r ← U(0, 1) si
            r < entonces
                Seleccione aleatoriamente od [p] : od
                    [o] [o] ← ([o] \ d)
            od ; demás
                [o] ← [o] \ d;
            fin
        demás
            si o < mf entonces
                [o] ← [o] d;
            demás
                Seleccione aleatoriamente od
                    [o] [o] ← ([o] \ od ) d;
            fin
        fin
    hasta rango(X ′) ≡o ;
    Resolver sistema lineal X × ′a = y.
    Calcular el error de regresión ei . si
    ei < eˆ entonces
        eˆ ← ei
        [oˆ] ← [o]
    else
        [o] ← [oˆ]
    fin fin
```

El algoritmo final que se utilizó fue DANN-MPIH-HYT, que tiene la capacidad de entrenar en conjuntos de datos grandes y pequeños mediante el uso de procesamiento paralelo. El algoritmo se programó para entrenar tanto en unidades de procesamiento de computadora (CPU) como en unidades de procesamiento de gráficos (GPU) y también se proporcionó el uso de cálculos distribuidos. Esto condujo a tiempos de entrenamiento y prueba más rápidos al usar el algoritmo, ya que se sabe que el aprendizaje profundo es particularmente lento cuando se trata de procesos de entrenamiento, especialmente en los casos en que se utilizan grandes conjuntos de datos [14]. Se utilizó una combinación de Horovod con MPI para optimizar el procedimiento numérico. La biblioteca Horovod se implementó para el entrena Con Horovod, se puede tomar un único script de entrenamiento de GPU y ejecutarlo en numerosas GPU en paralelo. Mediante el uso de comandos de interfaz de paso de mensajes (MPI), cada proceso se inicializa y se le asigna su rango MPI de manera sencilla, lo que se logra con menos cambios de código en comparación con otros enfoques. Markou, Bakas, Papadrakakis y Chatzichristofis [14] probaron varios algoritmos experimentales en la supercomputadora Cyclone, utilizando PyTorch para visión por computadora y tareas de regresión, destacando la eficiencia del paralelismo de datos.

Machine Translated by Google

En los últimos años, el aprendizaje automático combinado con el modelado FEM se ha utilizado para crear fórmulas precisas para diversas aplicaciones de ingeniería. Markou y Bakas [16] crearon fórmulas para determinar la capacidad de corte de vigas esbeltas de hormigón sin estribos. En su trabajo de investigación, se crearon un total de 35.849 haces y se utilizaron cuatro algoritmos de ML: regresión lineal, regresión polinómica, XGBoost y redes neuronales de aprendizaje profundo. En ese estudio, se observó que el algoritmo XGBoost era el más preciso, con un error del 5,82%. [17-20] siguió una metodología similar , donde se desarrollaron fórmulas de diseño y modelos predictivos en relación con problemas estructurales de acero y RC.

En este contexto, el actual trabajo de investigación valida modelos numéricos mediante el uso de resultados de experimentos realizados en vigas en I de acero curvadas en los laboratorios de la Universidad de Pretoria y, posteriormente, se describe el desarrollo de un conjunto de datos relativamente grande a través de análisis no lineales. El siguiente paso implicará el desarrollo de los modelos predictivos propuestos que se validan y presentan en el presente artículo.

3. Investigación experimental

Se realizaron estudios experimentales para validar los modelos de elementos finitos que se utilizaron para desarrollar los conjuntos de datos para las necesidades de este trabajo de investigación. También se utilizaron experimentos para determinar el tipo de elemento finito apropiado que produciría los resultados más precisos con respecto a la deflexión y rotación de la viga en I. Los experimentos involucraron la investigación de una viga en I de acero curvada horizontalmente (IPE 100) donde los dos extremos estaban completamente fijados y se aplicó una carga verticalmente hacia arriba en el centro del vano. Los resultados medidos fueron deflexión vertical en el centro del claro, rotación en el medio del claro y en los cuartos , y deformaciones en el medio del claro y el apoyo.

La viga analizada fue una viga IPE100 de 3,5 m de longitud. Esta viga fue seleccionada para minimizar las fuerzas aplicadas con el fin de mantener un ambiente de trabajo seguro. En la Figura 3 se puede ver un esquema simplificado que describe cómo se apoyó y cargó la viga .

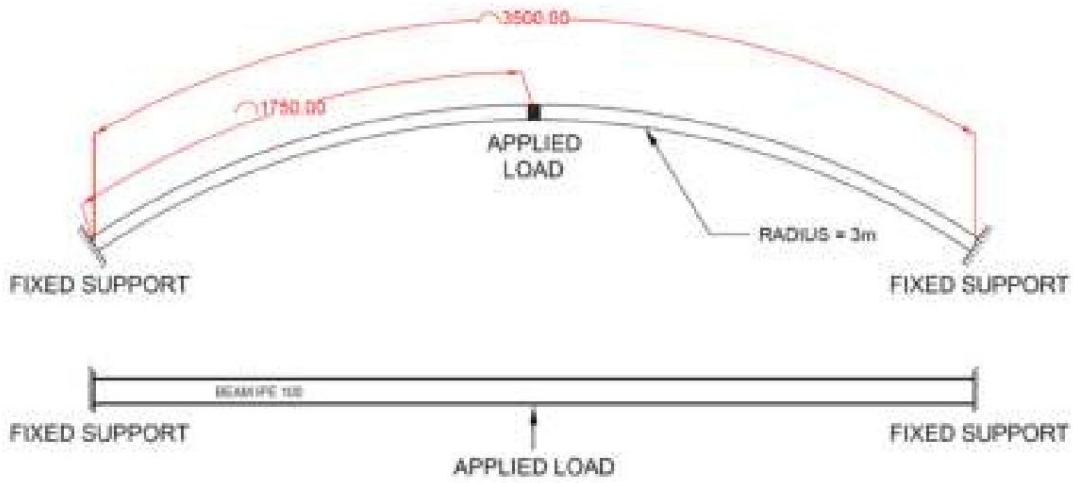


Figura 3. Esquema básico de la configuración experimental de la viga curva (todas las dimensiones están en milímetros).

Para crear un soporte totalmente fijo, la sección transversal de la viga IPE 100 se soldó sobre dos placas de 12 mm de espesor. Luego, estas placas de 12 mm de espesor se soldaron a una viga rígida, que luego se atornilló al piso de prueba con pernos M24 Gr8.8. Se asumió que todo el sistema era rígido y en este punto se esperaban deflexiones y rotaciones mínimas. Se colocaron transformadores diferenciales variables lineales (LVDT) adicionales en los soportes. En las Figuras 4 y 5, respectivamente, se puede observar un esquema de las condiciones de soporte así como una fotografía

Machine Translated by Google

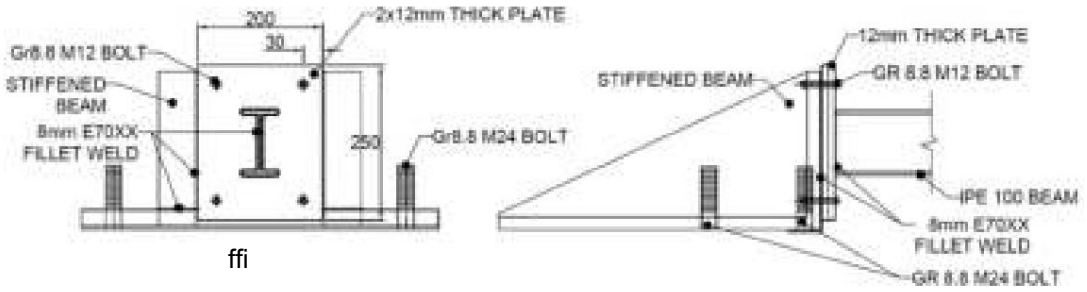


Figura 4. Esquema del experimento con soporte fijo (todas las dimensiones están en milímetros).

Figura 5. Experimente con soporte fijo.

Se utilizó un mecanismo de aplicación de carga simple, que permitió una configuración de prueba más rápida y sencilla. La viga se cargó con una barra de acero de 40 mm que tenía un borde plano. Este borde plano se cargó sobre la viga mediante un puente grúa. Luego, la celda de carga calculó la carga experimentada por la viga cada 100 milisegundos, lo que proporcionó datos suficientes para fines de análisis. El equipo de carga tenía una capacidad de 50 toneladas, suficiente para la carga de rotura esperada de la viga. La barra de acero también permitió que la viga girara libremente en el punto de aplicación de la carga, lo cual era necesario dadas las grandes rotaciones esperadas de esta viga curva horizontalmente.

Los LVDT se utilizaron para medir la deflexión del haz sólo en la dirección vertical. Se utilizaron dos tipos diferentes de LVDT, uno con un alcance de 250 mm, que se colocó en los apoyos y otro con un alcance de 1000 mm, que se colocó en el centro del vano. El LVDT en el centro del tramo se colocó a 160 mm del punto de aplicación de la carga para que las mediciones pudieran tomarse en la misma posición que las galgas extensométricas. Las galgas extensométricas se desplazaron para no verse influenciadas por la carga puntual aplicada. Se utilizaron LVDT debido a su alta precisión y buena estabilidad a largo plazo, a diferencia de los potenciómetros, que tienen menor exactitud y precisión pero suelen ser más versátiles. En la Figura 6 se puede ver un esquema de la ubicación de los LVDT.

Se utilizaron inclinómetros para medir la rotación a lo largo y a través de la viga. Se utilizaron dos inclinómetros de doble eje. Los inclinómetros utilizados hicieron uso de un

Nivel electrolítico que era capaz de medir la inclinación a lo largo de dos ejes (cabeceo y balanceo). Un inclinómetro se colocó a 100 mm del punto de aplicación de la carga pero en la mitad opuesta de la viga desde donde se colocaron el LVDT y las galgas extensométricas, y el otro se colocó en el cuarto de punto de la misma mitad. En la Figura 7 se puede ver un esquema que describe la posición de los inclinómetros .

Machine Translated by Google

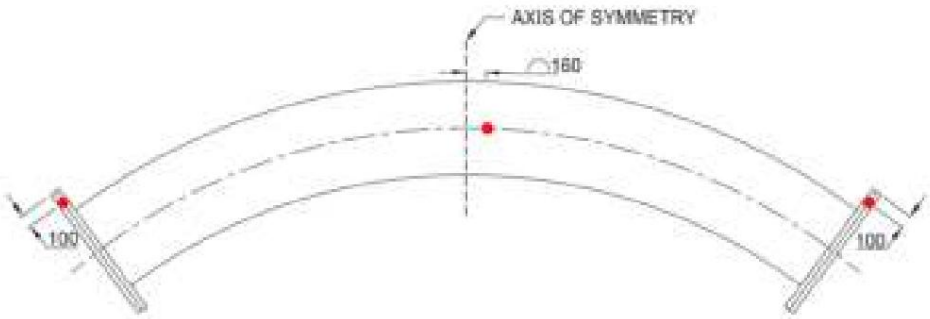


Figura 6. Esquema que indica los puntos de las medidas de desplazamiento (todas las dimensiones están en milímetros).

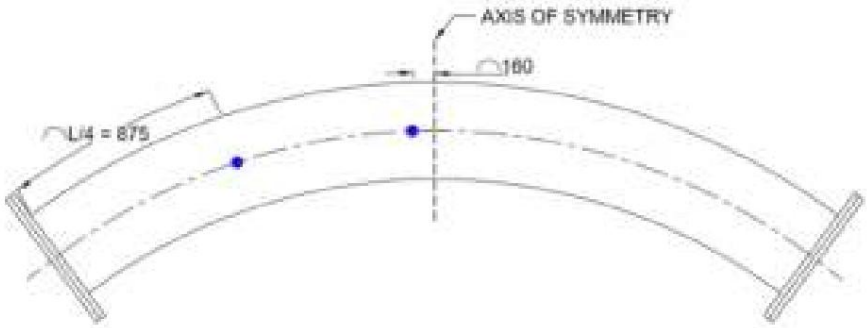


Figura 7. Esquema que indica las medidas de los puntos de rotación (todas las dimensiones están en milímetros).

La mayor parte de la configuración de la instrumentación implicó colocar con precisión las galgas extensométricas. Las galgas extensométricas son muy sensibles. Por lo tanto, se requiere que la superficie donde se aplica un medidor de tensión sea extremadamente lisa y libre de impurezas antes de colocar el medidor de tensión. La ubicación de estas galgas extensométricas fue fundamental para que la comparación entre las galgas extensométricas y el análisis FE pudiera ser lo más precisa posible. Esto fue particularmente cierto para las galgas extensométricas colocadas a 45°, que eran necesarias para medir con precisión la tensión torsional dentro de la viga. Se utilizó un total de 16 galgas extensométricas para medir la deformación en varios puntos de la mitad de la viga. En la mitad del tramo, sólo se proporcionaron galgas extensométricas longitudinales en las alas superior e inferior. Estas alas longitudinales se colocaron en el borde más alejado de la viga para leer la deformación longitudinal máxima en el centro del vano. En el soporte se siguió la misma disposición, por lo que en este punto se colocaron otras cuatro galgas extensométricas colocadas longitudinalmente. También se colocaron dos galgas extensométricas transversalmente en las alas superior e inferior para investigar el flujo cort Se colocaron dos galgas extensométricas verticales más a cada lado del alma para medir el flujo cortante de la viga a través del alma. Se colocaron cuatro galgas extensométricas diagonales para medir los esfuerzos de torsión experimentados en estos puntos. En la Figura 8 se puede ver un esquema que describe la posición de las galgas extensométricas.

Toda la instrumentación se conectó a un registrador HBX Quantum. Este registrador permitió la conversión de voltaje a las unidades apropiadas para los diversos instrumentos después de la calibración (por ejemplo, milímetros para el LVDT, kilonewtons para la celda de carga y micrómetros/metros para las galgas extensométricas). Durante el experimento, la carga se aplicó a la viga en incrementos hasta la carga de falla final más allá del punto de fluencia. Durante la carga, se tomó un video para registrar el experimento, que se utilizó para la verificación al analizar los resultados. Luego también se tomaron fotografías después de que se aplicó la carga final y se experimentó el rendimiento para su posterior análisis (Figura 9).

Machine Translated by Google

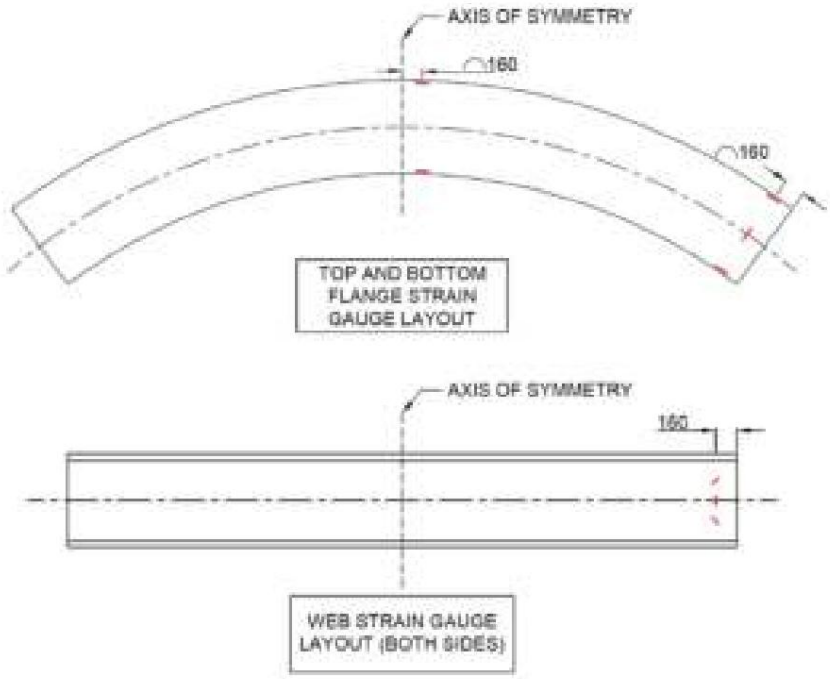


Figura 8. Esquema que indica los puntos de las mediciones de deformación (todas las dimensiones están en milímetros).

Figura 9. Forma deflexión de la viga durante la fase de carga.

4. Análisis de resultados experimentales

Durante las pruebas, se midieron un total de cinco variables. Estas variables fueron la carga aplicada en el centro del vano, el desplazamiento, la inclinación/rotación y la deformación. Las lecturas iniciales antes de la aplicación de la carga se tomaron como punto de referencia para todas las lecturas futuras. Como se mencionó anteriormente, la carga se aplicó incrementalmente en pasos de 3 kN. Esto se llevó a cabo para poder determinar con precisión en qué carga se produjo la fluencia (mediante la medición de la deformación permanente). Se observó que después de que se retiró la carga de 12 kN, se produjo una deformación permanente en el punto medio de la viga. La deflexión para esta carga fue de aproximadamente 55 mm.

Machine Translated by Google

La deflexión medida en los apoyos fue insignificante, alcanzando hasta 0,07 mm.
(hacia arriba). Esto se consideró insignificante y, por lo tanto, no se tuvo en cuenta en los cálculos.
de la deflexión del medio tramo. La Figura 10 muestra la curva carga-deflexión de la viga. Resultados
mostró que la viga se desvió linealmente hasta 55,05 mm con una carga de 12,42 kN. El
experimento se detuvo justo en el punto de ceder; por lo tanto, no se indica una meseta en este
gráfico, lo que sería una indicación más de que se había producido una cesión.

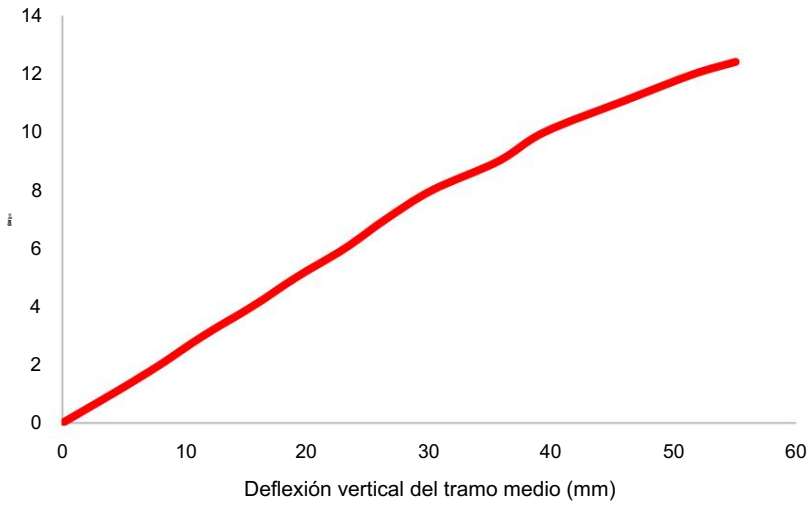


Figura 10. Curva carga-deflexión de la viga experimental (luz media).

Al investigar los resultados de la inclinación, se observaron errores. Los resultados mostraron que la inclinación
no aumentó consistentemente a medida que aumentaba la carga. En algunos puntos, se observó una disminución en la inclinación.
medido con un aumento de carga. Esto se puede observar en la Figura 11, donde se puede observar que
a medida que la carga aumentó de 2 kN a 4 kN, se midió que la inclinación había disminuido ligeramente.
Prácticamente esto no es posible. Se cree que este error se debió al uso incorrecto de
el aparato de medición. El aparato utilizado para medir la inclinación hacía uso de un electrolítico.
nivel. Los niveles electrolíticos suelen ser bajos cuando se trata de carga dinámica/cíclica,
debido al fluido conductor que se encuentra dentro del vidrio sellado. Por lo tanto, estos resultados pueden ser
se utiliza para obtener una estimación aproximada de cómo aumenta la inclinación a medida que aumenta la carga; sin embargo, estos
Los resultados no se pueden utilizar para determinar la precisión de los modelos FE o fórmulas analíticas. A
La línea de mejor ajuste se ha incluido en la Figura 11 para una mayor interpretación, que muestra que
La inclinación aumentó a medida que aumentó la carga.

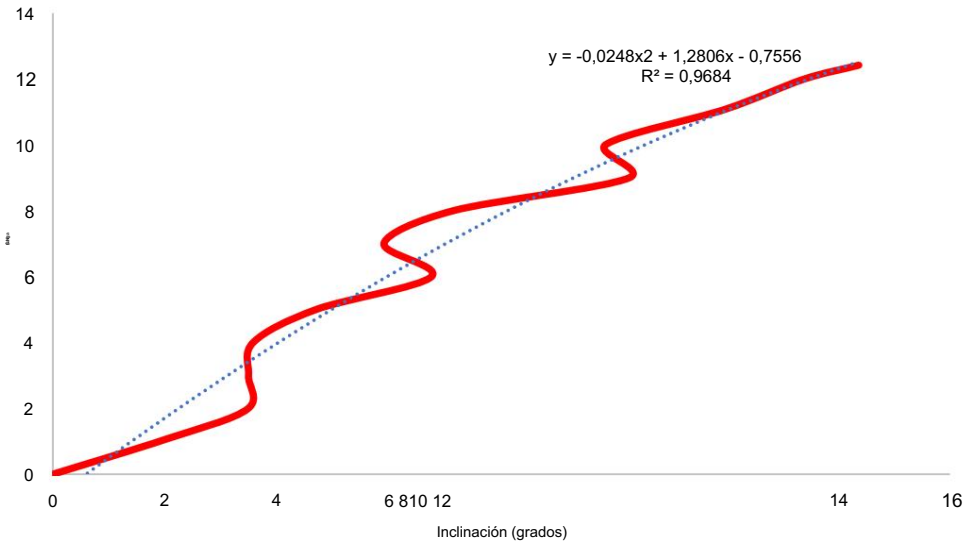


Figura 11. Diagrama de carga-inclinación de la viga experimental.

Machine Translated by Google

Los resultados de la cepa fueron bastante interesantes y mostraron la implicación del soporte. condiciones utilizadas. Se pretendía que el soporte quedara totalmente fijo; sin embargo, prácticamente, el soporte se comportó de una manera entre la de una conexión completamente fija y una conexión totalmente conexión con pasadores, como se vio con los resultados del extensímetro. El patrón de galgas extensométricas fue simétrico con la sección transversal (tanto vertical como horizontalmente); sin embargo, los resultados No se vio que fueran perfectamente simétricos. La razón principal de las discrepancias fue la mayoría Probablemente se debió a imprecisiones durante el montaje de las galgas extensométricas. Material y las imperfecciones geométricas también influyeron. Los resultados de la galga extensométrica se pueden ver en Figuras 12-14.

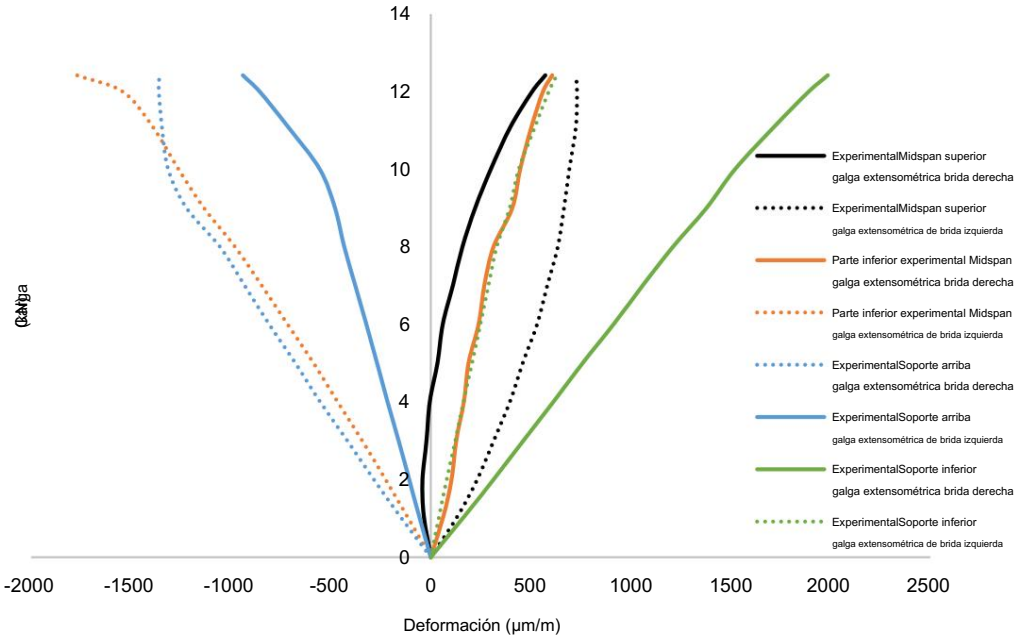


Figura 12. Resumen gráfico de los resultados experimentales de las galgas extensométricas longitudinales del ala de una viga.

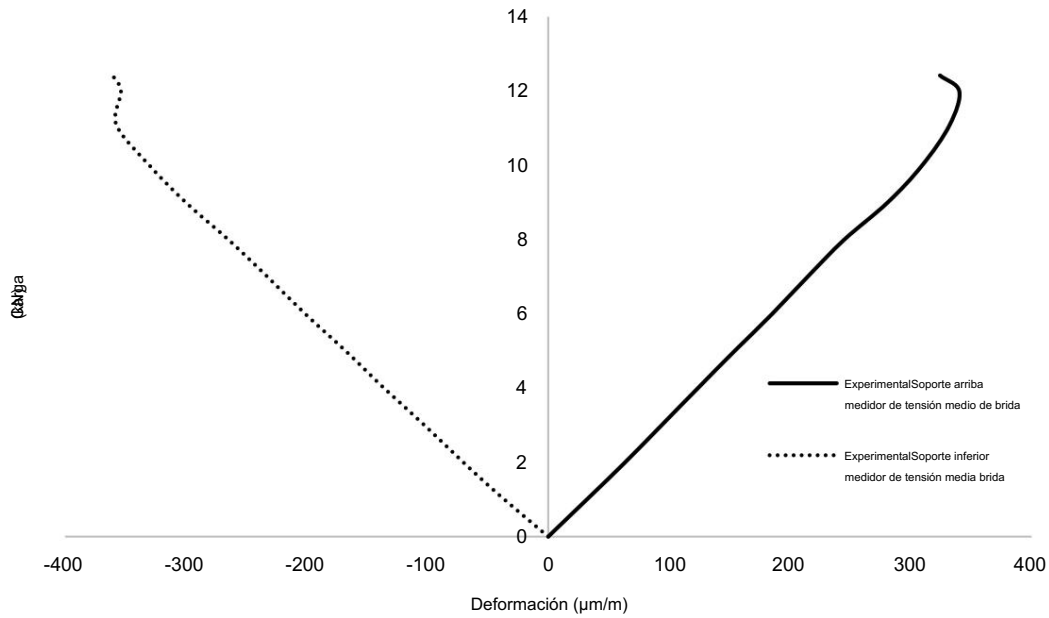
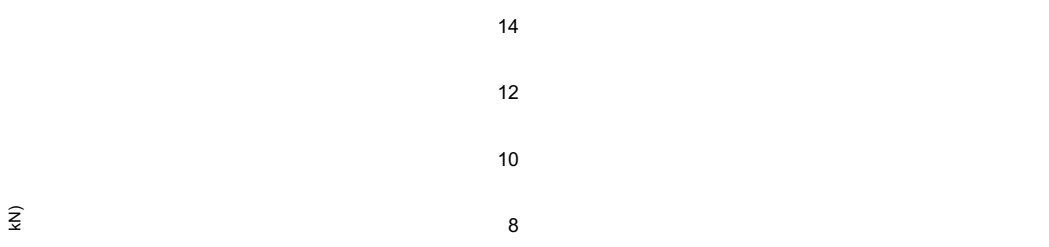
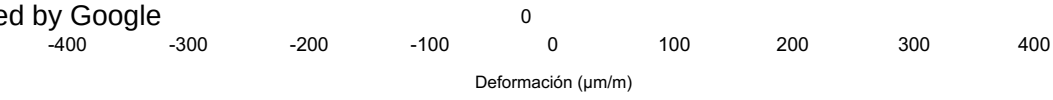


Figura 13. Resumen gráfico de los resultados experimentales de la galga extensométrica transversal del ala de una viga.



Machine Translated by Google



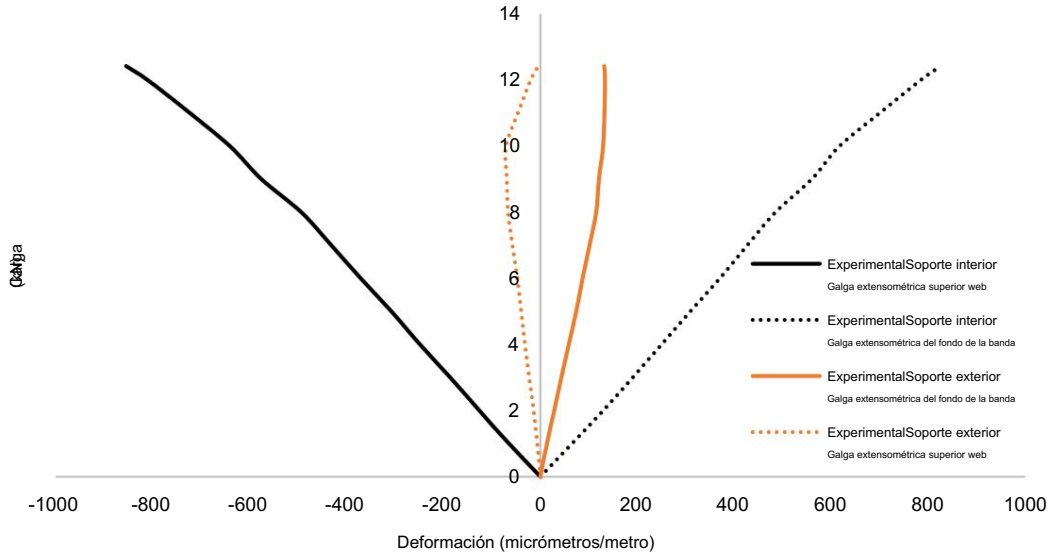


Figura 14. Resumen gráfico de los resultados de la galga extensométrica de alma de 45◦ de una viga experimental.

5. Comparación de datos experimentales con resultados de análisis de elementos finitos

Se utilizaron y compararon varios modelos de EF para determinar qué modelo representaba con mayor precisión el comportamiento de la viga experimental. El enfoque fue determinar la modelo FE óptimo que se utilizará para el desarrollo de los conjuntos de datos. Los conjuntos de datos fueron utilizados entrenar varios algoritmos de ML para el desarrollo de los modelos predictivos propuestos relacionado con el cálculo de la resistencia última de vigas en I de acero curvadas que se fijan en sus extremos y la respectiva deflexión.

CivilFEM 2021 se utilizó para desarrollar las numerosas mallas FE que se utilizaron para construir el conjunto de datos. Este software fue seleccionado debido a su interfaz, que permitía Creación de mallas de vigas en I de acero curvadas de forma automatizada. Las FE sólidas y de cáscara fueron considerado en este trabajo de investigación, donde el tamaño de malla se determinó con base en un análisis previo estudio de investigación en el que los autores realizaron un análisis de sensibilidad de la malla [21]. Lineal y también se consideraron elementos cuadráticos para cada uno de los FE utilizados para reproducir el resultados experimentales. Es importante señalar en esta etapa que [21] utilizó resultados experimentales encontrado en la literatura para calibrar su modelo que involucraba vigas en I de acero con una diferente sistema de soporte en comparación con las vigas de extremos fijos que se investigan en este documento. Eso El proyecto piloto demostró que los FE isoparamétricos hexaédricos podían reproducir con precisión resultados experimentales [21].

Por lo tanto, se crearon un total de cuatro modelos para las necesidades de este trabajo de investigación, a saber, un elemento sólido lineal, un elemento sólido cuadrático, un elemento de capa lineal y un elemento de caparazón cuadrático. Todos los parámetros relacionados con el material se mantuvieron constantes entre los cuatro modelos para mantener la coherencia. Un modelo de material no lineal típico con anticipación. Se asumió un comportamiento bilineal. El tipo de endurecimiento seleccionado fue isotrópico, lo que indica que la fluencia se produjo cuando la tensión efectiva o equivalente fue igual a la especificada límite elástico. Este criterio de cesión seleccionado fue el de von Mises. Además, Se supuso que las propiedades del material eran las de un material de acero S355 (rendimiento de 355 MPa). tensión, módulo elástico de 210 GPa, una relación de Poisson de 0,3 y una densidad de 7850 kg/m3). El Luego se compararon la deflexión y rotación experimentales en la mitad del tramo con la mitad del tramo. deflexión y rotación calculadas utilizando los distintos modelos FE. Las fórmulas analíticas fueron También se incluyen con fines comparativos.

La Figura 15 muestra que el FE sólido lineal obtuvo la peor predicción al estimar deflexión en el medio del tramo. El método analítico, el segundo teorema de Castigliano, tampoco fue capaz de para representar con precisión el comportamiento de la viga y tuvo un desempeño bastante pobre en comparación con los modelos FE más avanzados. El modelo sólido cuadrático calculado con mayor precisión

Machine Translated by Google

la deflexión media del vano, con un error promedio de sólo 1,83 mm. Un resumen del cálculo El error absoluto medio (MAE) se puede ver en la Tabla 1.

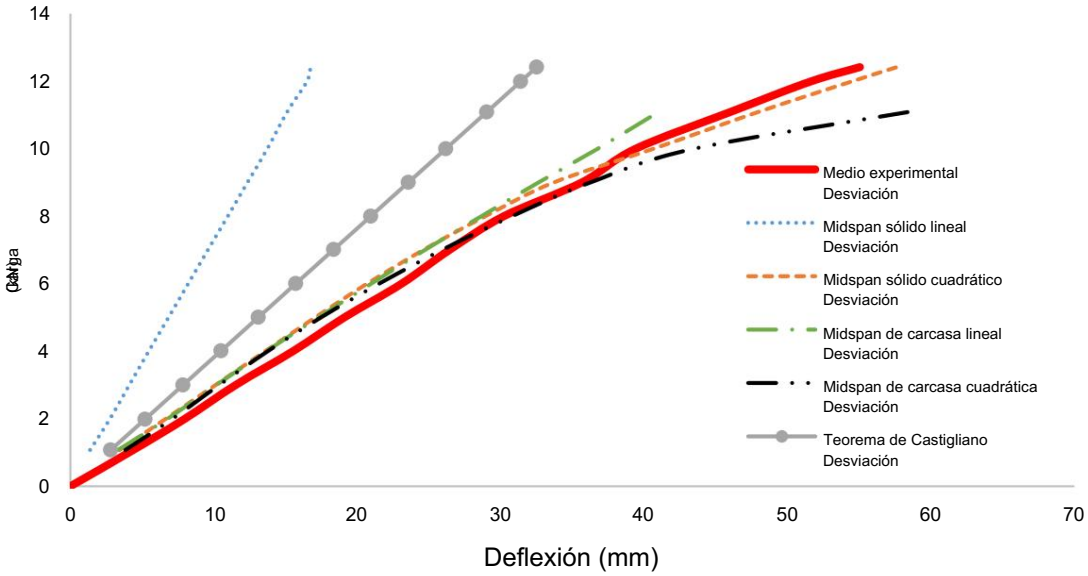


Figura 15. Gráfico carga-deflexión que muestra resultados experimentales de deflexión, resultados de FE y resultados obtenido con la fórmula analítica.

Tabla 1. Error absoluto medio de la estimación de la deflexión FEM y el teorema de Castigliano comparados con los datos experimentales.

Método de estimación de deflexión	MAE
Modelo de elementos finitos sólido lineal	18,64 milímetros
Modelo de elementos finitos sólidos cuadráticos	1,83 milímetros
Modelo de elementos finitos de capa lineal	2,12 milímetros
Modelo de elementos finitos de capa cuadrática	2,33 milímetros
teorema de castigliano	9,91 milímetros

Además, las rotaciones de sección resultantes se pueden ver en la Figura 16. Similar a Los resultados de deflexión, los datos experimentales y los resultados derivados de los análisis FE fueron en comparación con los de un método analítico comúnmente utilizado, como se analizó anteriormente (Ecuación (2)). La deflexión experimental se utilizó como entrada para lograr la mayor precisión posible al implementar el método analítico. Debido al hecho de que sólido Las FE no contienen grados de libertad de rotación, la rotación se calculó desde la primera principios mediante el uso de la deflexión vertical en los extremos opuestos del fondo brida y usando trigonometría para calcular la rotación. Este método sólo es válido dado que la sección transversal no se deforma significativamente. En el gráfico se observó que la línea lineal Los FE sólidos proporcionaron la menor precisión, subestimando significativamente la inclinación del medio tramo.

El M/R tuvo un rendimiento ligeramente mejor en comparación con el Fes sólido lineal; sin embargo, Estos resultados todavía eran extremadamente conservadores en comparación con los FE más avanzados. modelos. Los modelos FE más avanzados se correlacionaron bien con la línea de mejor ajuste del datos experimentales. Sin embargo, parece que el modelo de capa cuadrática era más preciso hasta hasta aproximadamente 10 kN. Desde 10 kN hasta la falla, la capa lineal y el sólido cuadrático Ambos modelos mostraron errores más bajos en comparación con los datos experimentales. un resumen de Las métricas de error (MAE) se pueden ver en la Tabla 2.

Machine Translated by Google

tt

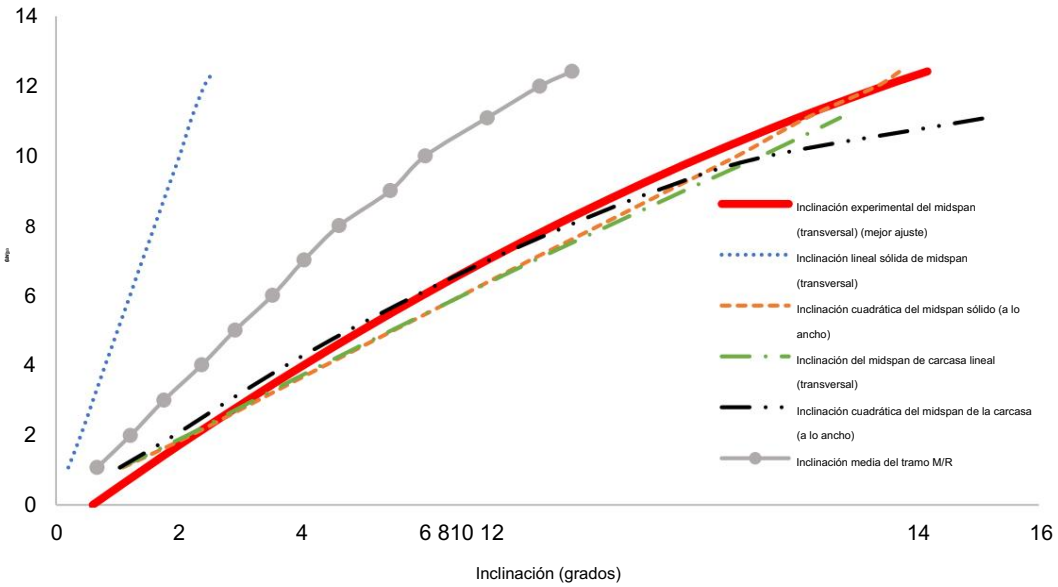


Figura 16. Gráfico de carga-rotación que muestra los resultados de las fórmulas analíticas experimentales, FE y M/R.

Tabla 2. Error absoluto medio de la estimación de rotación FEM y la fórmula analítica para datos experimentales.

Método de estimación de rotación	MAE
Modelo de elementos finitos sólido lineal	4,98◦
Modelo de elementos finitos sólidos cuadráticos	1.31◦
Modelo de elementos finitos de capa lineal	1,52◦
Modelo de elementos finitos de capa cuadrática	1,33◦
método M/R	2.31◦

Por lo tanto, se concluye que los modelos EF con la técnica de modelado numérico descrita en esta sección son capaces de representar con precisión el comportamiento de vigas en I de acero curvadas horizontalmente. También se ha demostrado que estos modelos superan significativamente las fórmulas analíticas existentes para estimar tanto la deflexión como la rotación. Se observó que de todos los modelos de FE, el FE sólido cuadrático tuvo el mejor desempeño tanto en la estimación de la deflexión como de la rotación. Por lo tanto, la técnica de modelado numérico descrita en esta sección se utilizó para desarrollar un gran conjunto de datos como se describe en las secciones siguientes.

6. Campaña numérica Se

creó un conjunto de datos relativamente grande que consta de 864 modelos mediante el uso de CivilFEM. Se consideraron un total de seis secciones, a saber, IPE100, IPE200, IPE300, IPE400, IPE500 e IPE600. Esto se hizo para abarcar toda la lista de secciones del IPE de acuerdo con los estándares europeos. Las variables consideradas fueron el momento de inercia alrededor del eje x (Ixx), el momento de inercia alrededor del eje y (Iyy), el momento de inercia polar (J), la altura de la sección (h), el ancho de la sección (b), el área de la sección. (A), longitud curvada de la viga (L), radio de curvatura de la viga (R), límite elástico del material (fy), módulo de Young del material (E), relación de Poisson del material (v) y módulo de corte del material (G). Para cada sección considerada, se supusieron tres límites elásticos (235 MPa, 275 MPa y 355 MPa), para tener en cuenta las diversas resistencias del acero estructural disponibles comercialmente en Sudáfrica. Se consideraron tres módulos de Young, a saber, 190 GPa, 200 GPa y 210 GPa, para tener en cuenta las variaciones en la rigidez del material. El índice de Poisson se fijó en 0,28 y la ecuación de G se calculó con base en E y v. Se consideraron cuatro longitudes y cuatro radios por sección para cubrir el amplio rango de geometrías a las que serán aplicables los modelos predictivos propuestos. Dado que las relaciones R/L

Machine Translated by Google

Se ha descubierto que controlan el comportamiento de vigas curvas, se determinaron cuatro relaciones R/L específicas. consideradas en todas las vigas, es decir, R/L = 1, 2, 4 y 8. Todas las vigas se fijaron completamente en ambas extremos y se aplicó una carga normalmente hacia abajo en el medio del vano.

Para mantener la coherencia, los modelos se generaron automáticamente utilizando Python. guión dentro de CivilFEM. Esto aseguró que se mantuvieran todas las propiedades geométricas y del material y solo se modificó una variable, lo que permitió la generación automática de malla. A El script Python fue desarrollado y optimizado para garantizar la coherencia y minimizar la ejecución. tiempo mediante la disminución del número de variables y el rendimiento general del código.

Todos los modelos utilizaron elementos sólidos cuadráticos con un tamaño de malla de hasta 50 mm. A Se asumió un modelo de material no lineal típico con comportamiento bilineal previsto. El El tipo de endurecimiento seleccionado fue isotrópico, lo que indica que la fluencia se produjo cuando el La tensión efectiva o equivalente era igual al límite elástico especificado. Este rendimiento seleccionado El criterio se fijó como el de von Mises.

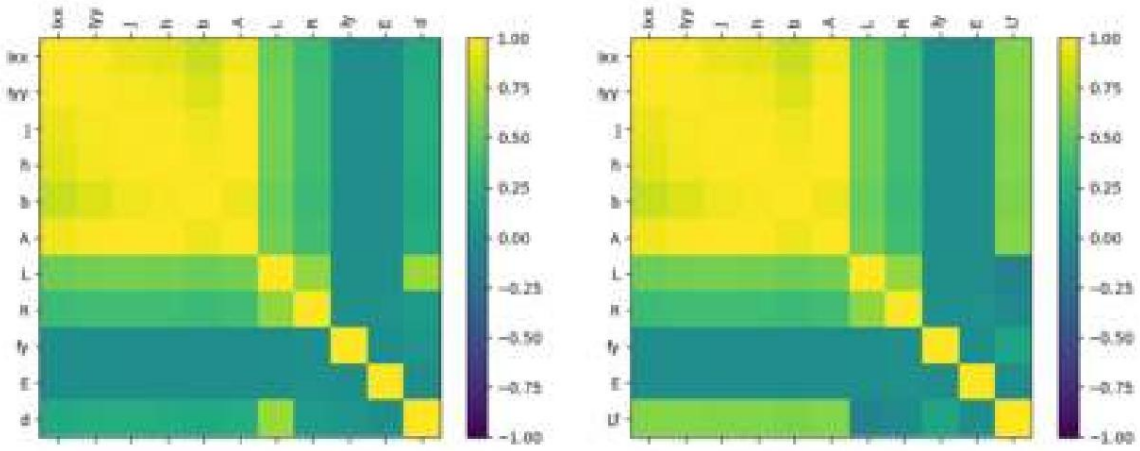
La Tabla 3 indica diferentes parámetros estadísticos, incluida la asimetría. Un valor de 0 indica que el conjunto de datos no contenía asimetría y tenía una distribución perfectamente normal. Según Aminu y Shariff [22], un rango de −3 a 3 puede considerarse como un límite, y con base en esto, los resultados muestran que los datos no estaban significativamente sesgados. Curtosis es otro parámetro que ayuda aún más a determinar si un conjunto de datos es normalmente distribuido o no. Esto se realiza determinando si un conjunto de datos tiene "cola pesada" o “de cola ligera”. "Cola pesada" implica que un conjunto de datos contiene numerosos puntos de datos en posiciones atípicas, mientras que un conjunto de datos de “cola ligera” contiene mínimos o ningún valor atípico. Una vez Nuevamente, no existe una convención aceptada sobre lo que se considera “de cola pesada”; sin embargo, Aminu y Shariff [22] afirman que un rango de +10 a −10 se considera de cola ligera y contiene valores atípicos mínimos. En este contexto, se observó que el conjunto de datos creado para las necesidades de este trabajo de investigación contenía valores atípicos mínimos con una buena distribución.

Tabla 3. Estadísticas descriptivas del conjunto de datos de vigas curvadas horizontalmente.

	Significar	Mediana	ETS	mín.	máx.	Oblicuidad	Curtosis
Ixx (mm4)	291.198.612	231.300.000	326.514.119	1.710.000	920.800.000	0,977	−0,455
Iaa (mm4)	12.720.819	13.180.000	1.1960.328	159.000	33.870.000	0,625	−0,960
J (mm4)	692,957	841.000	553,277	12,100	1.540.000	0,142	−1,343
Mmm)	349,80	400	172.05	100	600	−0,011	−1.284
segundo (mm)	150,59	180	58.02	55	220	−0,472	−1.181
A (mm2)	7490	8450	5048	1030	15.600	0,285	−1,223
L (m)	7.48	4	6.44	1	24	1.346	0.953
R(metro)	27,99	16	35.26	1	192	2.653	8.242
Fy (MPa)	289,37	275	50.23	235	355	0.343	−1,543
mi (GPa)	199,93	200	8.14	190	210	0.012	−1.491

La matriz de correlación para el conjunto de datos de desplazamiento se puede encontrar en la Figura 17a y para el conjunto de datos de carga de falla en la Figura 17b. De los resultados de la matriz de correlación quedó claro que Todas las propiedades de la sección transversal tuvieron una fuerte correlación positiva con la deflexión media del tramo. y la carga de falla. También estaba claro que, de todas las propiedades, la longitud curva tenía la mayor correlación con la deflexión vertical en el medio del vano. Esto implica el potencial de traducirse en resultados positivos en el análisis de sensibilidad; esto se analiza en la Sección 7.

Machine Translated by Google



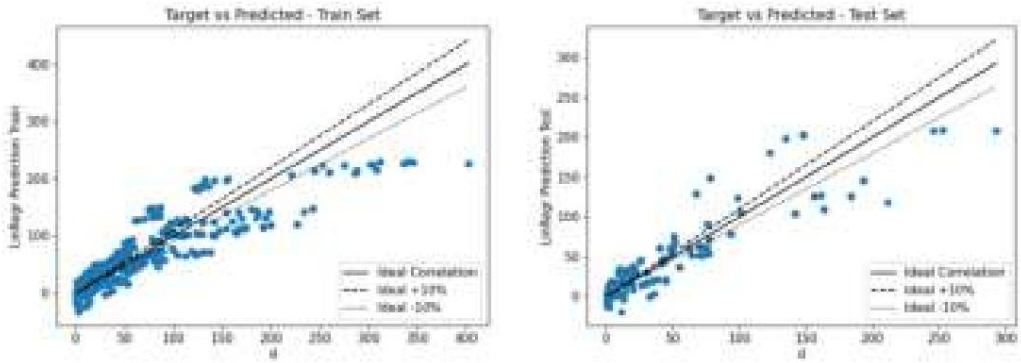
(a) (b)

Figura 17. Matriz de correlación de (a) conjunto de datos de deflexión a mitad del tramo y (b) conjunto de datos de carga de falla.

7. Capacitación y pruebas de aprendizaje automático

d 2.9147 10E 08 Esta sección 6.085 10 7.153
describe cómo se aplicaron numerosos algoritmos de ML para crear
8.6569 10 6.7409 10 4.496 10
fórmulas que pueden superar los métodos analíticos actuales utilizados para estimar la deflexión de
1.1562 10 1.1261 5.1585 10
vigas en I de acero curvadas horizontalmente. Los algoritmos de ML considerados fueron de regresión lineal.
6.87948 10
(LR), regresión polinomial con ajuste de hiperparámetros (POLYREG-HYT), artificial profundo
redes neuronales con MPI, Horovod y ajuste de hiperparámetros (DANN-MPIH-HYT),
d 1.10850 10 5.54753 2.59341 10 y aumento de gradiente extremo con
ajuste de hiperparámetros y validación cruzada (XGBoost-HYT-CV) [14]. Cabe señalar aquí que para los análisis ML
8.71342 10 4.36940 10 3.72902 10 7.64167
realizados, el 85% del conjunto de datos
10 4.14113 10 1.20492 10 se usó para entrenar el algoritmo ML y el 15%
se usó para pruebas. El rendimiento del aprendizaje automático
2.10080 10 2.36217 10 8.06401 10
para cuantificar la precisión, se consideraron numerosas métricas de error.
3.01987 10 1.61891 2.78160 10
Las métricas de error consideradas en este trabajo de investigación fueron el error porcentual absoluto medio
3,98564 10 4,35591 10 6,98688 10 (MAPE), el error porcentual medio absoluto medio
(MAMPE), el error absoluto medio 4,76077 10 9,28207 10 2,05690 10 (MAE) y el error cuadrático medio (RMSE). El coeficiente de
correlación de Pearson fue ffi 2.68695 10 1.26135 10 2.50786 10
También se considera (R) para determinar la similitud entre el PV (valor predicho) y el
8,68248 10 6,78638 10 1,03722 10 VD (variable dependiente). Se puede encontrar una discusión
en profundidad sobre las métricas de error en [23].
1.76647 10 3.55305 10
9.13425 10 1.87704 10 7.1. 8.00661 10
Modelos predictivos propuestos para el caso de deflexión
4.02981 10 2.62557 10 1.01188 10 Esta sección describe las predicciones de deflexión a mitad del
tramo proporcionadas por los distintos 1.18944 10 7.59868 10
algoritmos ML. Las métricas de error obtenidas numéricamente se analizaron para determinar la
rendimiento de los distintos modelos predictivos propuestos. La correlación para el tren y

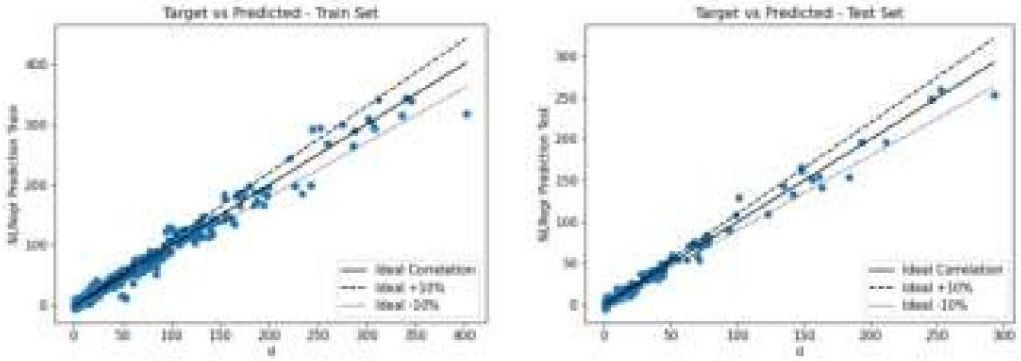
Los conjuntos de datos de prueba se pueden ver en las Figuras 18 a 21.



(a) (b)

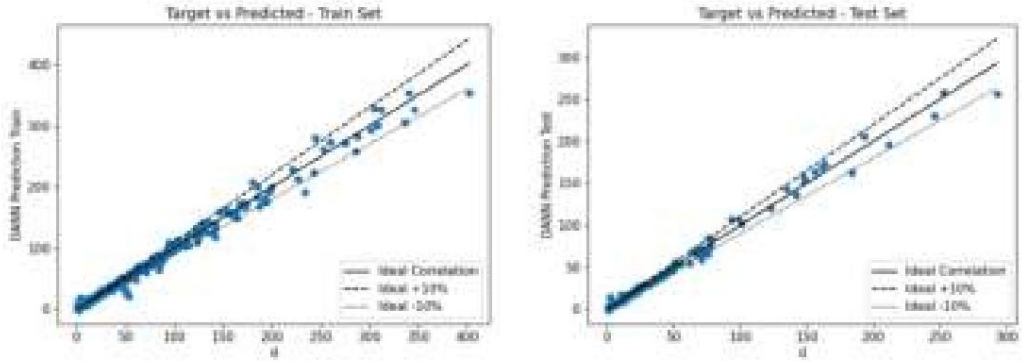
Figura 18. Correlación entre la deflexión determinada mediante FEM y la deflexión estimada
usando LR (a) en el conjunto de datos de entrenamiento y (b) en el conjunto de datos de prueba.

Machine Translated by Google



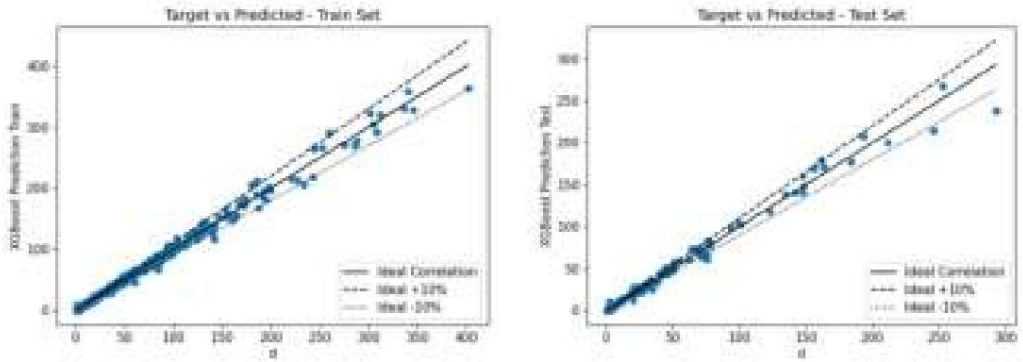
(a) (b)

Figura 19. Correlación entre la deflexión determinada mediante FEM y la deflexión estimada usando POLYREG-HYT (a) en el conjunto de datos de entrenamiento y (b) en el conjunto de datos de prueba.



(a) (b)

Figura 20. Correlación entre la deflexión determinada mediante FEM y la deflexión estimada utilizando el algoritmo DANN-MPIH-HYT (a) en el conjunto de datos de entrenamiento (b) en las pruebas.



(a) (b)

Figura 21. Correlación entre la deflexión determinada mediante FEM y la deflexión estimada utilizando el algoritmo XGBoost-HYT-CV (a) en el conjunto de datos de entrenamiento (b) en el conjunto de datos de prueba.

LR y POLYREG-HYT son los únicos algoritmos de ML considerados en este estudio que son capaz de proporcionar fórmulas de forma cerrada. La ecuación (3) muestra la fórmula generada con el algoritmo LR, que se puede utilizar para estimar la deflexión vertical del medio tramo, mientras que La ecuación (4) proporciona el modelo predictivo propuesto derivado utilizando POLYREG-HYT. Cuando Al implementar las fórmulas, todas las propiedades de la sección transversal están en mm/mm2/mm3/mm4， y el lapso está dado en m. El límite elástico se proporciona en MPa y el módulo de Young. en GPa.

Machine Translated by Google

$$d = -2{,}9147 \times 10{-}8E - 08 \times Ixx + 6{,}085 \times 10{-}6 \times Iyy + 7{,}153 \times J + 8{,}6563 \times 10{-}1 \times h - 6{,}7409 \times 10{-}1 \times b - 4{,}496 \times 10{-}2 \times A + 1{,}1562 \times 101 \times L - 1{,}1261 \times R + 5{,}1585 \times 10{-}2 \times fy - 6{,}87948 \times 10{-}2E \quad (3)$$

$$d = -1{,}10850 \times 10{-}2 \times h \times L + 5{,}54753 \times L^2 - 2{,}59341 \times 10{-}2 \times b \times L\,2 + 8{,}71342 \times 10{-}1 \times L + 4{,}36940 \times 10{-}1 \times R - 3{,}72902 \times 10{-}4 \times b^{\,2} + 7{,}64167 \times 10{-}5 \times h \times R^2 + 4{,}14113 \times 10{-}7 \times h \times A \times L + 1{,}20492 \times 10{-}1 \times R\,2 - 2{,}10080 \times 10{-}9 \times J \times L \times fy + 2{,}36217 \times 10{-}8 \times A^{\,2} \times R + 8.06401 \times 10{-}3 \times b \times L \times R - 3{,}01987 \times 10{-}5 \times A \times L \times R - 1{,}61891 \times L \times R - 2{,}78160 \times 10{-}2 \times L\,3 - 3{,}98564 \times 10{-}4 \times R^3 - 4{,}35591 \times 10{-}9 \times b \times A^{\,2} - 6{,}98688 \times 10{-}4 \times b \times R\,2 + 4.76077 \times 10{-}3 \times L \times R^2 + 9{,}28207 \times 10{-}12 \times Iyy \times b \times fy - 2{,}05690 \times 10{-}7 \times A \times R \times fy + 2{,}68695 \times 10{-}7 \times h\,3 + 1{,}26135 \times 10{-}10 \times Iyy \times R^{\,2} + 2{,}50786 \times 10{-}5 \times R2 \times y + 8{,}68248 \times 10{-}4 \times L^{\,2} \times fy + 6{,}78638 \times 10{-}11 \times Iy \times R \times fy - 1{,}03722 \times 10{-}6 \times h \times b \times fy + 1{,}76647 \times 10{-}5 \times h \times b \times R - 3{,}55305 \times 10{-}7 \times A \times E\,2 - 9.13425 \times 10{-}7 \times h \times fy^{\,2} + 1{,}87704 \times 10{-}7 \times h \times A \times E - 8{,}00661 \times 10{-}7 \times h \times A \times R + 4{,}02981 \times 10{-}6 \times h \times fy \times E - 2{,}62557 \times 10{-}4 \times L \times R \times fy - 1{,}01188 \times 10{-}2 \times I^{\,2} + 1{,}18944 \times 10{-}6 \times J \times L^{\,2} - 7{,}59868 \times 10{-}10 \times Iyy \times L \times E \quad (4)$$

Visualmente, fue difícil discernir qué algoritmo de ML funcionó mejor. Por lo tanto, Como se mencionó anteriormente, se utilizaron numerosas métricas de error para medir el desempeño de los distintos algoritmos. La Tabla 4 resume los resultados. Como puede verse, XGBoost-HYT-CV fue el modelo propuesto más preciso al observar el conjunto de datos de entrenamiento, mientras que cuando Al comparar las métricas de error obtenidas del conjunto de datos de prueba, ese no fue el caso. El Se descubrió que el modelo predictivo propuesto por DANN-MPIH-HYT era ligeramente más preciso. Él También cabe señalar que, aunque DANN-MPIH-HYT fue el más preciso en el En la fase de prueba, este algoritmo requirió el tiempo de cálculo más largo (27 veces más lento).

Tabla 4. Comparación de los algoritmos de ML entrenados en el conjunto de datos de deflexión.

Modelo	Conjunto de datos	R	MAPA	MAMPE	MAE	RMSE	Cálculo Tiempo (s)
LR	Tren	0.8934	225,93%	45,08%	17.6614	25.6709	0.0013
POLYREG-HITO	Tren	0.9874	69,91%	13,90%	5.4447	9.0447	10.91
DANN-MPIH-HYT	Tren	0.9950	39,64%	7,59%	2.9731	5.7272	2019.76
XGBoost-HYT-CV	Tren	0.9968	22,97%	5,92%	2.3199	4.5566	75,27
LR	Prueba	0.9064	168,22%	39,74%	17.1810	24.4716	0.00
POLYREG-HITO	Prueba	0.9905	70,38%	12,49%	5.3997	7.9865	0.00
DANN-MPIH-HYT	Prueba	0.9950	35,82%	8,04%	3.4776	5.8759	0.0004
XGBoost-HYT-CV	Prueba	0.9922	23,89%	8,44%	3.6504	7.2498	0.0033

Al final, resultó evidente que se pueden crear fórmulas precisas utilizando algoritmos de aprendizaje automático . Una sección posterior de este artículo compara estos resultados con datos fuera de la muestra, además validar la capacidad de los modelos predictivos propuestos para capturar resultados desconocidos.

Se realizaron análisis de sensibilidad en cada una de las variables independientes para determinar qué variable afectó más a la variable dependiente. Esto ayudará a futuros estudios. para determinar qué variables excluir para aumentar la eficiencia en la propuesta modelos predictivos. Este análisis también proporciona a los ingenieros una comprensión más profunda de

Machine Translated by Google

El comportamiento de vigas en I de acero curvadas horizontalmente. La Figura 22 resume los hallazgos del análisis de sensibilidad. Como se puede observar, las tres variables más influyentes en la deflexión vertical en la mitad del vano fueron la longitud curva (L), el momento de inercia alrededor del eje menor (Iyy) y el radio de curvatura (R). L fue, con diferencia, la variable más influyente, según los resultados obtenidos. El área de la sección, el ancho de la sección y la altura de la sección prácticamente no tuvieron impacto en la deflexión de la mitad del vano, según el análisis de sensibilidad realizado para las necesidades de este trabajo de investigación relacionadas con la deflexión de la viga.

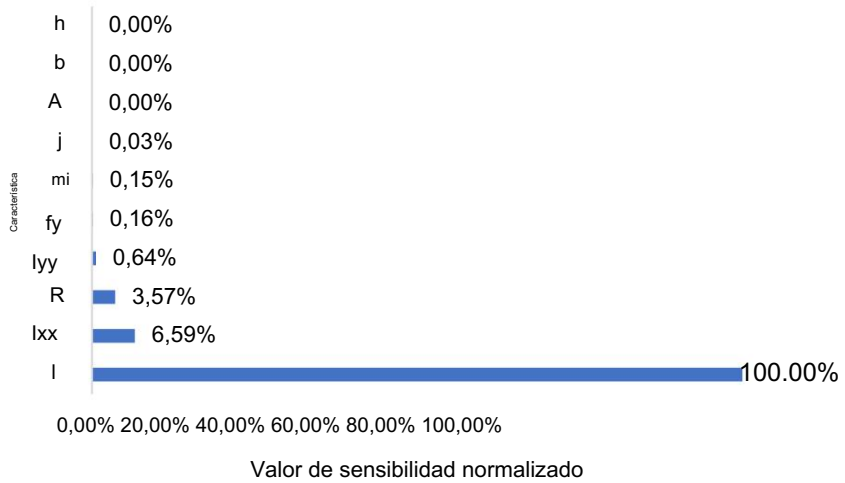


Figura 22. Resumen de los hallazgos del análisis de sensibilidad (XGBoost-HYT-CV).

Es importante mostrar aquí que los modelos predictivos no se sobreajustaron y que la solución obtenida a través del análisis ML condujo a un modelo predictivo objetivo que no se sobreajustó. Además de la validación presentada en la Sección 8, la Figura 23 muestra los historiales de validación cruzada ajustados para los algoritmos ML DANN-MPIH-HYT y XGBoost-HYT-CV Fue evidente que los algoritmos pudieron derivar modelos que se optimizaron mediante el procedimiento de entrenamiento y prueba.

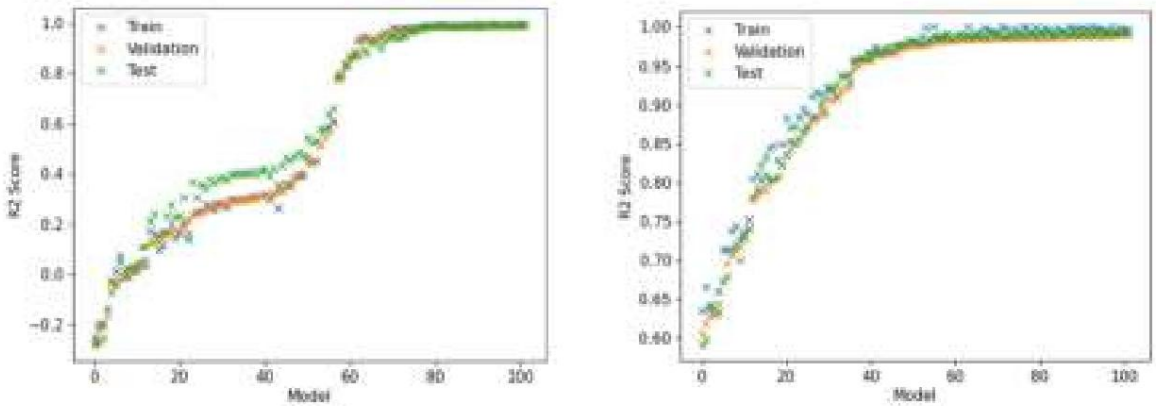


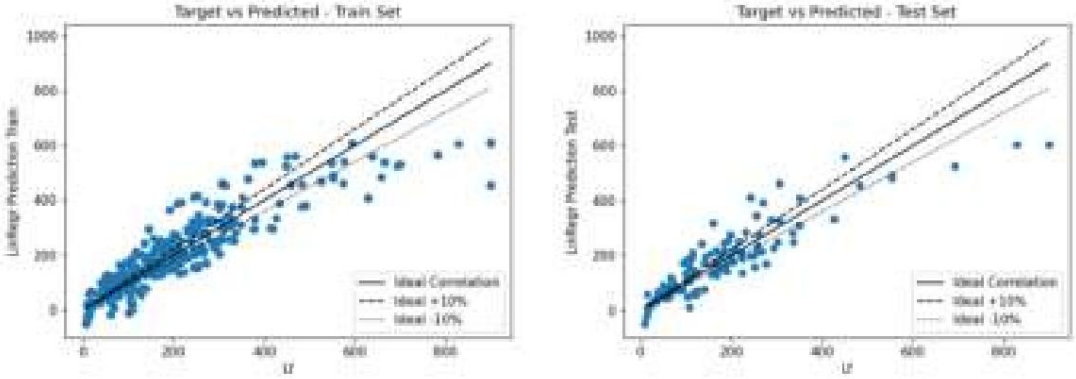
Figura 23. Caso de deflexión. Historial de validación cruzada ajustado para el caso de (a) DANN-MPIH-HYT y (b) XGBoost-HYT-CV.

7.2. Modelos Predictivos Propuestos para el Caso de Carga de Falla

Esta sección describe las predicciones de carga de fallas proporcionadas por los diversos algoritmos de ML. Se realizó un análisis para determinar el rendimiento de los distintos modelos predictivos propuestos. La correlación para los conjuntos de datos de tren y prueba se puede ver en las Figuras 24 a 27.

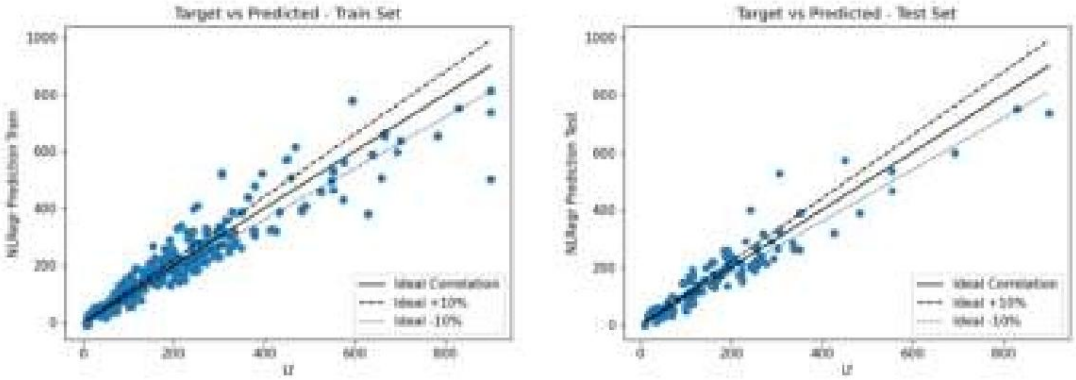
Machine Translated by Google

2,7631 10 6,0399 10 7.0583 10
2,7631 10 6,0399 10 7.0583 10
1,36958 10 2,8373 10
1,36958 10 2,8373 10



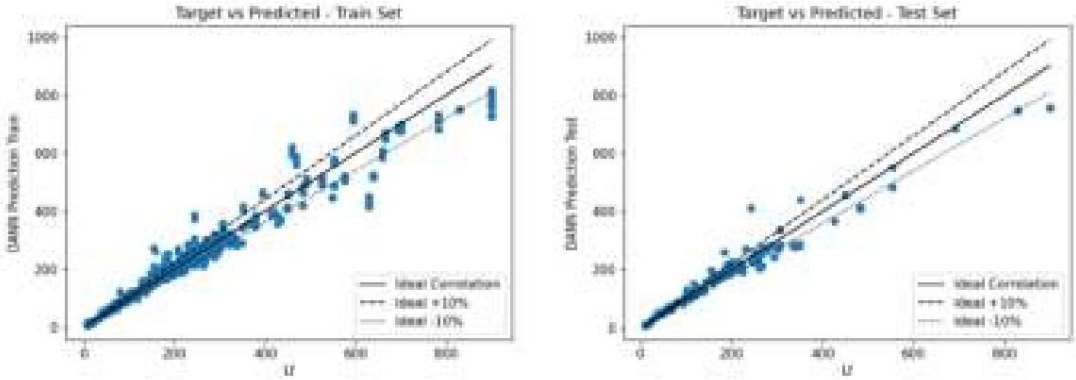
(a) (b)

Figura 24. Correlación entre la carga de falla determinada usando FEM y la carga de falla estimada usando LR (a) en el conjunto de datos de entrenamiento (b) en el conjunto de datos de prueba.



(a) (b)

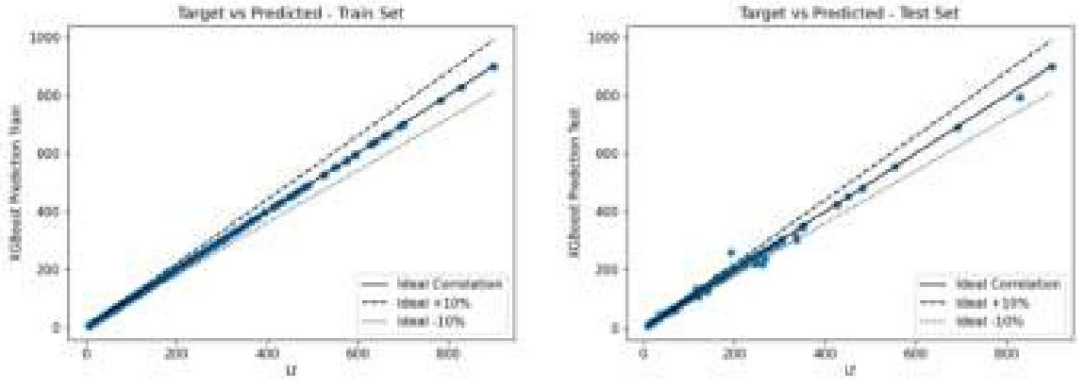
Figura 25. Correlación entre la carga de falla determinada usando FEM y la carga de falla estimada usando POLYREG-HYT (a) en el conjunto de datos de entrenamiento (b) en el conjunto de datos de prueba.



(a) (b)

Figura 26. Correlación entre la carga de falla determinada usando FEM y la carga de falla estimada utilizando el algoritmo DANN-MPIH-HYT (a) en el conjunto de datos de entrenamiento (b) en el conjunto de datos de prueba.

Machine Translated by Google



(a) (b)

Figura 27. Correlación entre la carga de falla determinada usando FEM y la carga de falla estimada utilizando el algoritmo XGBoost-HYT-CV (a) en el conjunto de datos de entrenamiento (b) en el conjunto de datos de prueba.

Como se indicó anteriormente, era necesario utilizar métricas de error para determinar qué ML El algoritmo funcionó mejor. Por lo tanto, en la Tabla 5 se puede ver un resumen de las métricas de error . Como puede verse, el modelo XGBoost-HYT-CV propuesto fue el más preciso al observar en los conjuntos de datos de entrenamiento y prueba. Esto indica el hecho de que no se utilizó ningún algoritmo de ML. capaz de proporcionar resultados precisos para todos los conjuntos de datos, y se utilizaron diferentes algoritmos en asignar el mejor ajuste a un conjunto de datos específico.

Tabla 5. Comparación de los algoritmos de ML entrenados en el conjunto de datos de carga de fallas.

Modelo	Conjunto de datos	R	MAPA	MAMPE	MAE	RMSE	Cálculo Tiempo (s)
LR	Tren	0.8939	53,64%	27,45%	54.597	76.468	0.001
POLYREG-HITO	Tren	0.9369	28,10%	19,26%	38.308	59.633	11.09
DANN-MPIH-HYT	Tren	0.9811	10,29%	8,90%	17.693	34.055	2014.47
XGBoost-HYT-CV	Tren	1.0000	0,00%	0,00%	0.0025	0.0041	75.07
LR	Prueba	0.8909	46,06%	27,56%	49.658	67.978	0.00
POLYREG-HITO	Prueba	0.9412	29,15%	20,86%	37.593	50.776	0.00
DANN-MPIH-HYT	Prueba	0.9791	10,59%	10,12%	18.241	32.1723	0.0008
XGBoost-HYT-CV	Prueba	0.9978	3,79%	2,61%	4.694	10.225	0.003

Para los casos de soluciones de forma cerrada, la Ecuación (5) muestra la fórmula generada con LR, y la Ecuación (6) proporciona la fórmula predictiva propuesta generada a través de la Algoritmo POLYREG-HYT ML:

$$Lf = 2{,}0577 \times 10{-}6 \times Ixx - 1{,}5497 \times 10{-}4 \times Iyy + 7{,}7002 \times 10{-}4 \times J + 1{,}9789 \times h{-} 8{,}2286 \times b + 2{,}1078 \times 10{-}1 \times A - 2{,}0335 \times 101 \times L + 2{,}5421 \times 10{-}1 \times R{+} 5{,}8542 \times 10{-}1 \times fy - 9{,}3538 \times 10{-}2 \times E \quad (5)$$

Machine Translated by Google

$$
\begin{aligned}
Lf = {} & 1{,}2526 \times 10{-}3 \times L \times R^{2} - 2{,}153 \times 10{-}4 \times Iyy - 1{,}455 \times 10{-}3 \times b \times A \\
& +1{,}8898 \times 10{-}5 \times h \times L \times E - 1{,}2804 \times 10{-}9 \times Ixx \times h \times L \\
& -7{,}8792 \times 10{-}5 \times h \times R^{2} + 1{,}1314 \times 10{-}11 \times Ixx \times h \times R \\
& +6{,}9077 \times 10{-}3 \times L \times fy - 1{,}9573 \times 10{-}3 \times R \times fy \\
& +1{,}6174 \times 10{-}8 \times Iyy \times L + 2{,}9069 \times 10{-}11 \times Iyy \times A \times fy \\
& +2{,}2861 \times 10{-}9 \times Iyy \times A \times L - 2{,}2406 \times 10{-}9 \times Ixx \times b \times L \\
& +3{,}1524 \times 10{-}8 \times J \times h \times fy + 3{,}8102 \times 10{-}4 \times h \times b^{2} \\
& +8{,}3911 \times 10{-}5 \times b \times R \times E - 2{,}3274 \times 10{-}6 \times J \times b \\
& -1{,}1303 \times 10{-}2 \times A \times L - 6{,}1153 \times 10{-}10 \times Iyy \times R \times E \\
& -4{,}5723 \times 10{-}4 \times b \times L \times fy - 1{,}7705 \times 10{-}11 \times J \times fy^{2} \\
& +2{,}7631 \times 10{-}3 \times f + 7{,}0583 \times 10{-}6 \times J \times L_{y}^{3} + 1{,}36958 \times 10{-}10 \times Ixx \times \\
& A - 2{,}8373 \times 10{-}9 \times J \times R \times E
\end{aligned}
\qquad (6)
$$

También se realizaron análisis de sensibilidad en el conjunto de datos de carga de falla. Un resumen gráfico de los hallazgos se puede ver en la Figura 28. Como se puede ver, las tres variables más influyentes en la carga de falla en la mitad del vano fueron el momento de inercia alrededor del eje mayor (Ixx), la longitud curva (L) y la radio de curvatura (R). Ixx fue con diferencia la variable más influyente, debido a que a medida que aumentaba la rigidez de la viga en flexión, se requería una carga mayor para llegar a la falla. El área de la sección transversal (A), el ancho del ala (b), la altura de la sección transversal (h), el momento de inercia polar (J) y el momento de inercia alrededor del eje menor (Iyy) prácticamente no tuvieron impacto en la carga de falla. según el algoritmo XGBoost-HYT-CV M
Estos hallazgos se pueden utilizar para crear un conjunto de datos mejorado y más simple en el futuro.

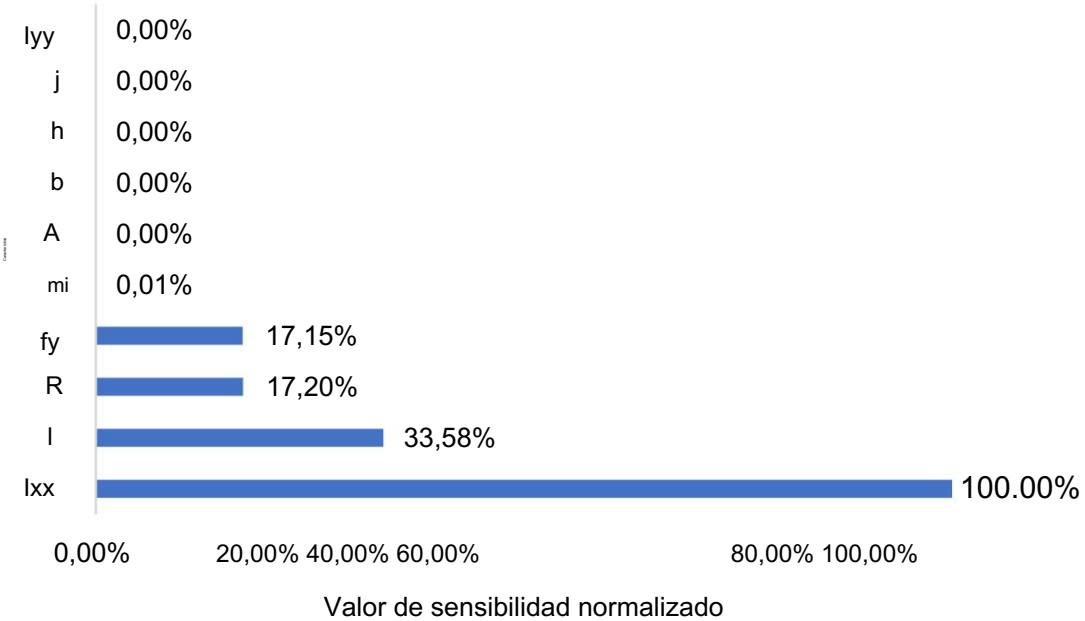


Figura 28. Resultados del análisis de sensibilidad (XGBoost-HYT-CV).

Antes de pasar a la sección de validación que se presenta a continuación, la Figura 29 muestra el historial de validación cruzada sintonizado para el caso de los algoritmos DANN-MPIH-HYT y XGBoost-HYT-CV resultantes del análisis. Una vez más, es fácil observar la respuesta numérica de las dos historias que convergen a R2 = 1,0, que representa la máxima correlación de datos.

Machine Translated by Google

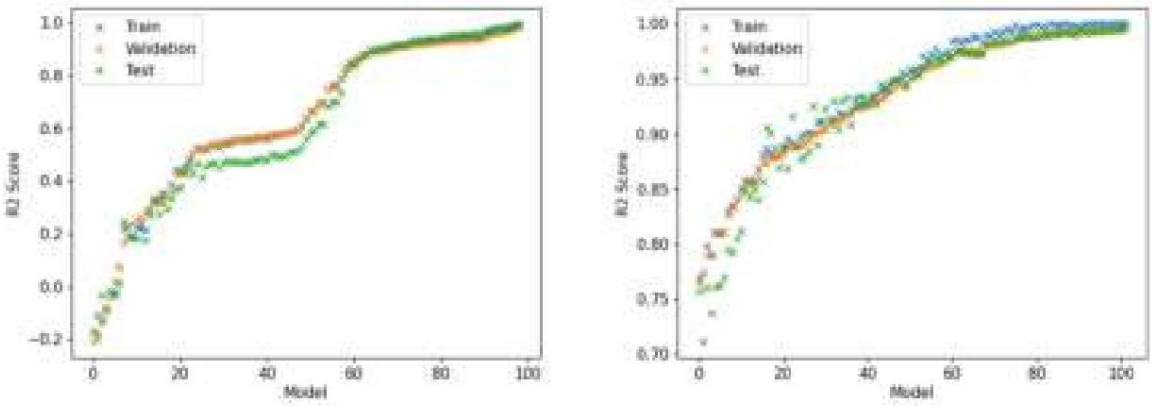


Figura 29. Caso de carga última. Historial de validación cruzada ajustado para el caso de (a) DANN-MPIH-HYT y (b) XGBoost-HYT-CV.

8. Validación

Esta sección describe el proceso de validación que se realizó mediante el uso de modelos FE fuera de muestra. La validación tuvo como objetivo evaluar el predictivo propuesto. Capacidad de los modelos para capturar datos que no se utilizaron durante el entrenamiento o las pruebas. debe Cabe señalar aquí que los algoritmos de ML se entrenaron en secciones IPE (IPE 100, IPE 200, IPE 300, IPE 400, IPE 500 e IPE 600) de varias geometrías. Para fines de validación, fue decidió utilizar secciones según el Manual de construcción en acero de Sudáfrica (SASCH). El Las secciones consideradas fueron 203 × 133 × 25, 305 × 165 × 40 y 457 × 191 × 67. Por lo tanto, Los modelos predictivos propuestos nunca habían sido expuestos a este tipo de geometría seccional. Además, se consideraron relaciones R/L fuera de muestra de 2,5 y 5 y el lapso general de la sección varió dependiendo de la profundidad de la sección. Límites elásticos fuera de muestra de Se consideraron 285 MPa y 325 MPa y los valores del módulo de Young considerados fueron 195 GPa y 205 GPa. Esto llevó a la creación de un total de 48 haces fuera de muestra para fines de validación. Las estadísticas descriptivas relacionadas con el nuevo conjunto de datos de validación se pueden visto en la Tabla 6.

Tabla 6. Estadísticas descriptivas de los modelos de validación.

	Significar	Mediana	estándar	mín.	máx.	Oblicuidad	Curtosis
Ixx (mm4)	134.333.333	85.500.000	116.928.298	23.500.000	294.000.000	0,58	−1,53
Iaa (mm4)	8.416.667	7.660.000	4.738.358	3.090.000	14.500.000	0,25	−1,53
J (mm4)	194.667	149.000	134.794	59.000	376.000	0,49	−1,53
Mmm)	320.20	303.8	103,97	203.2	453.60	0,24	−1,53
segundo (mm)	162,8	165.1	23.37	133,4	189,90	−0,15	−1,53
A (mm2)	5643.33	516	2225.95	3220	8550	0,33	−1,53
L (m)	9.17	8.5	5	3	18	0,56	−0,75
R(metro)	34.38	27,5	22.9	7.5	90	1.11	0,69
fy (MPa)	305	305	20.21	285	325	0.00	−2,09
mi (GPa)	200	200	5.05	195	205	0.00	−2,09

8.1. Validación de los resultados de ML de desviación

Los modelos predictivos propuestos que se desarrollaron para estimar la deflexión del Se utilizaron vigas para predecir las desviaciones de los datos fuera de la muestra. Esta sección se centra solo en los dos algoritmos, a saber, DANN-MPIH-HYT y XGBoost-HYT-CV, que fueron

Machine Translated by Google

Se descubrió que supera al resto de los modelos predictivos generados por ML. Los gráficos de correlación de los dos modelos ML se pueden ver en las Figuras 30 y 31. Estos resultados se compararon con el método analítico actual, el segundo teorema de Castigliano. El gráfico que muestra la correlación del segundo teorema de Castigliano se puede ver en la Figura 32.

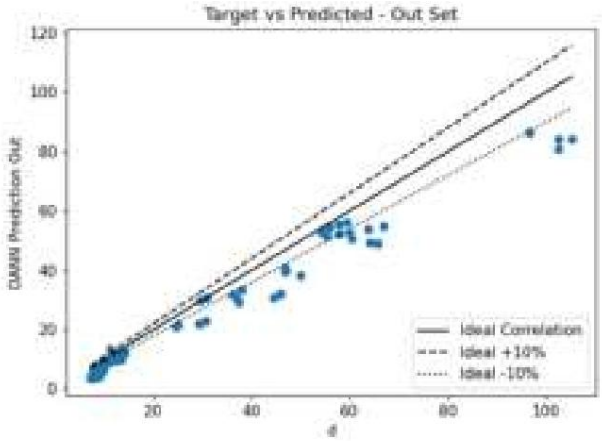


Figura 30. Correlación entre la deflexión determinada mediante FEM y la deflexión estimada utilizando DANN-MPIH-HYT en el conjunto de datos de validación.

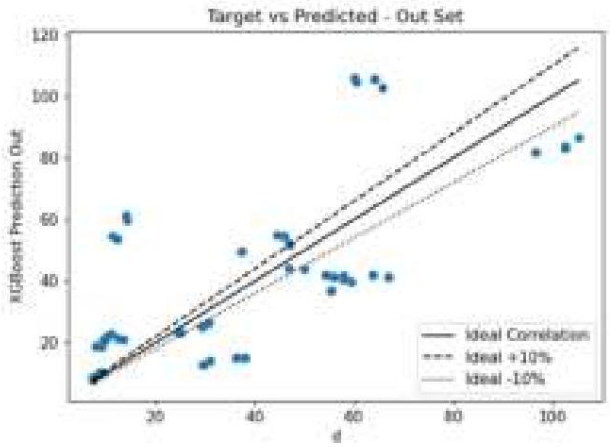


Figura 31. Correlación entre la deflexión determinada mediante FEM y la deflexión estimada mediante XGBoost-HYT-CV en el conjunto de datos de validación.

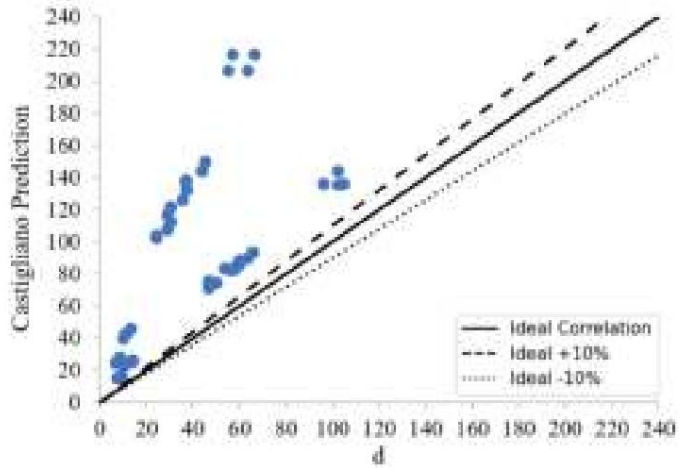


Figura 32. Correlación entre la deflexión determinada mediante FEM y la deflexión estimada mediante el teorema de Castigliano en el conjunto de datos de validación.

Machine Translated by Google

En la Tabla 7 se puede ver un resumen de las métricas de error de todos los algoritmos de ML. Como puede verse visto, el algoritmo DANN-MPIH-HYT superó a todos los algoritmos ML y el actual fórmula analítica utilizada. La fórmula POLYREG-HYT tuvo el peor desempeño. este pobre El rendimiento se atribuyó al sobreajuste, ya que la fórmula LR era bastante precisa. debería Cabe señalar que, aunque estos resultados se verificaron utilizando modelos FEM, el modelado FE La técnica utilizada se verificó experimentalmente utilizando un haz experimental donde el error experimentado fue insignificante.

Tabla 7. Resumen de las métricas de error en el conjunto de datos de validación (caso de desviación).

Algoritmo	R	MAPA	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. Validación de resultados de ML de carga fallida

Los modelos predictivos propuestos discutidos previamente se utilizaron para predecir la falla. carga de los datos fuera de la muestra. Esta sección describe los hallazgos. Sin fórmulas analíticas se analizan en esta sección, ya que el enfoque de este artículo es más en la estimación de la deflexión y no investigación del modo de falla. Debido a las complejidades asociadas con los modos de falla de vigas curvadas horizontalmente, se consultaron numerosas ecuaciones y su inclusión sería abrumar el artículo. El enfoque aquí está en DANN-MPIH-HYT y XGBoost-HYT-CV ya que se descubrió que superaban a los otros modelos predictivos. Los gráficos de correlación pueden ser visto en las Figuras 33 y 34.

Los resultados muestran una imagen diferente de lo que se vio durante el entrenamiento y las pruebas. El XGBoost-HYT-CV no pareció lograr mejores resultados que los generados con el algoritmo DANN-MPIH-HYT; sin embargo, era necesario examinar más de cerca las métricas de error. A El resumen de las métricas de error se puede ver en la Tabla 8.

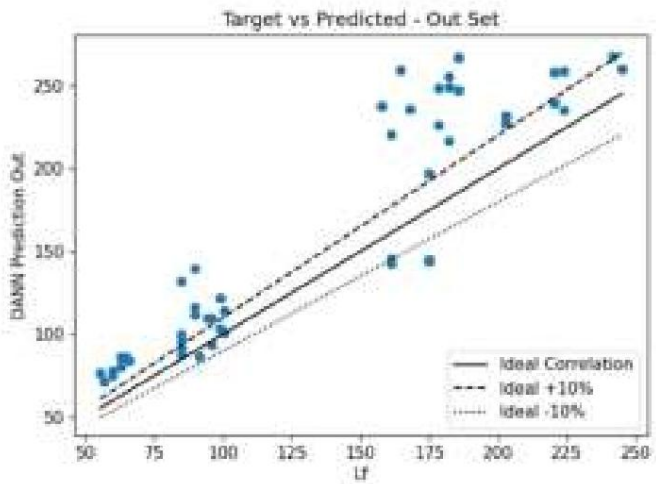


Figura 33. Correlación entre la carga de falla determinada usando FEM y la carga de falla estimada utilizando DANN-MPIH-HYT en el conjunto de datos de validación.

Machine Translated by Google

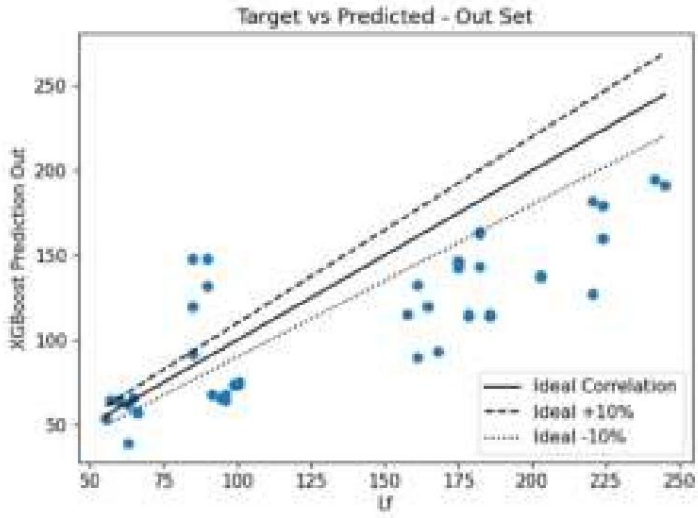


Figura 34. Correlación entre la carga de falla determinada usando FEM y la carga de falla estimada usando XGBoost-HYT-CV en el conjunto de datos de validación.

Tabla 8. Resumen de métricas de error en el conjunto de datos de validación (caso de carga fallida).

Algoritmo	R	MAPA	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

Como puede verse, la correlación fue significativamente peor y todas las métricas de error mostró que las predicciones proporcionadas a través del XGBoost-HYT-CV eran menos precisas que las predicciones proporcionadas a través del algoritmo DANN-MPIH-HYT. Esto es lo mismo fenómeno como se experimentó en el conjunto de datos de deflexión donde el DANN-MPIH-HYT El algoritmo funcionó mejor con los datos fuera de la muestra en comparación con todos los demás ML. algoritmos. Por lo tanto, la duración extendida requerida para entrenar el DANN-MPIH-HYT Se puede decir que el algoritmo se traduce en una mayor precisión durante la validación.

9. Conclusiones y recomendaciones

Este estudio demostró que el modelado FE fue capaz de replicar los resultados experimentales. adquirido con vigas en I de acero curvadas horizontalmente. Para las necesidades de este trabajo de investigación, se Se realizó un experimento que implicó la carga de una viga en I de acero curvada IPE100. bajo una carga vertical. Los datos experimentales obtenidos se utilizaron luego para validar números. modelos mediante el uso del software CivilFEM. El uso de elementos finitos sólidos cuadráticos con un tamaño de malla hexaédrico de 50 mm, así como modelos constitutivos de materiales apropiados combinado con análisis no lineales condujo a los resultados más precisos en comparación con el datos experimentales.

Se realizó una investigación paramétrica en la que se observó que el modelado FE La técnica descrita en este trabajo de investigación fue capaz de estimar con precisión el tramo medio. Deflexión y rotación de vigas en I de acero curvadas horizontalmente. El MAE se destacó en 3.32% al estimar la deflexión y el 9,17% al estimar la rotación, lo que superó con creces métodos analíticos, que tuvieron un error del 19,80% al estimar la deflexión y del 16,07% al estimar la rotación.

El modelo validado experimentalmente se utilizó luego para desarrollar numerosas mallas FE. que fueron analizados bajo condiciones de carga en estado límite último. Los obtenidos numéricamente Los resultados se utilizaron para desarrollar un gran conjunto de datos. Se crearon un total de 864 modelos que

Machine Translated by Google

abarcaba toda la lista de secciones transversales de IPE (IPE100 a IPE600). En este estudio se consideraron un total de 10 variables independientes .

Se utilizaron numerosos algoritmos de ML, a saber, LR, POLYREG-HYT, DANN-MPIH- HYT y XGBoost-HYT-CV, para desarrollar los modelos predictivos propuestos. Durante la fase de validación, se crearon modelos FE validados experimentalmente que estaban fuera del conjunto de datos de entrenamiento para validar los diversos modelos predictivos propuestos en este trabajo de investigación. Para evaluar más a fondo la precisión de los métodos analíticos disponibles para calcular la deflexión y la carga última de vigas en I de acero curvadas, los datos de validación se utilizaron para evaluar también las fórmulas analíticas de Castilgiano. Según los hallazgos numéricos, el algoritmo DANN-MPIH-HYT fue el más preciso para estimar tanto la deflexión como la carga de falla. Al estimar la deflexión, el modelo predictivo propuesto por DANN-MPIH-HYT tuvo un MAMPE de 16,19%. Se descubrió que esto era una mejora significativa en comparación con el método analítico, el segundo teorema de Castigliano, que derivó un MAMPE extremadamente grande del 126,23%, lo que destaca la necesidad de modelos predictivos más precisos y objetivos. También es seguro concluir que, según los hallazgos de esta disertación, los modelos predictivos generados por ML propuestos son mucho más precisos que los métodos analíticos actuales para estimar la deflexión de vigas en I de acero curvadas.

Además de lo anterior, al estimar la carga de falla de vigas en I de acero curvadas, se encontró que el modelo generado por DANN-MPIH-HYT era significativamente más preciso que los otros modelos propuestos. Lo más probable es que esto se deba a las complejidades asociadas con las vigas en I de acero curvadas horizontalmente y a la naturaleza de los conjuntos de datos. Las vigas en I de acero curvadas horizontalmente tienen varios modos de falla, dado que pueden fallar debido a flexión, torsión, corte o una combinación de estos. Las vigas también pueden fallar debido al pandeo lateral por torsión. Por lo tanto, se requiere un conjunto de datos más grande para que los algoritmos ML deriven los patrones que están conectados a los modos de falla de las vigas. En esta etapa, la literatura internacional incluye numerosas ecuaciones para cada uno de los modos de falla. Por lo tanto, no existe una fórmula individual con la que comparar las estimaciones. Se cree que el algoritmo DANN-MPIH-HYT, que dio como resultado un MAMPE del 22,42 %, se puede mejorar aún más en el futuro aumentando el conjunto de datos o proporcionando diferentes fórmulas para los distintos modos de fallo, como es el caso actualmente en todos los casos. códigos de diseño.

Finalmente, este estudio de investigación puede proponer, por primera vez en la literatura internacional, modelos predictivos precisos y objetivos que superan cualquier fórmula conocida utilizada para calcular la deflexión de vigas en I de acero curvadas y su capacidad máxima. También se desarrollaron los conjuntos de datos más grandes actualmente disponibles en la literatura internacional para el entrenamiento y prueba de los modelos predictivos propuestos. Este proyecto piloto allana el camino para el desarrollo de futuras fórmulas de diseño que puedan aplicarse con mayor precisión a una gama más amplia de vigas para diferentes condiciones de contorno.

Esta investigación se limitó a evaluar la viabilidad de utilizar modelos FE para estimar la deflexión en la mitad del tramo y la carga de falla de vigas en I de acero curvadas horizontalmente con una carga puntual única en la mitad del tramo y completamente fijadas en ambos extremos. El desarrollo de los conjuntos de datos previó el uso de características geométricas mínimas y máximas. Por lo tanto, los modelos predictivos propuestos no deben usarse para vigas con dimensiones mayores o menores que los valores geométricos máximos y mínimos respectivos de las vigas que se encuentran en los conjuntos de datos desarrollados en este documento. Además, las recomendaciones para el trabajo futuro deberían

incluir lo siguiente: • Realizar más experimentos en vigas en I de acero curvadas para validar aún más los modelos

predictivos propuestos; • Considere diversas condiciones de contorno, como vigas con pasadores torsionales, y determine la influencia que esto tiene en la deflexión, la carga de falla, la rotación y la distribu En teoría, esto no debería afectar significativamente la carga de falla. Sin embargo, se espera que esto tenga un impacto drástico en la distribución de tensiones y la rotación de la sección;

• Considere diversas condiciones de carga, como cargas distribuidas uniformemente; •

Considere el impacto que tienen las tensiones residuales en la distribución de tensiones e investigue si esto tiene un impacto en la deflexión y las cargas de falla. Las tensiones residuales están lejos

Machine Translated by Google

mayor en vigas en I de acero curvadas horizontalmente en comparación con vigas rectas, debido al proceso inicial de conformado en frío. Por lo tanto, las tensiones residuales varían dependiendo de la relación R/L disponible. Actualmente, no existe una fórmula disponible en la literatura internacional que permita contabilizar cómo varían los esfuerzos residuales a lo largo de la viga y dentro de la sección transversal. Por lo tanto, se requiere una investigación detallada. •
Desarrollar una fórmula precisa para determinar la rotación media del vano de vigas en I de acero curvadas horizontalmente utilizando un conjunto de datos relevante.

Contribuciones de los autores: Conceptualización, GM y EA; Metodología, GM, EA y SS; Software , EA y GM; Validación, EA y GM; Análisis Formal, EA; Investigación, EA; Recursos, GM y EA; Curación de datos, EA; Escritura: preparación del borrador original, EA; Escritura: revisión y edición, GM y SS; Visualización, EA y GM; Supervisión, GM y SS; Administración de Proyectos , GM; Adquisición de fondos, EA y GM Todos los autores han leído y aceptado la versión publicada del manuscrito.

Financiamiento: Esta investigación fue financiada por el Fondo Nacional de Investigación (NRF Sudáfrica [MND21062361 5086]) y el APC fue financiado por la revista.

Declaración de disponibilidad de datos: los conjuntos de datos que se desarrollaron para las necesidades de este trabajo de investigación se pueden encontrar a través del siguiente enlace (https://github.com/nbakas/nbml/tree/a0d27c94dd59068 8815180ebf6428963a24ca245/conjuntos de datos, consultado el 1 de julio de 2024).

Conflictos de intereses: Los autores declaran no tener ningún conflicto de intereses.

Referencias

1. Liew, JR; Thevendran, V.; Shanmugam, N.; Tan, L. Comportamiento y diseño de vigas de acero curvadas horizontalmente. J. Constr. Res. de acero. 1995, 32, 37–67. [Referencia cruzada]
2. Sonck, D.; Van Impe, R. Estudio de tensiones residuales en miembros de sección I y miembros celulares. En las actas del Anual Stability Conference Structural Stability Research, St. Louis, MO, EE. UU., 16 a 20 de abril de 2013.
3. Rossini, N.; Dassisti, M.; Benyounis, K.; Olabi, A.-G. Métodos de medida de tensiones residuales en componentes. Madre. Des. 2012, 35, 572–588. [Referencia cruzada]
4. Rey, C.; Brown, D. Diseño de acero curvado; Steel Construction Institute Ascot: Ascot, Reino Unido, 2001. 5. Rettie, Nueva Jersey Resistencia al pandeo por torsión lateral de vigas en I de acero curvadas horizontalmente. Tesis de maestría, Universidad de Alberta, Edmonton, AB, Canadá, 2015.
6. Dowsell, B. Guía de diseño 33: Diseño de miembros curvos; Instituto Americano de Construcción en Acero: Chicago, IL, EE. UU., 2018.
7. Lee, K.; Davidson, JS; Choi, J.; Kang, Y. Resistencia máxima de vigas en I de acero curvadas horizontalmente con momentos finales iguales. Ing. Estructura. 2017, 153, 17–31. [Referencia cruzada]
8. Wong, Y.-C. Análisis y diseño de vigas curvadas horizontalmente. Tesis de maestría, Universidad Estatal de Oregon, Corvallis, OR, EE. UU., 1969.
9. Dahlberg, T. Procedimiento para calcular deflexiones de vigas curvas. Int. J. Ing. Educativo. 2004, 20, 503–513.
10. Shanmugam, N.; Thevendran, V.; Liew, JR; Tan, L. Estudio experimental sobre vigas de acero curvadas en planta. J. Estructura. Ing. 1995, 121, 249–259. [Referencia cruzada]
11. Shanmugam, N.; Mahendrakumar, M.; Thevendran, V. Comportamiento de carga última de vigas de placa curvadas horizontalmente. J. Constr. Res. de acero. 2003, 59, 509–529. [Referencia cruzada]
12. Dabaon, M.; El-Naggar, M.; Yossef, N. Estudio experimental y teórico de vigas compuestas curvas, laminadas y almenadas. Alex. Ing. J. 2003, 42, 219–230.
13. Lim, J.; Kang, YJ; Lee, J.; Kim, S.; Lee, K. Estudio experimental y analítico de vigas en I curvadas horizontalmente sometidas a momentos finales iguales. Metales 2021, 11, 1132. [CrossRef]
14. Markou, G.; Bakas, N.; Papadrakakis, M.; Chatzichristofis, S. Un marco general de algoritmos de aprendizaje automático de alto rendimiento : aplicación en mecánica estructural. Computadora. Mec. 2024, 73, 705–729. [Referencia cruzada]
15. Gravett, DZ; Mourlas, C.; Taljaard, V.-L.; Bakas, N.; Markou, G.; Papadrakakis, M. Nuevas fórmulas de período fundamental para la interacción de estructuras de hormigón armado con suelo utilizando algoritmos de aprendizaje automático y RNA. Din. del suelo. Tierraq. Ing. 2021, 144, 106656. [Referencia cruzada]
16. Markou, G.; Bakas, NP Predicción de la capacidad de corte de vigas esbeltas de hormigón armado sin estribos mediante la aplicación de algoritmos de inteligencia artificial en una gran base de datos de vigas generadas mediante análisis de elementos finitos no lineales 3D. Computadora. Concr. 2021, 28, 433–447.
17. Al-Hamaydeh, M.; Markou, G.; Bakas, N.; Papadrakakis, M. Capacidad de corte basada en IA de vigas profundas de hormigón armado con FRP sin estribos. Ing. Estructura. 2022, 264, 114441. [Referencia cruzada]
18. Calitz, D.; Markou, G.; Bakas, N.; Papadrakakis, M. Desarrollo de fórmulas de período fundamental para estructuras con estructura de acero mediante aprendizaje automático y algoritmos automatizados. En Actas del Compdyn 2023, Atenas, Grecia, 12 a 14 de junio de 2023.

Machine Translated by Google

19. Chibaya, Vermont; Markou, G.; Bakas, N. Desarrollo de fórmulas para las rotaciones de secciones debidas a la flexión de vigas en I de acero curvadas mediante algoritmos Ai y Ml. En Actas del Compdyn 2023, Atenas, Grecia, 12 a 14 de junio de 2023.
20. van der Westhuizen, AM; Bakas, N.; Markou, G. Desarrollo de un modelo de red neuronal artificial que predice el período fundamental de las estructuras de acero utilizando un gran conjunto de datos. En Actas del Compdyn 2023, Atenas, Grecia, 12 a 14 de junio de 2023.
21. Ababú, E.; Markou, G.; Bakas, N. Uso del aprendizaje automático y el modelado de elementos finitos para desarrollar una fórmula para determinar la deflexión de vigas en I de acero curvadas horizontalmente. En Actas de la 14.ª Conferencia Internacional sobre Agentes e Inteligencia Artificial, virtual, 3 a 5 de febrero de 2022; págs. 958–963. [Referencia cruzada]
22. Aminu, IM; Shariff, MNM Orientación estratégica, acceso a la financiación, entorno empresarial y desempeño de las PYME en Nigeria: Cribado de datos y análisis preliminar. euros. J. Autobús. Gestionar. 2014, 6, 124-132.
23. Dimopoulos, T.; Tyralis, H.; Bakas, NP; Hadjimitsis, D. Medición de precisión de bosques aleatorios y regresión lineal para modelos de tasación masiva que estiman los precios de apartamentos residenciales en Nicosia, Chipre. Adv. Geociencias. 2018, 45, 377–382. [Referencia cruzada]

Descargo de responsabilidad/Nota del editor: Las declaraciones, opiniones y datos contenidos en todas las publicaciones son únicamente de los autores y contribuyentes individuales y no de MDPI ni de los editores. MDPI y/o los editores renuncian a toda responsabilidad por cualquier daño a personas o propiedad que resulte de cualquier idea, método, instrucción o producto mencionado en el contenido.

Machine Translated by Google

cálculo

MDPI

Artículo

Modelado del impacto de la heterogeneidad del almacenamiento en la nube en HPC Rendimiento de la aplicación

Jack Márquez y Oscar H. Mondragón

Facultad de Ingeniería, Universidad Autónoma de Occidente, Cali 760030, Colombia; jdmarquez@uao.edu.co
* Correspondencia: ohmondragon@uao.edu.co

Resumen: La comunidad de investigación de HPC ha propuesto recientemente trasladar aplicaciones de computación de alto rendimiento (HPC) de clústeres de HPC a clústeres de computación en la nube, también conocidos como nube de HPC . Migrar estas aplicaciones del primer entorno al segundo puede tener un impacto importante en su rendimiento, debido a las diferentes tecnologías utilizadas y al uso y configuración subóptimos de los recursos de la nube, como el almacenamiento heterogéneo. Se pueden aplicar modelos probabilísticos para predecir el rendimiento de estas aplicaciones y optimizarlas para el nuevo sistema.
Modelar el rendimiento en la nube HPC de aplicaciones que utilizan almacenamiento heterogéneo es una tarea difícil debido a las variaciones en el rendimiento. Este artículo presenta un modelo novedoso basado en la Teoría del Valor Extremo (EVT) para el análisis, caracterización y predicción del rendimiento de aplicaciones HPC que utilizan tecnologías de almacenamiento heterogéneas en la nube y sistemas de archivos paralelos distribuidos de alto rendimiento . A diferencia de los enfoques estándar, nuestro modelo se centra en valores extremos, capturando la verdadera variabilidad y los posibles cuellos de botella en el rendimiento del almacenamiento. Nuestro modelo se valida mediante análisis de nivel de retorno para estudiar el rendimiento de puntos de referencia científicos representativos que se ejecutan en almacenamiento en la nube heterogéneo a gran escala y arroja errores de predicción de me

Palabras clave: nube HPC; almacenamiento heterogéneo; modelado de desempeño; teoría del valor extremo

check for updates

Cita: Márquez, J.; Mondragon, OH Modelado del impacto de la heterogeneidad del almacenamiento en la nube en el rendimiento de las aplicaciones HPC. Computación 2024, 12, 150. https://doi.org/ 10.3390/computation12070150

Editor académico: Demos T. Tsahalis

Recibido: 15 de mayo de 2024
Revisado: 22 de junio de 2024
Aceptado: 11 de julio de 2024
Publicado: 19 de julio de 2024

Copyright: © 2024 por los autores. Licenciatario MDPI, Basilea, Suiza.
Este artículo es un artículo de acceso abierto. distribuido bajo los términos y condiciones de los Creative Commons Licencia de atribución (CC BY) (https:// creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

1. Introducción

La computación de alto rendimiento (HPC) se puede definir como el uso de supercomputadoras para resolver eficientemente problemas computacionales complejos [1], mientras que la computación en la nube se define como el acceso ubicuo y bajo demanda a recursos informáticos configurables [2]. Aunque estas dos tecnologías fueron inicialmente diseñadas para propósitos diferentes, los recientes intentos de integrarlas han dado lugar al nuevo concepto de nube HPC. Netto et al. [3] definió la nube HPC como "el uso de recursos de la nube para ejecutar aplicaciones HPC". De este trabajo han surgido nuevos desafíos y nuevas oportunidades.

Aproximadamente a partir de 2009, algunos usuarios de HPC comenzaron a considerar la nube como una alternativa rentable a los costosos clústeres de HPC. La idea de un modelo de negocio de pago bajo demanda que fuera flexible y proporcionara más control al cliente sobre los recursos era tentadora [4,5]. La computación en la nube permite el suministro flexible de recursos informáticos como CPU, memoria, almacenamiento, redes y unidades de procesamiento de gráficos. Estos recursos son elásticos, lo que significa que se pueden escalar según los requisitos de cada aplicación. El acceso instantáneo a los recursos computacionales puede ayudar a los usuarios a implementar o probar su aplicación cuando la necesiten [6].

La implementación de aplicaciones HPC en clústeres de computación en la nube presenta varios desafíos que aún deben resolverse. Un problema potencial tiene que ver con los sistemas de almacenamiento, ya que los clústeres de nube no utilizan los mismos tipos de sistemas de almacenamiento que los clústeres de HPC. Los sistemas de almacenamiento también pueden considerarse un problema en la adopción de sistemas en la nube para aplicaciones HPC [3,7,8]. Anticipar el rendimiento de aplicaciones a gran escala en sistemas de almacenamiento heterogéneos es un desafío. Documentación técnica sobre aspectos como el rendimiento.

Machine Translated by Google

y la latencia de las tecnologías de almacenamiento no es suficiente para predecir el rendimiento de las aplicaciones HPC, dados los impactos de múltiples fuentes de interferencia.

En este artículo, describimos un modelo estadístico basado en la teoría del valor extremo (EVT) que se puede utilizar para caracterizar y predecir el rendimiento de aplicaciones HPC que dependen de almacenamiento heterogéneo en sistemas en la nube. Nuestro artículo hace las siguientes contribuciones: • Presentamos un modelo basado en EVT para caracterizar el rendimiento de aplicaciones HPC que hacen uso de tecnologías de almacenamiento heterogéneas en sistemas de computación en la nube. • Desarrollamos un método para predecir el rendimiento de aplicaciones HPC basado en análisis de nivel de retorno con diferentes números de nodos de almacenamiento, que pueden informar a los algoritmos de almacenamiento y, por lo tanto, mejorar el rendimiento de las aplicaciones. • Evaluamos el modelo propuesto usándolo para predecir el rendimiento de aplicaciones HPC que se ejecutan en almacenamiento en la nube heterogéneo a gran escala.

Este documento está organizado de la siguiente manera: la Sección 2 describe los principales conceptos asociados con el almacenamiento heterogéneo en infraestructuras de computación en la nube, los sistemas de archivos paralelos para soportar aplicaciones HPC en la nube y la teoría del valor extremo. En la Sección 3, describimos nuestro enfoque para modelar el impacto del uso de almacenamiento en la nube heterogéneo en el rendimiento de las aplicaciones HPC, y validamos este modelo en la Sección 4 utilizando un análisis de nivel de retorno. La sección 5 describe algunos de los principales trabajos relacionados. Finalmente, presentamos conclusiones y sugerencias para trabajos futuros en la Sección 6.

2. Antecedentes

En esta sección, describimos los sistemas de almacenamiento que se utilizan actualmente en entornos de computación en la nube de uso general y mostramos cómo se pueden aprovechar de manera eficiente en HPC. Luego nos centramos en BeeGFS como una alternativa flexible y escalable para la implementación de un sistema de archivos paralelo optimizado para HPC en infraestructura de nube. Finalmente, describimos conceptos clave relacionados con el modelado del rendimiento de aplicaciones utilizando EVT.

2.1. Sistemas de almacenamiento heterogéneos en la computación en la nube

En los clústeres de computación en la nube, el rendimiento de las aplicaciones con uso intensivo de datos está limitado por las velocidades de transferencia de datos del disco, entre otros factores. Para mitigar el impacto en el rendimiento, los sistemas en la nube que ofrecen arquitecturas de almacenamiento jerárquicas y heterogéneas se están volviendo comunes. La integración de diferentes alternativas de almacenamiento como unidades de estado sólido (SSD), unidades de disco duro (HDD) o incluso RAMDISK (un bloque de RAM utilizado como almacenamiento volátil) puede mejorar el rendimiento de las aplicaciones aprovechando las características de cada una. tipo de almacenamiento [9].

La Tabla 1 presenta las tecnologías y servicios de almacenamiento ofrecidos por los tres principales proveedores de nube. Se puede observar que los proveedores de la nube ofrecen una variedad de dispositivos de almacenamiento heterogéneos, cada uno de los cuales tiene ciertas particularidades. Por ejemplo, Azure proporciona discos con alto rendimiento, alto IOPS y baja latencia (Ultra disk), pero también proporciona un disco de bajo costo con rendimiento, IOPS y latencia estándar (Standard HDD). Además de un SSD de uso general, AWS proporciona un tipo de SSD con IOPS configurables (io2-io1) y otro optimizado para la velocidad. Cada uno de estos discos está diseñado para casos especiales y ofrece diferentes capacidades, como tamaño de volumen, IOPS máximo y rendimiento máximo. GCP también proporciona diferentes tipos de discos y ofrece replicación zonal y regional, así como discos de alto rendimiento (Extreme Persistent Disk). Los tres tipos principales de servicios de almacenamiento son el almacenamiento de objetos, bloques y archivos, que utilizan los tipos de discos disponibles.

Machine Translated by Google

Tabla 1. Servicios de almacenamiento ofrecidos por los tres principales proveedores de nube.

Plataforma en la nube	Tipos de disco	Servicios de almacenamiento/sistemas de archivos
Azur	SSD prémium SSD estándar Disco duro estándar disco ultra	Almacenamiento de blobs Archivos azules Colas Mesas Discos
Servicios web de Amazon	IOPS proporcionadas por SSD-io2 SSD-io2 bloque exprés SSD-io1 SSD-gp3-Propósito general SSD-gp2 HDD-st1-Velocidad optimizada HDD-sc1-frío	T3 Tienda de bloques elásticos Sistema de archivos elástico Glaciar Puerta de enlace de almacenamiento Windows FSx Brillo FSx
Plataforma en la nube de Google	SSD-NVMe SSD disco duro Disco persistente zonal Disco persistente regional Disco extremadamente persistente	Almacenamiento en bloque: disco persistente Almacenamiento en la nube Almacenamiento estándar Almacenamiento cercano a la línea Almacenamiento en línea fría Archivo almacén de archivos

2.2. Aprovechamiento del almacenamiento heterogéneo en la nube

para HPC Los sistemas HPC modernos están diseñados para proporcionar un alto rendimiento para aplicaciones científicas al ofrecer redes de baja latencia como InfiniBand y sistemas de archivos paralelos distribuidos optimizados. LustreFS [10] y BeeGFS [11] son dos de los sistemas de archivos paralelos más utilizados en los 500 principales clústeres de HPC. Ambos sistemas paralelos se están implementando cada vez más en plataformas en la nube [11-13], con el objetivo de lograr un acceso rápido a grandes cantidades de datos en clústeres de nubes.

El uso de Lustre y BeeGFS ayuda a maximizar el proceso de escritura y lectura de grandes cantidades de datos en clústeres de nubes. En este trabajo nos centramos en el sistema de archivos paralelo BeeGFS, ya que tiene ciertas características que lo hacen especialmente adecuado para entornos de nube, como su sencilla instalación. También está disponible para diferentes distribuciones de Linux, es independiente del hardware y admite alta concurrencia. Un beneficio adicional es que no es necesario alojar el servicio de gestión en una máquina dedicada.

Sistema de archivos paralelo BeeGFS

BeeGFS es un sistema de archivos modelo cliente-servidor que se desarrolló centrándose en el rendimiento y la escalabilidad. La Figura 1 muestra la arquitectura de BeeGFS, que se compone de tres tipos de nodos: un servidor de administración, un servidor de metadatos y un servidor de almacenamiento de objetos. El servidor de gestión es el nodo encargado de la configuración del sistema de archivos BeeGFS y sus demás componentes; Por lo general, solo hay un servidor de administración en una configuración BeeGFS. El servidor de metadatos contiene el destino de los metadatos, un dispositivo de almacenamiento que lleva la estructura del sistema de archivos y los nombres de los archivos. Este servidor también gestiona índices y espacios de nombres. El servidor de almacenamiento de objetos es responsable de recibir los datos enviados desde el cliente y almacenarlos en el destino de almacenamiento de objetos (OST). Una configuración determinada de BeeGFS puede implicar una gran cantidad de OST, y BeeGFS intentará almacenar datos de manera eficiente dividiendo la carga de trabajo entre ellos.

BeeGFS fue desarrollado con instalación y administración de funciones fáciles de usar. Dos de los aspectos más importantes de esta sencilla instalación son que BeeGFS no requiere un parche del kernel y que viene con paneles gráficos de Grafana [14] . BeeGFS también tiene una función de creación de bandas, y se puede especificar el tamaño del fragmento, la cantidad de nodos de almacenamiento a usar (objetivos) y el soporte de almacenamiento heterogéneo.

Machine Translated by Google

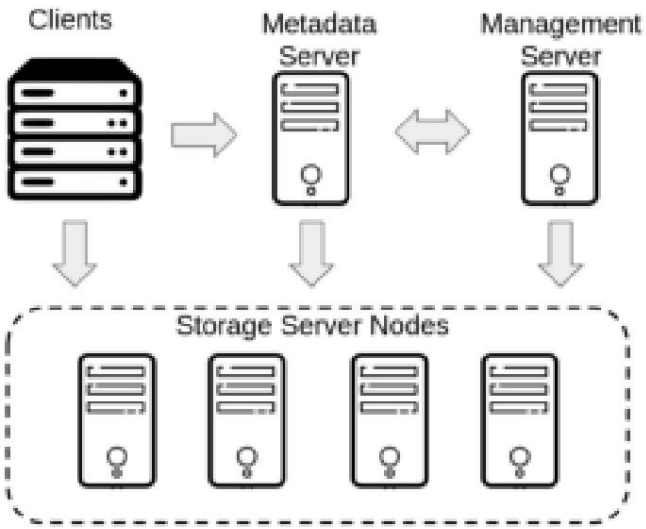


Figura 1. Arquitectura BeeGFS.

2.3. Modelado de valores extremos

EVT es un campo de la estadística que se relaciona con el comportamiento de valores excepcionales o extremos de un conjunto de variables aleatorias, es decir, aquellos que se desvían de la mediana de la distribución de probabilidad [15]. La EVT se ha aplicado en áreas como el control estadístico de calidad [16], las finanzas [17-19], el transporte [20], el estudio del contenido de calcio [21] y en hidrología para calcular la probabilidad de inundaciones en un período determinado [22- 24]. En informática, EVT se ha utilizado para predecir el rendimiento de las aplicaciones HPC [25] y el impacto de las fuentes de interferencia en el rendimiento de las aplicaciones HPC [26,27] en clústeres de HPC.

Nuestro trabajo se centra en el impacto de las acciones de almacenamiento en las aplicaciones HPC aprovisionadas en entornos de nube. Los análisis estadísticos estándar se centran en el rendimiento promedio y pueden pasar por alto valores atípicos significativos que afectan las aplicaciones HPC en entornos de nube. La teoría del valor extremo (EVT) es necesaria para modelar estos valores atípicos y proporcionar predicciones precisas de los peores escenarios de rendimiento. Medir los tiempos de ejecución extremos es crucial porque permite a EVT capturar la verdadera variabilidad del sistema. A diferencia de los métodos tradicionales centrados en promedios, la EVT da prioridad a estos valores atípicos, que pueden ser cuellos de botella ocultos o signos de problemas futuros. Al comprender estos extremos, podemos asignar recursos de manera proactiva para los picos de carga y evitar interrupciones. EVT incluso nos permite cuantificar la probabilidad de tales eventos, lo que permite diseñar sistemas con capacidad suficiente. Este enfoque en los extremos, en lugar de solo en los promedios, garantiza un suministro de recursos más confiable y eficie

La EVT se desarrolló sobre la base de los resultados del trabajo de Fisher y Tippett [28,29]. Estos autores demostraron que las distribuciones de un conjunto de variables aleatorias e independientes, distribuidas idénticamente (iid) con una distribución subyacente desconocida y valores atípicos o extremos podrían converger a una de tres posibles distribuciones asintóticas: Frechet, Gumbel o Weibull. Jenkinson [30] introdujo una distribución de valores extremos generalizados (GEV) que combinaba estas tres distribuciones. La ecuación (1) muestra la distribución acumulada (cdf) para la distribución GEV.

$$F(x|\xi, \mu, \sigma) = mi \quad -[1+\xi(\tfrac{x-\mu}{\sigma})]^{\frac{-1}{\xi}} \tag{1}$$

La ecuación (1) tiene tres parámetros: escala σ, ubicación μ y forma ξ, donde, $-\infty < \xi < \infty$, $-\infty < \mu < \infty$ y $\sigma > 0$. En esta ecuación, el parámetro de escala define la dispersión de la distribución. o la variabilidad, mientras que el parámetro de ubicación define dónde se centra la distribución en el eje real, y el parámetro de forma, también conocido como índice de valores extremos, define si la distribución es Gumbel ($\xi = 0$), Fréchet ($\xi > 0$) o distribución de Weibull ($\xi < 0$) [31] (ver Figura 2).

Machine Translated by Google

Para ajustarse a la distribución GEV, se deben obtener muestras de valores extremos de los valores medidos . Existen dos métodos comunes para llevar a cabo este proceso: picos sobre umbral (POT) y el método de bloques máximos (BMM). En el enfoque POT, se establece un umbral y se seleccionan muestras por encima de ese umbral. BMM consiste en dividir los valores medidos en bloques de tamaño n y seleccionar el valor máximo de cada bloque. BMM se ha utilizado ampliamente en hidrología, donde el tamaño del bloque se establece para obtener los parámetros GEV para la variación estacional durante varios años [22].

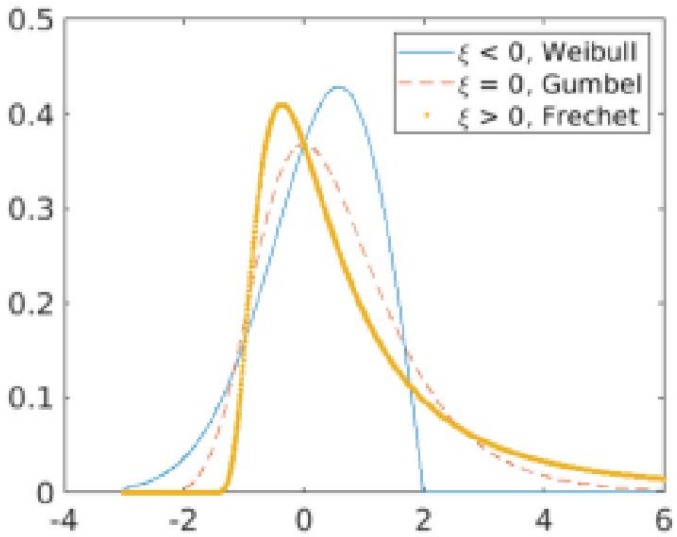


Figura 2. Función de densidad de probabilidad.

La estimación de tres parámetros se ha estudiado ampliamente en relación con el GEV [32]. Los métodos más conocidos son la estimación de máxima verosimilitud (MLE) [33] y el método de L momentos (LMOM) [34]. MLE es el método más utilizado para estimar los parámetros GEV junto con BMM. Su principal ventaja se basa en la normalidad asintótica y la estimación de parámetros cuando existe una distribución previa conocida. Según Smith [35], para establecer la propiedad asintótica de GEV y obtener estimadores adecuados, ξ debe ser un valor en el rango (−0,5, ∞). Si ξ está en el rango (−1, −0,5), se pueden obtener estimadores pero no se establece la propiedad asintótica. Finalmente, si ξ está en el rango (−∞, −1), no se pueden obtener estimadores.

Una vez determinado el modelo GEV y calculados los parámetros, es posible calcular los valores del nivel de retorno de los extremos. Un nivel de retorno se define como el valor que se excederá en promedio solo una vez por cada N muestras, o por cada N bloques de la distribución cuando se utiliza el método de máximos de bloques [36]. Podemos calcular este valor de retorno como:

$$RL = F^{-1}_{(PAG)} \quad (2)$$

En la ecuación (2), F representa la distribución GEV, y P está dada por P = 1 − 1/i, donde i, es el período de retorno, definido como el período de tiempo promedio entre eventos con el mismo valor o uno más significativo. . Históricamente, el análisis del nivel de retorno se ha aplicado con más frecuencia en ámbitos como las finanzas [37] y la hidrología [38] que en la informática [26].

3. Modelado del impacto del almacenamiento heterogéneo en la nube en el rendimiento de las aplicaciones HPC

Esta sección describe nuestro modelo estocástico propuesto para el análisis del rendimiento del almacenamiento heterogéneo y la forma en que estimamos los parámetros para este modelo, lo que nos permite explorar el impacto del almacenamiento heterogéneo en HPC. sistemas en la nu
A diferencia de enfoques anteriores, nuestro modelo aprovecha la teoría del valor extremo (EVT) para abordar la variabilidad y los extremos en el rendimiento del almacenamiento sin asumir ninguna distribución a priori de los tiempos de almacenamiento. Esta novedosa aplicación de EVT proporciona una forma más flexible

Machine Translated by Google

y una representación precisa del rendimiento del almacenamiento en sistemas distribuidos paralelos como BeeGFS, ofreciendo así nuevos conocimientos sobre la dinámica del rendimiento de las aplicaciones HPC.

3.1. Enfoque de modelado

El tiempo de almacenamiento en sistemas de archivos paralelos distribuidos como BeeGFS está dominado por el tiempo que tarda el nodo de almacenamiento más lento del clúster. Usamos EVT para modelar el rendimiento del almacenamiento de datos en este tipo de sistema. Para hacer esto, asumimos que el tiempo que tarda un sistema de archivos paralelo distribuido en almacenar cada fragmento de un archivo es iid

Usamos BMM para modelar los extremos. Los tamaños de bloque y muestra deben ser lo suficientemente grandes para obtener un buen ajuste del modelo. Se han propuesto varios métodos para probar la bondad de ajuste de un modelo [39,40]; estos estudios han presentado enfoques para la selección del tamaño de los bloques, utilizando BMM y la muestra, y también han sugerido técnicas para probar la propiedad asintótica mediante gráficos o analizando los valores resultantes de la estimación de parámetros. Describimos una regla general para probar la propiedad asintótica en la Sección 2.3.

3.2. Estimación de los parámetros del

modelo En nuestra formulación de máximos de bloque, el tamaño del bloque es el número de nodos de almacenamiento configurados en BeeGFS, y tomamos una muestra del valor del tiempo de ejecución del nodo más lento. Después de seleccionar un conjunto de máximos de bloque, necesitamos estimar los parámetros de la distribución GEV. Henwood et al. [41], sugirió un número mínimo de bloques de 60; Usamos un número de bloque de 100 y seguimos un método basado en la prueba de normalidad sugerida en [40] para determinar si los valores se distribuyen normalmente con un intervalo de confianza del 95% y evitar estimaciones insesgadas. Luego aplicamos MLE para estimar los parámetros GEV.

3.3. Predecir el rendimiento en almacenamiento heterogéneo

Predecir el rendimiento de las aplicaciones en entornos de nube es esencial para lograr un aprovisionamiento eficiente de recursos. Utilizamos análisis de nivel de retorno y nuestro modelo para predecir el rendimiento de aplicaciones científicas que utilizan infraestructura de nube a escala. Después de obtener estimaciones para los tres parámetros GEV, podemos utilizar el análisis del nivel de retorno basado en la Ecuación (2), como se describe en la Sección 2.3. En nuestro modelo, el período de retorno en la Ecuación (2) es el número de bloque utilizado en el método de máximos de bloque.

4. Validación del modelo

En esta sección, presentamos una validación de nuestro modelo propuesto utilizando puntos de referencia científicos representativos. Estudiamos el rendimiento de estos puntos de referencia que se ejecutan en almacenamiento en la nube heterogéneo y utilizamos nuestro modelo para predecir el rendimiento a escalas más grandes. Los resultados se validan frente a simulaciones y valores observados. Para recopilar los datos iniciales que se ajusten a nuestro modelo GEV, configuramos un clúster BeeGFS que consta de ocho nodos. Utilizamos un tamaño de bloque igual al número de nodos para aplicar BMM y MLE para la estimación de parámetros GE
Posteriormente, ampliamos el clúster hasta 16, 32, 64 y 128 nodos para recopilar datos de rendimiento en esas escalas y compararlos con los resultados del análisis del nivel de retorno.

4.1. Configuración

experimental Para nuestros experimentos, utilizamos nodos de CloudLab [42], un proyecto de la Universidad de Utah (Salt Lake City, UT, EE. UU.), la Universidad de Clemson (Clemson, SC, EE. UU.), la Universidad de Wisconsin Madison (Madison, WI, EE. UU.), la Universidad de Texas en Austin (Austin, TX, EE. UU.), la Universidad de Massachusetts Amherst (Amherst, MA, EE. UU.) y US Ignite (Washington, DC, EE. UU.). Cada uno de los nodos configurados tenía tres destinos de almacenamiento disponibles (RAMDISK, SSD, HDD) (consulte la Figura 3). Para estos experimentos, utilizamos nodos c220g2. Cada uno de estos nodos tenía dos CPU Intel E5-2660 v3 de 10 núcleos a 2,60 GHz (Haswell EP), 160 GB de memoria ECC (10 × 16 GB DDR4 2133 MHz RDIMM de doble rango), un Intel DC S3500 480 GB 6 G SATA SSD, dos HDD SFF SAS 6G de 1,2 TB, 10 000 RPM y un Intel X520 de doble puerto

Machine Translated by Google

Se deshabilitó la NIC de 10 Gb (PCIe v3.0, ocho carriles) y el escalado de frecuencia. El sistema operativo fue CentOs 7 con versión de kernel 3.10.0-1127.19.1.el7.x86 64.

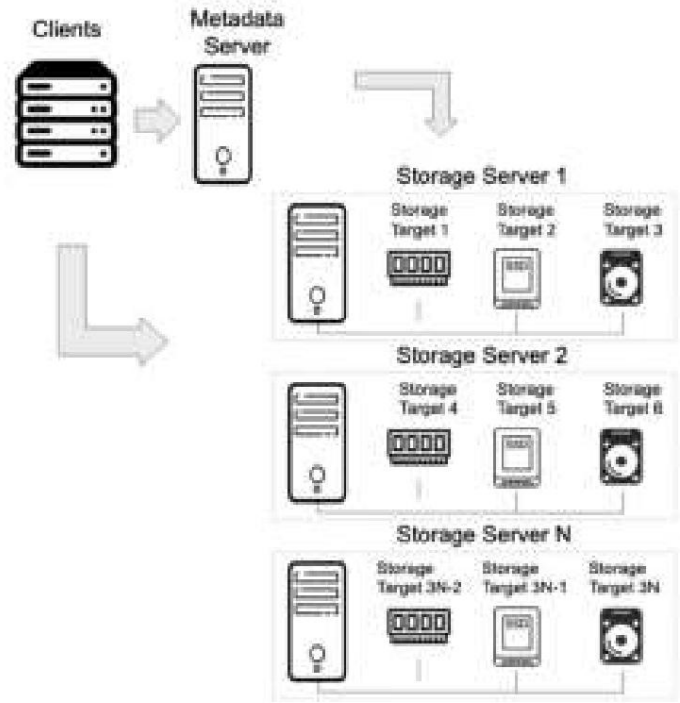


Figura 3. La arquitectura de BeeGFS.

4.1.1. Puntos de referencia

Seleccionamos varios puntos de referencia representativos (ver Tabla 2) para validar nuestro modelo. Estos benchmarks copian partes fundamentales de las aplicaciones y simulan su comportamiento:

- lozone es una herramienta utilizada para el análisis de sistemas de archivos. Incluye diferentes operaciones como escribir, leer, reescribir y releer, y permite el análisis de latencia y ancho de banda. Usamos la operación de escritura con una medición de flujo único para permitir que BeeGFS reciba todos los archivos como una sola unidad y luego los divida entre todos los nodos de almacenamiento.
- Fallocate es una función de Linux que se usa ampliamente como punto de referencia para sistemas de archivos, ya que puede preasignar nuevos espacios para archivos de un tamaño específico. Esta herramienta primero analiza si el espacio requerido es suficiente para el sistema de archivos y luego reserva ese espacio para el archivo si es necesario.
- BT fue desarrollado por NAS Parallel Benchmark (NPB) y se utiliza ampliamente para probar clústeres HPC. Resuelve un problema tridiagonal de bloques (BT) altamente configurable utilizando MPI.
- PIOS es una herramienta de prueba creada para funcionar como un simulador de E/S en sistemas de archivos. Esta herramienta simula una carga de muchos clientes que generan E/S en sistemas de archivos. Debido a su naturaleza paralela, PIOS puede escribir en el mismo archivo o en diferentes archivos al mismo tiempo, pero en este estudio se utiliza para escribir solo en un único archivo.

Tabla 2. Puntos de referencia seleccionados para el análisis de desempeño.

Punto de referencia	Árbitro.
lozono	[43,44]
fallar	[45]
BT-NPB	[46,47]
PIOS	[48]

Machine Translated by Google

4.1.2. Recopilación de datos

Para la recopilación de datos, seguimos una metodología experimental de acuerdo con las recomendaciones de [49], para evitar medidas erróneas. Algunas de las recomendaciones son sobre mantenimiento de registros, en el que recomiendan agregar etiquetas y metadatos a los datos recopilados para poder recuperarlos rápidamente y comprobarlos más tarde. Utilizamos cuatro puntos de referencia (Fallocate, Iozone, BTC y PIOS) y tres tipos de almacenamiento (RAMDISK, SSD y HDD), y dirigidos para garantizar que cada ejecución de cada punto de referencia tuviera las mismas condiciones de prueba en el clúster. Por lo tanto, desarrollamos un script para muestrear los tiempos de ejecución del nodo más lento para cada punto de referencia repitiendo cada ejecución 100 veces y recopilando todos los tiempos posibles de punto de referencia al almacenamiento en cada iteración. El proceso de comparación con el almacenamiento es el tiempo de ejecución. por nodo, en este caso el nodo más lento de nuestra configuración que almacena un dato.

4.2. Estimación de parámetros GEV

Para estimar los parámetros GEV para cada punto de referencia, utilizamos BMM y MLE con 100 bloques y un tamaño de bloque de ocho. La Tabla 3 muestra los parámetros obtenidos con este enfoque.

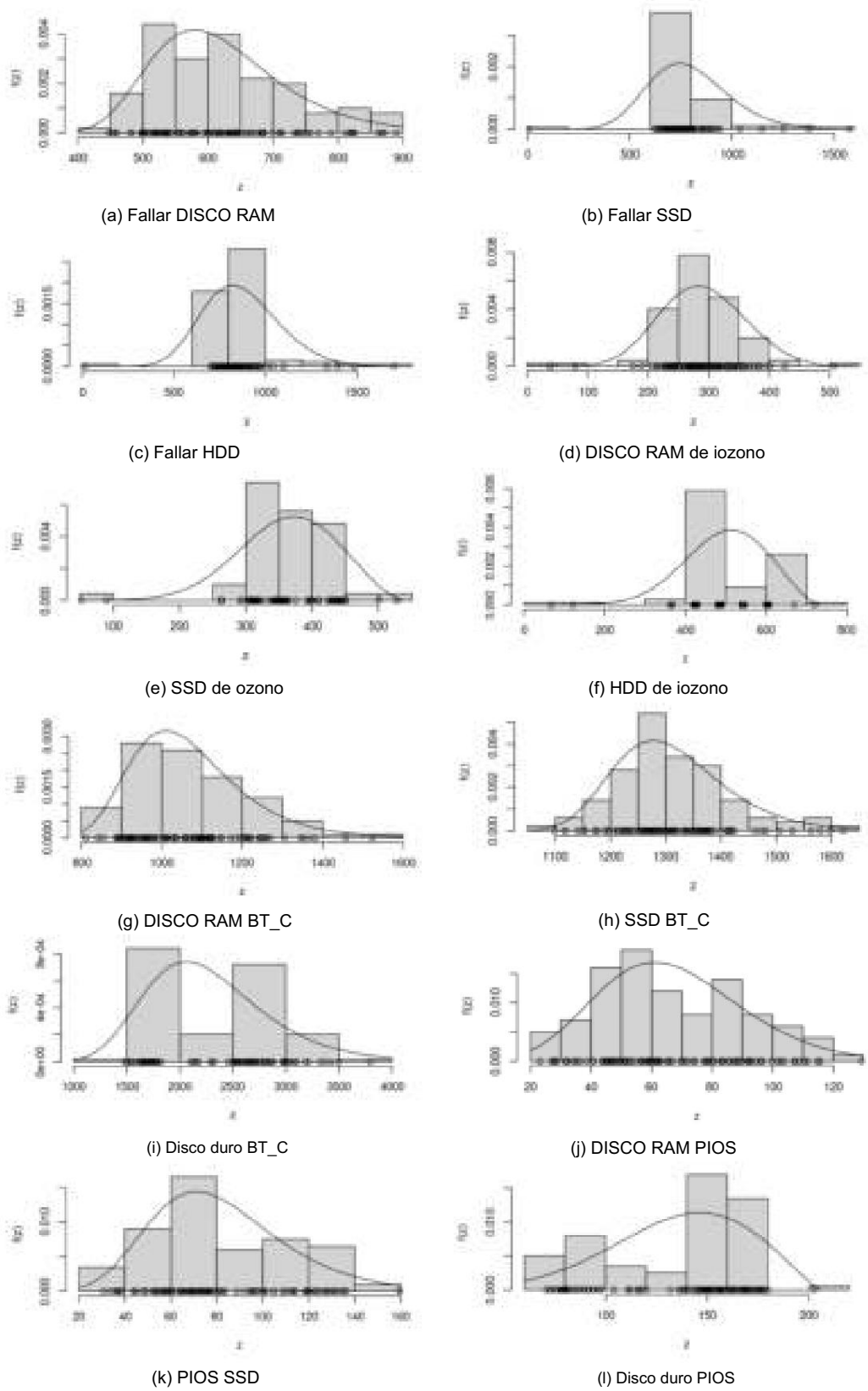
Los resultados de la Tabla 3 nos permiten determinar cuál de los tres tipos de distribuciones GEV ofrece el mejor ajuste. Los resultados indican que todas las distribuciones son la Weibull. tipo ($\xi < 0$). Los parámetros de forma en todos los casos son mayores que −0,5, cumpliendo así con los condición asintótica para la distribución GEV. Las distribuciones de tiempo de ejecución de los seleccionados. Los puntos de referencia que utilizan BeeGFS en dispositivos de almacenamiento heterogéneos muestran una cola similar, y por tanto se ajusta a una distribución de Weibull. Además, al consultar la Figura 4, podemos ver que, aunque todos están en el límite superior, BT_C en RAMDISK, BT_C en HDD y PIOS en SSD son cerca de la cola clara (Gumbel).

Tabla 3. Parámetros GEV estimados para la muestra de máximos de bloque.

	Forma (ξ)	Escala (σ) (s)	Ubicación (μ) (s)
Fallar DISCO RAM	−0,16	154,47	566,95
Fallar SSD	−0,17	177,52	711.15
Fallar disco duro	−0,17	192,99	785.41
DISCO RAM DE IOZONO	−0,22	70.03	265.10
SSD de ozono	−0,38	75,98	339,61
Disco duro de iozono	−0,39	103.81	467,63
DISCO RAM BT_C	−0,05	116,63	1006.72
BT_C SSD	−0,11	89,46	1268.03
Disco duro BT_C	−0,07	498.15	2026.47
DISCO RAM PIOS	−0,17	21,99	57,42
PIOS SSD	−0,08	25,67	69.20
PIOS HDD	−0,46	36,71	126,54

Los valores de asimetría muestran que todos los puntos de referencia excepto PIOS tienen la misma ubicación de la cola para los experimentos SSD y HDD. PIOS tiene una asimetría de cola izquierda para HDD y una asimetría de cola derecha para SSD. Este es un resultado interesante, ya que PIOS en SSD también tiene la coeficiente de variación más alto, lo que indica que este experimento tiene la mayor variación en su datos; esto genera valores más extremos, lo que hace que el proceso de predicción sea más desafiante.

Machine Translated by Google



(a) Fallar DISCO RAM (b) Fallar SSD

(c) Fallar HDD (d) DISCO RAM de iozono

(e) SSD de ozono (f) HDD de iozono

(g) DISCO RAM BT_C (h) SSD BT_C

(i) Disco duro BT_C (j) DISCO RAM PIOS

(k) PIOS SSD (l) Disco duro PIOS

Figura 4. Gráficos de densidad (en segundos) para la muestra de máximos de bloque.

4.3. Análisis de nivel de retorno

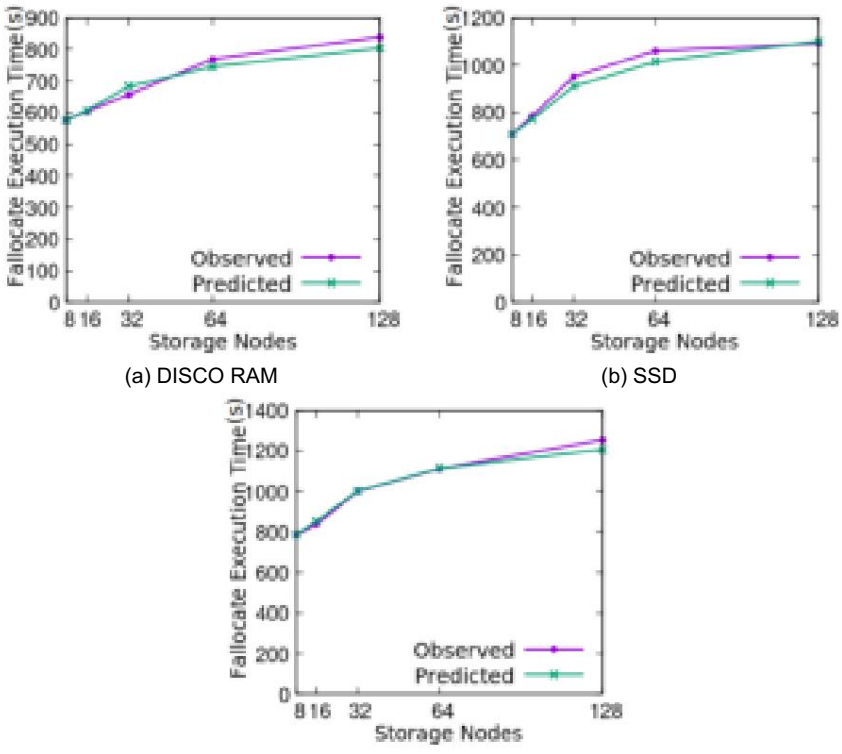
En esta sección, utilizamos el análisis del nivel de retorno para predecir el rendimiento de las aplicaciones HPC en BeeGFS. Las figuras 5 a 8 muestran el valor de retorno, calculado utilizando la ecuación (2), para 16,

Machine Translated by Google

32, 64 y 128 servidores de almacenamiento de objetos BeeGFS, respectivamente. Estas cifras presentan los resultados del análisis del nivel de retorno en comparación con los valores observados. Esto nos permite predecir el rendimiento de la aplicación a escala y compararlo con el rendimiento observado. El error de predicción más grande fue del 6,64 % y el más pequeño fue del 0,46 %, para PIOS en 64 nodos con RAMDISK y BT_C en 32 nodos con SSD, respectivamente.

Las variaciones en los niveles de retorno para 16 y 128 nodos fueron mayores para BT_C en HDD, PIOS en RAMDISK y PIOS en SSD (consulte las Figuras 7c y 8a,b), que fueron los experimentos con parámetros de forma más cercanos a cero, lo que a menudo indica una mayor variabilidad en los resultados del desempeño. Por ejemplo, la mayor variabilidad observada para BT_C en HDD podría deberse al rendimiento más lento inherente y a la mayor latencia de los HDD en comparación con los SSD o RAMDISK. De manera similar, la variabilidad del rendimiento de PIOS en RAMDISK podría verse influenciada por las diferencias en la gestión de la memoria y el manejo de datos inherentes al almacenamiento RAMDISK.

Los valores del nivel de retorno para Iozone no produjeron diferencias tan grandes como las de BT_C en HDD, PIOS en RAMDISK y PIOS en SSD (consulte la Figura 6). El comportamiento del nivel de retorno de Iozone muestra menos variabilidad que otras herramientas debido a su enfoque de medición de flujo único y la eficiente distribución de archivos manejada por BeeGFS. Esto conduce a métricas de rendimiento más consistentes, ya que la herramienta se centra en operaciones de escritura sencillas sin la complejidad adicional de los patrones de E/S paralelos como en PIOS o los gastos generales de cálculo y comunicación introducidos por BT. El diseño inherente de Iozone y su caso de uso específico en este estudio (es decir, escribir un flujo único) contribuyen a su rendimiento estable y predecible, lo que se refleja en los niveles de retorno menos variables observados en el análisis.

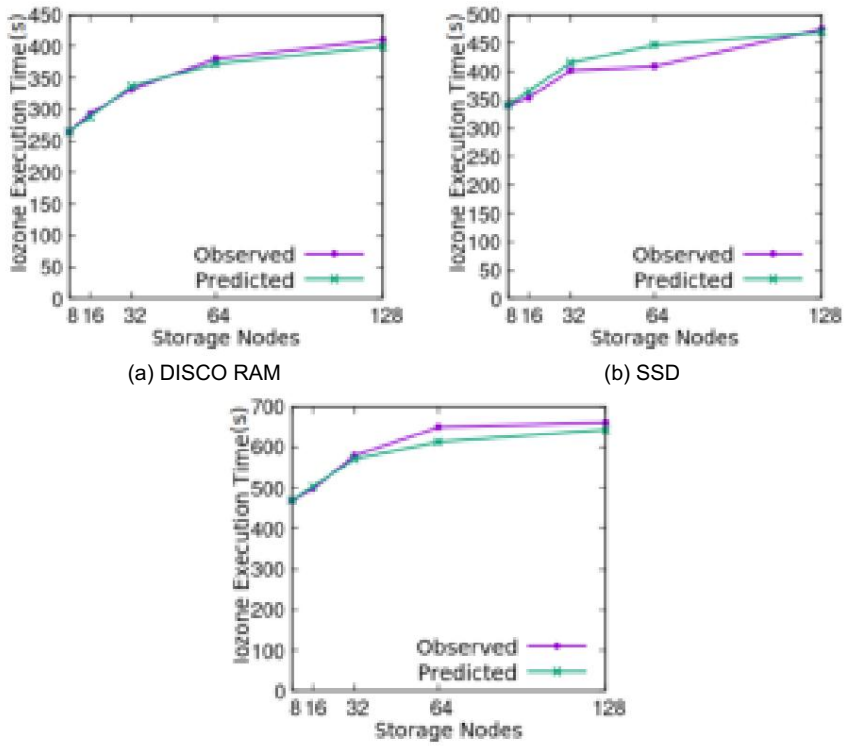


(a) DISCO RAM (b) SSD

(c) Disco duro

Figura 5. Predicción de rendimiento para Fallocate en BeeGFS utilizando almacenamiento heterogéneo.

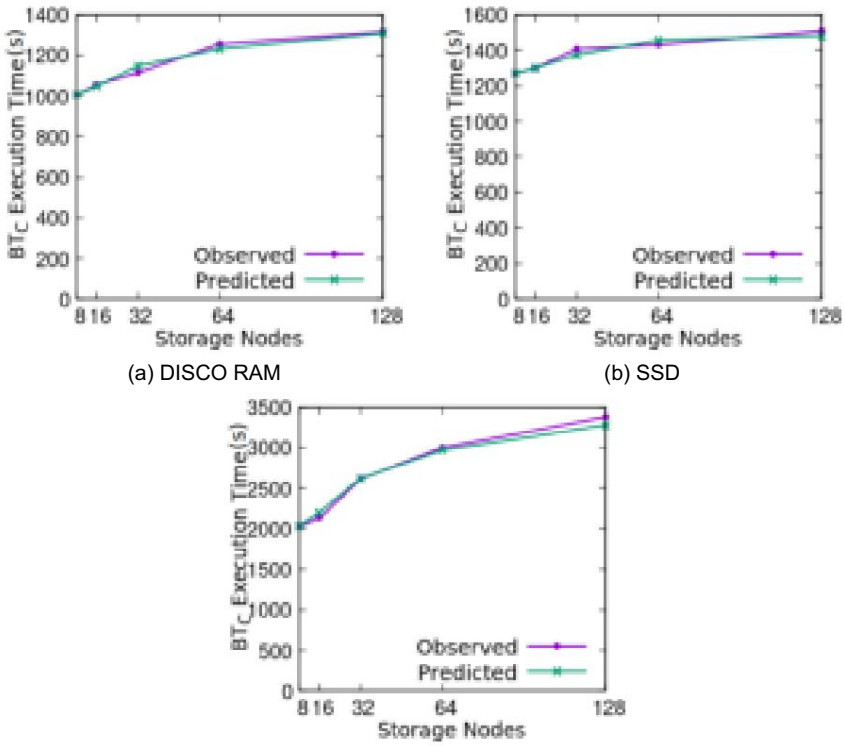
Machine Translated by Google



(a) DISCO RAM (b) SSD

(c) Disco duro

Figura 6. Predicción del rendimiento de Iozone en BeeGFS utilizando almacenamiento heterogéneo.

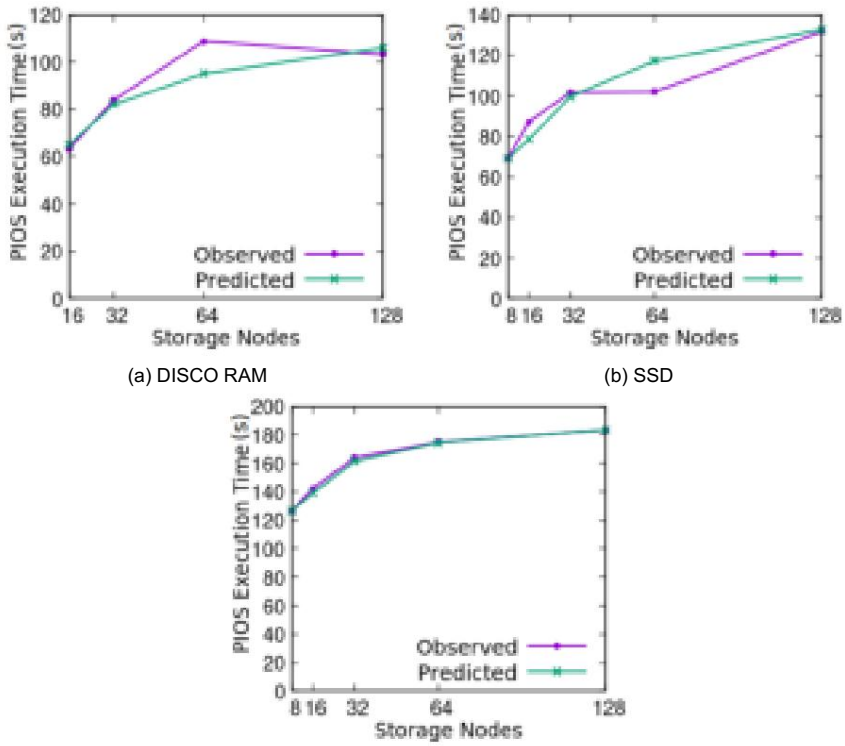


(a) DISCO RAM (b) SSD

(c) Disco duro

Figura 7. Predicción de rendimiento para BT_C en BeeGFS utilizando almacenamiento heterogéneo.

Machine Translated by Google



(a) DISCO RAM (b) SSD

(c) Disco duro

Figura 8. Predicción de rendimiento para PIOS en BeeGFS utilizando almacenamiento heterogéneo.

5. Trabajo relacionado

Las plataformas en la nube incorporan cada vez más SSD en sus sistemas de almacenamiento. Huang et al. [50] propusieron un modelo de caja negra para predecir el rendimiento de los SSD en términos de latencia, ancho de banda y rendimiento, mediante la aplicación de algoritmos estadísticos de aprendizaje automático. Evaluaron su modelo utilizando micropuntos de referencia y seguimientos del mundo real de aplicaciones de procesamiento de transacciones en línea (OLTP), y registraron errores del 9% en la predicción de latencia y del 1% en el ancho de banda y el rendimiento. A diferencia de nuestro trabajo, en el que consideramos diferentes tipos de almacenamiento en nuestro modelo, este trabajo se centró en predecir el rendimiento en SSD pero no en HDD.

Mondragón et al. [26] presentaron un modelo para analizar el rendimiento de aplicaciones HPC síncronas masivas basadas en el uso de EVT. Utilizaron su modelo para caracterizar el impacto de las fuentes de interferencia de próxima generación en las aplicaciones y predijeron el rendimiento de las aplicaciones a gran escala. Su modelo obtuvo un error de predicción de menos del 7,4 % para aplicaciones HPC que se ejecutan en clústeres HPC. También aplicamos EVT para caracterizar y predecir el rendimiento de aplicaciones HPC que utilizan almacenamiento heterogéneo en sistemas en la nube.

Domínguez-Trujillo et al. [51] presentó un enfoque para modelar variaciones en el rendimiento de sistemas HPC a gran escala utilizando EVT a través de un estudio de la duración máxima del intervalo de tiempo de carga de trabajo distribuida para aplicaciones HPC síncronas masivas, utilizando ping paramétrico y no paramétrico. Este trabajo se centró en la variabilidad generada por el hardware y software utilizado en los clusters HPC. En cambio, nuestro trabajo se centra en analizar y predecir variaciones de rendimiento para sistemas de almacenamiento heterogéneos en sistemas en la nube.

Otro enfoque que utilizó EVT fue un análisis del tiempo de ejecución en el peor de los casos (WCET) [52], donde los autores estudiaron la precisión de EVT en la detección del WCET para varios procesos. Este enfoque también se ha utilizado para tareas del kernel CUDA [53] y el análisis de aplicaciones automotrices en sistemas integrados críticos para la seguridad [54], pero no para el rendimiento de aplicaciones HPC que utilizan sistemas de almacenamiento heterogéneos en la nube.

Machine Translated by Google

6. Conclusiones

Un número cada vez mayor de investigadores está considerando el uso de la nube para ejecutar sus aplicaciones HPC. Este trabajo contribuye a la adopción de la nube como un entorno factible para aplicaciones HPC al proporcionar un modelo para aplicaciones HPC en sistemas en la nube y la integración de un sistema de archivos de almacenamiento de alto rendimiento como BeeGFS en la nube. En este artículo, hemos presentado un modelo basado en EVT para analizar, caracterizar y predecir el rendimiento de aplicaciones HPC que utilizan tecnologías de almacenamiento heterogéneas en la nube.

Modelar y comprender el rendimiento de las aplicaciones HPC que utilizan almacenamiento heterogéneo puede beneficiar tanto a los proveedores como a los usuarios de la nube. Una predicción precisa del rendimiento de las aplicaciones HPC que tenga en cuenta el rendimiento del almacenamiento puede ayudar a los proveedores de la nube a ofrecer esta característica en sus plataformas y puede ayudar a los usuarios de la nube a identificar los recursos que necesitarán de manera más específica.

Además de predecir el rendimiento del almacenamiento, nuestro modelo de valor extremo se puede utilizar como guía para diseñar algoritmos inteligentes de ubicación de datos que consideren infraestructuras de almacenamiento heterogéneas, cada vez más incorporadas por los proveedores de la nube, buscando aprovechar las características de cada tipo de almacenamiento, así como localidad de datos y patrones de acceso a datos

Aunque nuestro modelo obtuvo resultados precisos con errores de predicción bajos, modelar aplicaciones que exhiben distribuciones de tiempo de almacenamiento de cola pesada, como PIOS, es un desafío. En esos casos, el modelo podría beneficiarse del uso de técnicas como el arranque estadístico o el suavizado de extremos de muestra, para ajustar con mayor precisión los datos recopilados a las distribuciones utilizando una pequeña cantidad de muestras.

Una dirección futura para este trabajo sería incluir en el modelo otros dispositivos de almacenamiento como la nueva NVRAM. El desarrollo de un modelo de rendimiento de aplicaciones HPC basado en el uso de almacenamiento heterogéneo en sistemas de nube representa solo una parte de un desafío mayor, y en trabajos futuros se podrían integrar recursos de nube adicionales o incluso recursos de múltiples nubes en el modelo.

Contribuciones de los autores: Conceptualización, JM y OHM; Investigación, JM y OHM; Metodología , JM y OHM; Software, JM; Supervisión, OHM; Validación, JM y OHM; Visualización , JM; redacción: preparación del borrador original, JM y OHM; redacción: revisión y edición, JM y OHM Todos los autores han leído y aceptado la versión publicada del manuscrito.

Financiamiento: Esta investigación no recibió financiamiento externo.

Declaración de disponibilidad de datos: Todos los datos se presentaron en el texto principal.

Agradecimientos: Los resultados presentados en este artículo se obtuvieron utilizando el banco de pruebas CloudLab respaldado por la Fundación Nacional de Ciencias de EE. UU.

Conflictos de intereses: Los autores declaran no tener ningún conflicto de intereses.

Referencias

1. Neuwirth, S.; Paul, AK Técnicas de evaluación de E/S paralelas y cargas de trabajo de HPC emergentes: una perspectiva. En Actas de la Conferencia Internacional IEEE sobre Computación en Clústeres (CLUSTER) de 2021, Portland, Oregón, EE. UU., 7 a 10 de septiembre de 2021; págs. 671–679.
2. Mell, P.; Grance, T. La definición del NIST de computación en la nube; NIST: Boulder, CO, EE. UU., 2011.
3. Netto, MAS; Calheiros, RN; Rodríguez, ER; Cunha, RLF; Buyya, R. HPC Cloud para aplicaciones científicas y comerciales: Taxonomía, visión y desafíos de la investigación. Computación ACM. Sobrevivir. 2018, 51, 1–29. [Referencia cruzada]
4. Borín, E.; Drummond, LMA; Gaudiot, JL; Melo, A.; Alves, MM; Navaux, POA Computación de alto rendimiento en la nube: traslado de aplicaciones HPC a un entorno escalable y rentable; Springer Nature: Berlín/Heidelberg, Alemania, 2023.
5. Dancheva, T.; Alonso, U.; Barton, M. Evaluación comparativa de la nube y análisis de rendimiento de una aplicación HPC en Amazon EC2. Clúster. Computadora. 2024, 27, 2273–2290. [Referencia cruzada]
6. Aithal, P. La tecnología de la información, la comunicación y la computación (TICCT) como herramienta estratégica para los sectores industriales. Int. J. Aplica. Ing. Gestionar. Letón. (IJAEML) 2019, 3, 65–80. 7. dos
Santos, MA; Cavalheiro, GGH Infraestructura en la nube para análisis de inversiones en HPC. Rev. Informática Teórica E Apl. 2020, 27, 45–62. [Referencia cruzada]
8. Cheriere, N.; Dorier, M.; Antoniu, G. ¿Qué tan rápido se puede cambiar el tamaño de un sistema de archivos distribuido? J. Distribución paralela. Computadora. 2020, 140, 80–98. [Referencia cruzada]

Machine Translated by Google

9. Subramanyam, R. Gestión de recursos de almacenamiento heterogéneo HDFS basada en la temperatura de los datos. En Actas de la Conferencia Internacional sobre Computación Autonómica y en la Nube de 2015, Boston, MA, EE. UU., 21 a 25 de septiembre de 2015; págs. 232-235. [Referencia cruzada]
10. Braam, P. La arquitectura de almacenamiento de Lustre. arXiv 2019, arXiv:1903.01955.
11. Heichler, J. Una introducción a BeeGFS. 2014. Disponible en línea: http://www.beegfs.de/docs/whitepapers/Introduction_to_ BeeGFS_por_ThinkParQ.pdf (consultado el 1 de abril de 2024).
12. Souza Filho, P.; Felipe, L.; Aragäo, P.; Bejarano, L.; de Paula, DT; Sardina, A.; Azambuja, A.; Sierra, F. Procesamiento sísmico a gran escala en la nube pública. En Actas de la 82.ª Conferencia y Exposición Anual de EAGE, Ámsterdam, Países Bajos, 8 a 11 de junio de 2020; Volumen 2020, págs. 1 a 5.
13. Rao, MV Duplicación de datos mediante el almacenamiento en la nube de Amazon Web Services. En Enfoques de deduplicación de datos: conceptos, estrategias y Desafíos; Prensa académica: Cambridge, MA, EE. UU., 2020; pag. 319.
14. Chakraborty, M.; Kundan, AP Grafana. En el monitoreo de aplicaciones nativas de la nube: lidere operaciones ágiles con confianza utilizando software de código abierto; Springer: Berlín/Heidelberg, Alemania, 2021
15. Haan, L.; Ferreira, A. Teoría del valor extremo: una introducción; Springer: Berlín/Heidelberg, Alemania, 2006; Volumen 3.
16. Reghenzani, F.; Massari, G.; Fornaciari, W. Fiabilidad probabilística-WCET: prueba estadística de hipótesis EVT. Microproceso. Microsistema. 2020, 77, 103135. [Referencia cruzada]
17. Omar, C.; Mundía, S.; Ngina, I. Previsión del valor en riesgo de los mercados financieros bajo la pandemia global de COVID-19 utilizando Teoría del valor extremo condicional. J. Matemáticas. Finanzas. 2020, 10, 569–597. [Referencia cruzada]
18. Embrechts, P.; Klüppelberg, C.; Mikosch, T. En Modelado de eventos extremos: para seguros y finanzas; Springer Science & Business Media: Berlín/Heidelberg, Alemania, 2013; Volumen 33.
19. Coles, S.; Bawa, J.; Trenner, L.; Dorazio, P. En Introducción al modelado estadístico de valores extremos; Springer: Berlín/Heidelberg, Alemania, 2001; Volumen 208, 20. Wang, C.; Xu, C.; Xia, J.; Qian, Z.; Lu, L. Un uso
combinado de simulación microscópica de tráfico y métodos de valores extremos para la evaluación de la seguridad del tráfico. Transp. Res. Parte C Emergente. Tecnología. 2018, 90, 281–291. [Referencia cruzada]
21. Beirlant, J.; Goegebeur, Y.; Segers, J.; Teugels, JL En Estadística de extremos: teoría y aplicaciones; John Wiley e hijos: Hoboken, Nueva Jersey, EE.UU., 2006.
22. Ouellette, P.; El-Jabi, N.; Rousselle, J. Aplicación de la teoría del valor extremo a los daños por inundaciones. J. Recursos hídricos. Plan. Gestionar. 1985, 111, 467–477. [Referencia cruzada]
23. Merz, B.; Basso, S.; Fischer, S.; Lun, D.; Blöschl, G.; Merz, R.; Guse, B.; Viglione, A.; Vorogushyn, S.; Macdonald, E.; et al. Comprender las colas pesadas de las distribuciones de los picos de inundaciones. Recurso Acuático. Res. 2022, 58, e2021WR030506. [Referencia cruzada]
24. Tabari, H. Dilema del análisis de valores extremos para la evaluación del impacto del cambio climático en inundaciones globales y precipitaciones extremas. J. hidrol. 2021, 593, 125932. [Referencia cruzada]
25. Haskins, K.; Wofford, Q.; Bridges, flujos de trabajo PG para aplicaciones hpc con rendimiento predecible y reproducible. En Actas de la Conferencia Internacional IEEE sobre Computación en Clústeres (CLUSTER) de 2019, Albuquerque, Nuevo México, EE. UU., 23 a 26 de septiembre de 2019; págs. 1–2.
26. Mondragón, OH; Puentes, PG; Levy, S.; Ferreira, KB; Widener, P. Comprensión de la interferencia en el rendimiento en sistemas HPC de próxima generación . En Actas del SC'16: Actas de la Conferencia Internacional sobre Computación, Redes, Almacenamiento y Análisis de Alto Rendimiento, Salt Lake City, UT, EE. UU., 13 a 18 de noviembre de 2016; págs. 384–395.
27. Seelam, S.; Fong, L.; Tantawi, A.; Lewars, J.; Divirgilio, J.; Gildea, K. Computación a escala extrema: modelado del impacto del ruido del sistema en sistemas agrupados multinúcleo. En Actas del Simposio Internacional IEEE de 2010 sobre Procesamiento Distribuido y Paralelo (IPDPS), Atlanta, GA, EE. UU., 19 a 23 de abril de 2010; págs. 1–12.
28. Fisher, RA; Tippett, LHC Formas limitantes de la distribución de frecuencia del miembro más grande o más pequeño de una muestra. En Actas de las Actas Matemáticas de la Sociedad Filosófica de Cambridge; Cambridge University Press: Cambridge, Reino Unido, 1928; Volumen 24, págs. 180-190.
29. Gnedenko, B. Sur La Distribution Limite Du Terme Maximum D'Une Série Aléatoire. Ana. Matemáticas. 1943, 44, 423–453. [Referencia cruzada]
30. Jenkinson, AF La distribución de frecuencia de los valores máximos (o mínimos) anuales de elementos meteorológicos. qjr Meteorol. Soc. 1955, 81, 158-171. [Referencia cruzada]
31. Markose, S.; Alentorn, A. La distribución generalizada del valor extremo, el índice de cola implícito y el precio de las opciones. J. Deriv. 2011, 18, 35–60. [Referencia cruzada]
32. Lu, LH; Stedinger, JR Varianza de estimadores cuantiles GEV/PWM de dos y tres parámetros: fórmulas, intervalos de confianza, y una comparación. J. hidrol. 1992, 138, 247–267. [Referencia cruzada]
33. Hirose, H. Estimación de máxima verosimilitud en la distribución de Weibull de 3 parámetros. Una mirada a través del valor extremo generalizado distribución. Traducción IEEE. Dielectr. eléctrico. Insul. 1996, 3, 43–55. [Referencia cruzada]
34. Hosking, JR L-momentos: Análisis y estimación de distribuciones utilizando combinaciones lineales de estadísticas de orden. Estadística JR. Soc. Ser. B (Método.) 1990, 52, 105-124. [Referencia cruzada]
35. Smith, RL Teoría del valor extremo basada en los r eventos anuales más grandes. J. hidrol. 1986, 86, 27–43. [Referencia cruzada]
36. McNeil, AJ Cálculo de medidas de riesgo cuantil para series de rendimiento financiero utilizando la teoría del valor extremo; Informe Técnico; ETH Zúrich: Zúrich, Suiza, 1998.

Machine Translated by Google

37. Mehta, Nueva Jersey; Yang, F. Optimización de cartera para riesgos extremos con máxima diversificación: un análisis empírico. Riesgos 2022, 10, 101. [Referencia cruzada]
38. Gu, X.; Sí, L.; Xin, Q.; Zhang, C.; Zeng, F.; Nerantzaki, SD; Papalexiou, SM Precipitaciones extremas en China: una revisión sobre métodos y aplicaciones estadísticas. Adv. Recurso Acuático. 2022, 163, 104144. [Referencia cruzada]
39. Beretta, S. Más de 25 años de estadísticas de valores extremos para defectos: fundamentos, desarrollos históricos, aplicaciones recientes. Int. J. Fatiga 2021, 151, 106407. [CrossRef]
40. Cai, Y.; Hames, D. Determinación del tamaño mínimo de muestra para una distribución generalizada de valores extremos. Comunitario. Estadística. Computadora. 2010, 40, 87–98. [Referencia cruzada]
41. Henwood, R.; Watkins, noroeste; Chapman, Carolina del Sur; McLay, R. Una carga de trabajo paralela tiene una variabilidad extrema en un entorno de producción. 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. El diseño y operación de CloudLab. En Actas de la Conferencia Técnica Anual de USENIX de 2019 (ATC 2019), Renton, WA, EE. UU., 10 a 12 de julio de 2019; págs. 1-14.
43. Fragalla, J. Configurar, ajustar y comparar un sistema de archivos Lustre. En 2014 Taller HPC de Petróleo y Gas; 2014. Disponible en línea: http://rice2014oghpc.blogs.rice.edu/files/2014/03/Fragalla-Xyratex_Lustre_PerformanceTuning_Fragalla_0314.pdf (consultado el 1 de abril de 2024).
44. NORCOTT. Punto de referencia del sistema de archivos Iozone. 2003. Disponible en línea: http://www.iozone.org/ (consultado el 1 de abril de 2024).
45. Conway, A.; Bakshi, A.; Jiao, Y.; Jannen, W.; Zhan, Y.; Yuan, J.; Bender, MA; Johnson, R.; Kuszmaul, antes de Cristo; Porter, DE; et al. ¿Sistemas de archivos destinados a la senescencia? ¡Tonterías, dice la ciencia! En Actas de la 15.ª Conferencia USENIX sobre tecnologías de archivos y almacenamiento (FAST 17), Santa Clara, CA, EE. UU., 27 de febrero a 2 de marzo de 2017; págs. 45–58.
46. Yu, W.; Vetter, J.; Canon, RS; Jiang, S. Explotación de la unión de archivos lustre para una io colectiva eficaz. En Actas del Séptimo Simposio Internacional IEEE sobre Computación en Clusters y Grid (CCGrid'07), Río de Janeiro, Brasil, 14 a 17 de mayo de 2007; págs. 267–274.
47. Wong, P.; Der Wijngaart, R. E/S de pruebas paralelas de NAS, versión 2.4; Tecnología. Representante NAS-03-002; Centro de Investigación Ames de la NASA: Moffet Field, CA, EE. UU., 2003.
48. Oráculo. Manual de operaciones Lustre 1.6. 2010. Disponible en línea: https://docs.oracle.com/cd/E19091-01/lustre.fs16/820-3681-11/820-3681-11.pdf (consultado el 6 de abril de 2024).
49. Amaral, JN Acerca de la metodología de investigación en ciencias de la computación. 2011. Disponible en línea: https://webdocs.cs.ualberta.ca/~amaral/cursos/MetodosDePesquisa/papers/Amaral-research-methods.pdf (consultado el 2 de abril de 2024).
50. Huang, HH; Li, S.; Szalay, A.; Terzis, A. Modelado y análisis del rendimiento de dispositivos de almacenamiento basados en flash. En Actas del 27º Simposio del IEEE de 2011 sobre sistemas y tecnologías de almacenamiento masivo (MSST), Denver, CO, EE. UU., 23 a 27 de mayo de 2011; págs. 1–11.
51. Domínguez-Trujillo, J.; Haskins, K.; Khouzani, SJ; Salto, C.; Tashakkori, S.; Wofford, Q.; Estrada, T.; Puentes, PG; Widener, PM Medición ligera y análisis de la variabilidad del rendimiento de HPC. En las actas del Modelado de rendimiento, evaluación comparativa y simulación de sistemas informáticos de alto rendimiento (PMBS) de IEEE/ACM de 2020 ; IEEE: Nueva York, NY, EE. UU., 2020; págs. 50–60.
52. Lima, G.; Días, D.; Barros, E. Teoría del valor extremo para estimar los límites de tiempo de ejecución de tareas: una mirada cuidadosa. En Actas de la 28.ª Conferencia Euromicro sobre Sistemas en Tiempo Real (ECRTS) de 2016, Toulouse, Francia, 5 a 8 de julio de 2016; págs. 200–211.
53. Berezovskyi, K.; Santinelli, L.; Bletsas, K.; Tovar, E. Caracterización de los núcleos CUDA basada en mediciones y teoría de valores extremos WCET . En Actas de las Actas de la 22ª Conferencia Internacional sobre Redes y Sistemas en Tiempo Real, Versalles, Francia, 8 a 10 de octubre de 2014; págs. 279–288.
54. Castillo, JD; Padilla, M.; Abella, J.; Cazorla, FJ Distribuciones de tiempo de ejecución en sistemas integrados críticos para la seguridad utilizando extremos teoría del valor. Int. J. Análisis de datos. Tecnología. Estrategia. 2017, 9, 348–361. [Referencia cruzada]

Descargo de responsabilidad/Nota del editor: Las declaraciones, opiniones y datos contenidos en todas las publicaciones son únicamente de los autores y contribuyentes individuales y no de MDPI ni de los editores. MDPI y/o los editores renuncian a toda responsabilidad por cualquier daño a personas o propiedad que resulte de cualquier idea, método, instrucción o producto mencionado en el contenido.

Machine Translated by Google

cálculo

MDPI

Artículo

Tiempo de eco ultracorto e imágenes de eco de campo rápidas para la columna vertebral Imágenes óseas con aplicación en la evaluación de la espondilólisis

Diana Vucevic [1], Vadim Malis y Won C. [1], Yuichi Yamashita [2], Anya Mesa [1], Tomosuke Yamaguchi [1], Suraj Achar 3, Mitsue Miyazaki [1] Bae 1,4,*

1 Departamento de Radiología, Universidad de California-San Diego, San Diego, CA 92103, EE. UU.
2 Canon Medical Systems Corporation, Otawara 324-0036, Tochigi, Japón
3 Departamento de Medicina Familiar, Universidad de California-San Diego, San Diego, CA 92103, EE. UU.
4 Departamento de Radiología, VA San Diego Healthcare System, San Diego, CA 92161, EE. UU.
* Correspondencia: wbae@health.ucsd.edu

Resumen: La espondilólisis ístmica se caracteriza por una lesión por estrés en los huesos de la pars interarticularis de la columna lumbar y, a menudo, no se detecta en las imágenes por resonancia magnética (IRM) convencionales, lo que requiere una tomografía computarizada (TC) para un diagnóstico preciso. Comparamos técnicas de resonancia magnética adecuadas para producir imágenes similares a las de una tomografía computarizada. Se tomaron imágenes de la columna lumbar de sujetos asintomáticos y con dolor lumbar (DL) en 3-Tesla con secuencias de tiempo de eco ultracorto (UTE) de eco múltiple y eco de campo (FE) seguidas de un posprocesamiento simple de promediado e inversión para representar los huesos de la columna con una apariencia similar a la de una TC . Se determinó la relación contraste-ruido (CNR) para el hueso para comparar los datos de UTE con FE y de eco único con eco múltiple. Visualmente, ambas secuencias representaron hueso cortical con buen contraste; Las secuencias procesadas por UTE proporcionaron un contraste más plano para los tejidos blandos, lo que los hizo fáciles de distinguir del hueso, mientras que las imágenes procesadas por FE tuvieron mejor resolución y contraste hueso-músculo, que son importantes para la detección de fracturas. Además, las imágenes de eco múltiple proporcionaron una CNR significativamente mayor (p = 0,03) en comparación con las imágenes de eco único. Utilizando estas técnicas, se detectó espondilólisis progresiva en un sujeto con dolor lumbar. Este estudio demuestra la viabilidad de utilizar la resonancia magnética de la columna vertebral para producir un contraste similar a la tomografía computarizada. Mediante el empleo de secuencias UTE y FE de múltiples ecos combinadas con un procesamiento simple, observamos mejoras suficientes en la calidad de la imagen y el contraste para detectar fracturas pars.

Palabras clave: resonancia magnética; lumbalgia; fractura de hueso; pars interarticulares

check for updates

Cita: Vucevic, D.; Malis, V.; Yamashita, Y.; Mesa, A.; Yamaguchi, T.; Achar, S.; Miyazaki, M.; Bae, baño Tiempo de eco ultracorto y campo rápido Imágenes de eco para imágenes de huesos de la columna con aplicación en la evaluación de espondilólisis. Computación 2024, 12, 152. https://doi.org/10.3390/computation 12080152

Editor académico: Anando Sen

Recibido: 8 de junio de 2024
Revisado: 15 de julio de 2024
Aceptado: 22 de julio de 2024
Publicado: 24 de julio de 2024

Copyright: © 2024 por los autores. Licenciatario MDPI, Basilea, Suiza. Este artículo es un artículo de acceso abierto. distribuido bajo los términos y condiciones de los Creative Commons Licencia de atribución (CC BY) (https:// creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

1. Introducción

El dolor lumbar (LBP) afecta a una proporción significativa de atletas jóvenes, y hasta el 36% lo reporta anualmente [1]. La espondilólisis ístmica [2] se caracteriza por una lesión por estrés en la pars interarticularis del arco vertebral de la columna lumbar [3,4]. Es una afección frecuente entre los atletas jóvenes que realizan actividades que imponen una tensión repetitiva en la columna lumbar. Si bien la incidencia exacta de la espondilólisis ístmica no está bien documentada, los estudios la han reportado como una causa frecuente de dolor lumbar en atletas jóvenes, con tasas de prevalencia que oscilan entre el 20% y el 50% [5]. Estos hallazgos resaltan la necesidad de contar con herramientas de diagnóstico precisas y sin radiación para personas jóvenes.

La espondilólisis ístmica se presenta con gravedad variable, lo que requiere diferentes técnicas de imagen para su evaluación precisa. En la etapa inicial de las lesiones por estrés en la pars interarticularis caracterizadas por edema de la médula ósea sin fractura, la resonancia magnética (MRI) es la herramienta más sensible para detectar reacciones de estrés óseo [6,7]. A medida que avanza la afección, pueden presentarse reacciones de estrés óseo y fracturas, mientras que la etapa terminal implica solo fracturas. La tomografía computarizada (TC) es superior para visualizar fracturas óseas. Esta variabilidad en la presentación dificulta que una única modalidad de imagen caracterice completamente la etapa de la espondilólisis ístmica. Tanto la resona

Machine Translated by Google

La TC juega un papel crucial en la evaluación y, frecuentemente, ambas modalidades son necesarias para un diagnóstico definitivo.

Debido a las preocupaciones sobre la exposición a la radiación ionizante en pacientes jóvenes, particularmente aquellos en edad reproductiva, la resonancia magnética es la modalidad de imagen inicial preferida para detectar la espondilólisis ístmica. Sin embargo, debido a la capacidad limitada para visualizar los detalles óseos, la resonancia magnética convencional con frecuencia no logra identificar un número significativo de fracturas óseas que luego se detectan mediante tomografías computarizadas [6–8]. Luego se necesita una tomografía computarizada de seguimiento, que proporciona un excelente contraste y visualización de los detalles óseos finos [9], para determinar el diagnóstico de fractura ósea Si bien las tomografías computarizadas múltiples son perjudiciales para la salud a largo plazo de los adolescentes y aumentan el riesgo de cáncer [10-12], pueden ser inevitables en aquellos que sufren lesiones lumbares recurrentes, que se sabe que ocurren hasta en el 33% de los adolescentes. pacientes con lesiones deportivas en la espalda en el plazo de un año [13]. Reducir o evitar la radiación sería muy beneficioso para la obtención de imágenes de atletas jóvenes que sufren de dolor lumbar.

Las nuevas técnicas de resonancia magnética se están adaptando gradualmente a las imágenes óseas, con el desarrollo de secuencias como el tiempo de eco ultracorto (UTE) [14] y el tiempo de eco cero (ZTE) [15]. Estas técnicas han demostrado potencial para visualizar la estructura ósea en varias articulaciones, incluidas la rodilla [15,16], el hombro [17] y la columna lumbar [18]. Sin embargo, se ven obstaculizados por limitaciones inherentes, como una relación señal-ruido (SNR) baja y una resolución más baja, en comparación con la TC. Por lo tanto, se justifica el estudio y desarrollo continuo de técnicas de RM orientadas al hueso .

En este estudio, nuestro objetivo fue presentar y comparar dos técnicas de resonancia magnética para obtener imágenes óseas (adquisiciones UTE de eco múltiple y eco de campo (FE) de eco múltiple) combinadas con un posprocesamiento simple para mejorar la apariencia, la relación señal-ruido y el contraste de la imagen, con el objetivo de proporcionar características de imagen similares a las de la TC. El uso de imágenes multieco para mejorar la SNR se ha propuesto anteriormente [19,20] y probablemente beneficiará las imágenes UTE para representar el hueso cortical. También se han sugerido secuencias FE para imágenes óseas [21], con fortalezas notables que incluyen la amplia disponibilidad de la secuencia por parte de los principales proveedores de resonancia magnética, alta resolución espacial y alto contraste entre músculo y hueso, que son útiles para la visualización ósea. En este estudio, combinamos adquisiciones de UTE y FE con técnicas simples de posprocesamiento para proporcionar una apariencia similar a la de una TC y mejorar la calidad

2. Materiales y métodos

2.1. Sujetos

Se tomaron imágenes de la columna lumbar de cuatro sujetos (1 hombre, 3 mujeres; 19,5 ± 5,5 años) en 3-T (Canon Galan) con una bobina de columna posterior. Se reclutaron dos voluntarios de salud con los criterios de inclusión de no tener dolor lumbar o antecedentes de cirugía lumbar. Dos de los sujetos eran atletas adolescentes (mujeres de 16 años, hombres de 14 años) con dolor lumbar inespecífico y no irradiado durante las últimas 4 a 8 semanas. Los síntomas no mejoraron con el tratamiento conservador y el médico de atención primaria de los pacientes los remitió para ser evaluados por la presencia de espondilólisis.

2.2. resonancia magnética

Se tomaron imágenes de los sujetos con un escáner de resonancia magnética de 3 Tesla (Galan, Canon Medical Systems Corp., Otawara, Japón) equipado con una bobina espinal de recepción posterior únicamente. Se utilizaron una secuencia anatómica y dos secuencias orientadas al hueso para obtener imágenes de cada sujeto. La secuencia anatómica fue un eco de espín rápido sagital ponderado en T2 (FSE T2) con supresión de grasa con los siguientes parámetros de escaneo: tiempo de repetición (TR) = 5600 milisegundos (ms), tiempo de eco (TE) = 80 ms, campo de visión (FOV) = 220 milímetros (mm), matriz de imagen = 320 × 416, grosor del corte = 3 mm y longitud del tren de ecos (ETL) = 19. Las secuencias orientadas al hueso fueron (1) una secuencia multieco axial 3D UTE con parámetros de escaneo de TR = 16,7 ms; TE = 0,1, 2,7, 5,3 ms; número de proyecciones = 19.968; campo de visión = 300 ms; matriz = 320 × 320; y corte = 1 mm, reformateado al plano sagital y (2) una secuencia multieco de eco de campo 3D (FE) sagital con parámetros de escaneo de TR = 21,8 ms; TE = 4, 8,6, 13,2 ms; campo de visión = 170 mm; matriz = 320 × 240; y rebanada = 1 mm. Las imágenes originales se muestran en la Figura 1.

Machine Translated by Google

Si bien no se realizó ninguna optimización formal, inicialmente probamos diferentes números de proyecciones radiales para el UTE 3D y diferentes valores de TE para el FE 3D.

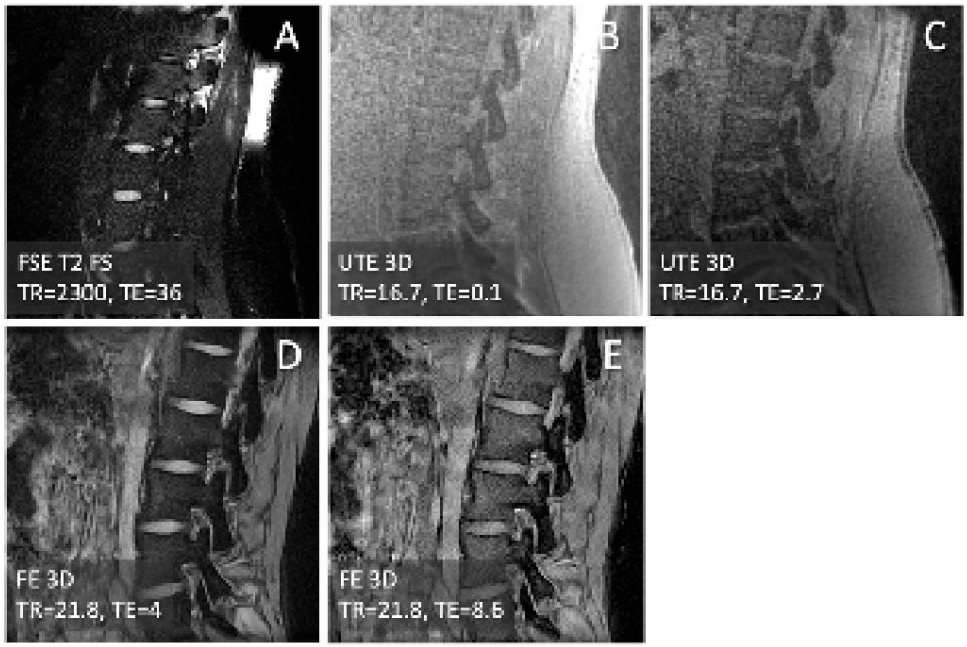


Figura 1. Imágenes de resonancia magnética sin procesar de una columna lumbar adquiridas mediante (A) eco de espín rápido con supresión de grasa ponderado en T2 (FSE T2 FS), (B, C) tiempo de eco ultracorto (UTE) 3D en diferentes tiempos de eco (TE), y (D,E) eco de campo 3D (FE) en diferentes TE.

2.3. Procesamiento de imágenes tipo CT

Para crear una apariencia similar a la de una tomografía computarizada a partir de las resonancias magnéticas orientadas al hueso y para demostrar la ventaja de utilizar múltiples imágenes de adquisición de múltiples ecos, las imágenes se procesaron directamente en la consola del escáner de las dos maneras siguientes. Primero, se creó un conjunto de imágenes similares a CT a partir de las imágenes del primer eco de la UTE (TE = 0,1 ms, Figura 1B) y FE (TE = 4 ms; Figura 1D) simplemente se invirtieron (Ecuación (1)) para hacer que los tejidos óseos brillen y los tejidos circundantes se oscurezcan (Figura 2A, C).

$$\text{Imagen tipo CT del primer eco} = \frac{1}{\text{Imagen de origen}} \quad (1)$$

Se creó un segundo conjunto de imágenes tipo CT a partir de todas las imágenes (con diferentes TE) de la serie de ecos múltiples. Para cada secuencia de UTE y FE, todas las imágenes fuente de diferentes TE se promediaron y luego se invirtieron para producir las imágenes finales tipo CT (Figura 2B,D) siguiendo la Ecuación (2), donde i = las imágenes fuente correspondientes a cada TE y n = el número de TE.

$$\text{Imagen tipo CT de eco múltiple} = \sum \frac{\sum_{yo=1}^{norte} \text{Imagen fuente}_i}{} \quad (2)$$

La intención era que el promedio redujera el ruido y la inversión proporcionara una alta intensidad de señal al hueso. En la Figura 2 se muestran imágenes procesadas representativas de ambos enfoques utilizando la UTE y la FE.

Machine Translated by Google

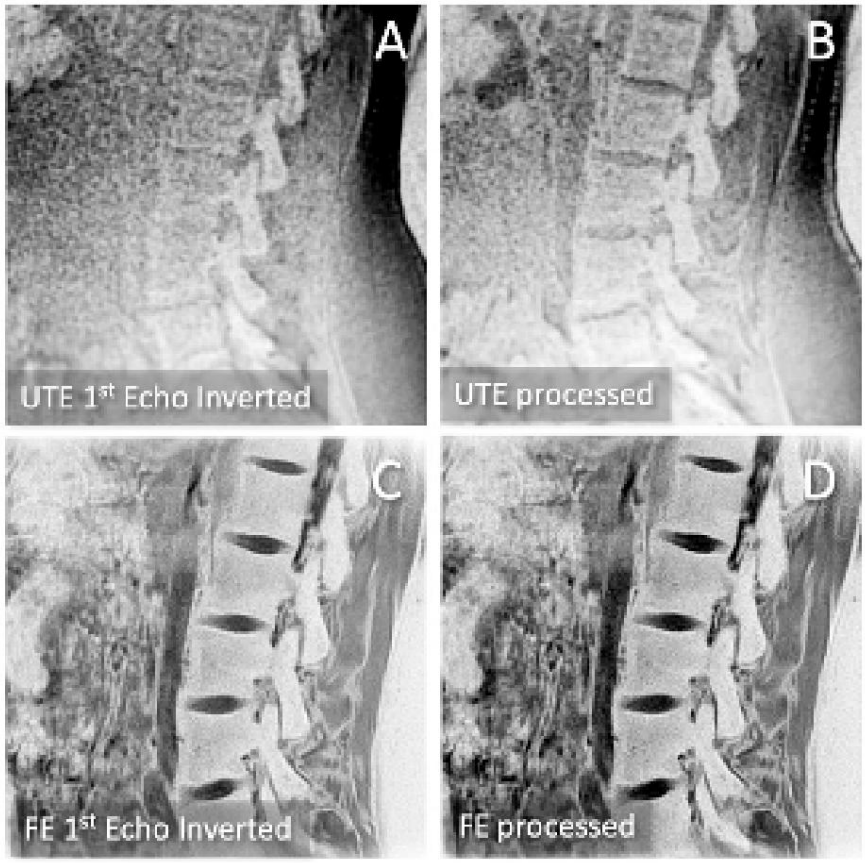


Figura 2. Imágenes procesadas para crear un contraste similar al de una tomografía computarizada a partir de (A) la imagen de primer eco de UTE, (B) las imágenes de eco múltiple de UTE, (C) la imagen de primer eco de FE y (D) las imágenes de eco múltiple de FE . Las diferencias entre secuencias (UTE vs. FE) y las mejoras en el contraste y la calidad de la imagen gracias al procesamiento de ecos múltiples son evidentes.

2.4. Relación señal-ruido (SNR) y relación contraste-ruido (CNR)

Se dibujaron regiones de interés (ROI) en un corte sagital de las imágenes procesadas tipo TC que representaban el hueso cortical de la pars interarticularis y los músculos paraespinales circundantes (Figura 3). Las ROI fueron colocadas manualmente por un científico con más de 10 años de experiencia en investigación de imágenes. Las ROI para el hueso se colocaron a lo largo de la pars interarticularis y las ROI para el músculo se colocaron en el músculo paraespinal adyacente posterior a la ROI del hueso. Dentro de cada ROI, determinamos la intensidad media de la señal (SImedia). También se colocó una ROI en el fondo (aire) para determinar la desviación estándar (SISD) de la intensidad de la señal de ruido. Evaluamos la variabilidad entre cortes mediante el coeficiente de variación en la intensidad de señal media de las ROI óseas en 5 cortes consecutivos de dos conjuntos de datos y encontramos menos del 2% de variabilidad, independientemente de la secuencia utilizada.

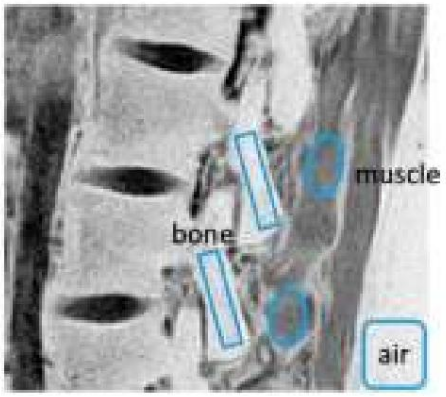
La SNR se determinó a partir de la intensidad media de la señal dividida por la desviación estándar del ruido en el aire [22] (Ecuación (3)).

$$SNR1 = \frac{SI1_{significar}}{Ruido} \quad (3)$$

El CNR se determinó a partir de la diferencia en la intensidad media de la señal entre los ROI seleccionadas divididas por la desviación estándar del ruido [23] (Ecuación (4)).

$$CNR1\text{-}2 = \frac{SI1_{significar} - SI2_{significar}}{Ruido} \quad (4)$$

Machine Translated by Google



f

Figura 3. Regiones de interés (áreas encerradas en azul), incluido el hueso de la pars interarticularis, los músculos paraespinales y el aire, que se analizaron para determinar la SNR y la CNR.

2.5. Estadística

Los valores SNR y CNR entre los cuatro tipos de imágenes tipo CT (procesadas a partir de imágenes UTE 1 st-echo, UTE multi-eco, FE 1st-echo y FE multi-eco) se compararon utilizando ANOVA bidireccional totalmente factorial . 24,25] para determinar los efectos de la secuencia (UTE vs. FE) y el uso de la imagen del primer eco frente a las tres imágenes del procesamiento de ecos múltiples. El Se utilizó el software de análisis estadístico Systat (v12, Grafiti LLC, Palo Alto, CA, EE. UU.). El nivel de significancia se fijó en el 5%.

2.6. Evaluación de espondilólisis

Para los dos sujetos con dolor lumbar, comparamos las imágenes convencionales SE T2, UTE con procesamiento multieco y FE con procesamiento multieco para evaluar la presencia de espondilólisis (Figura 4).

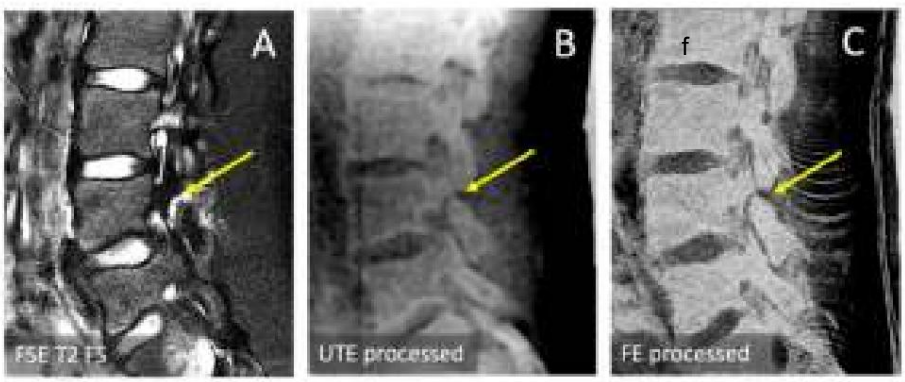


Figura 4. Detección de un defecto pars de tamaño moderado (flechas) en un atleta adolescente con dolor lumbar persistente utilizando FSE T2 FS (A), procesamiento multieco UTE (B) y procesamiento multieco FE (C). Las imágenes procesadas pueden permitir un diagnóstico más fácil y seguro de la espondilólisis ístmica.

3. Resultados

3.1. Observaciones

En comparación con FSE T2 (Figura 1A), las imágenes procesadas tipo CT de las imágenes UTE y FE de primer eco (Figura 2A, C) y de eco múltiple (Figura 2B, D) representaban claramente el hueso espinal con alta intensidad de señal, similar a CONNECTICUT. Las imágenes UTE (Figura 2A,B) y FE (Figura 2B,C) , aunque ambas proporcionaron un contraste similar al de la TC, tuvieron diferencias notables. Las imágenes UTE eran más suaves, al tiempo que proporcionaban un contraste más plano para el tejido blando, lo que facilitaba distinguir el hueso si el lector no estaba familiarizado con la anatomía. Por el contrario, las imágenes FE fueron notablemente más nítidas y representaron el hueso con un mayor contraste. Pero las imágenes de FE mostraban muchos tejidos no óseos (p. ej., fascia muscular) con una intensidad de señal similarmente alta a la del hueso. Esto hace que las imágenes FE sean menos deseables para tareas como la segmentación y visualización

Machine Translated by Google

del hueso, pero es más deseable para evaluar características pequeñas como fracturas finas. Cuando comparando imágenes tipo CT del primer eco (Figura 2A, C) versus eco múltiple (Figura 2B, D), las imágenes multieco mostraron una mejora, con menos ruido y mejor contraste para hueso en general.

3.2. SNR y CNR

La Tabla 1 resume los valores SNR y CNR para las imágenes procesadas tipo CT. Las imágenes tipo CT de los datos de UTE tenían valores medios de SNR para el hueso que oscilaban entre 90 y 100, que fueron significativamente más altos (p = 0,0002) que los valores de los datos de FE (media SNR rango de 38 a 53). Sin embargo, los valores de CNR (hueso-músculo) fueron ligeramente superiores (p = 0,09) para FE (CNR medio que oscila entre 15 y 22) en comparación con UTE (CNR de 13 a 16). el uso de imágenes multieco, tanto para los datos UTE como para FE mejoraron significativamente los valores CNR (p = 0,03): para UTE, el CNR en promedio mejoró en 2,7, mientras que para FE, el CNR mejoró por 6.9. Esto corrobora las mejoras visuales en el contraste óseo observadas en la imagen. comparación en la Figura 2.

Tabla 1. (Arriba) Media y desviación estándar de los valores SNR y CNR de varias regiones de interés. (Abajo) Valores de p de ANOVA de dos vías para evaluar los efectos de la secuencia (UTE vs. FE) y procesamiento (primer eco frente a multieco) en SNR y CNR. El valor p en negrita indica estadística significancia (p < 0,05).

Medición	Valores medios (+/− Desv. estándar) para cada secuencia			
	UTE 1.er eco	UTE Multi	FE 1.er eco	FE Multi
SNR ósea	107 (66)	89,8 (29,5)	38,1 (10,3)	53,3 (16,3)
señal muscular	94,4 (65,4)	74,0 (32,8)	23,4 (7,0)	31,9 (14,2)
CNR hueso-músculo	13,0 (5,2)	15,7 (5,0)	14,6 (4,2)	21,5 (8,5)

Medición	ANOVA bidireccional: efecto de		
	UTE contra FE	1º- vs. eco múltiple	Interacción
SNR ósea	0.0004	0.9289	0,2235
señal muscular	0.0002	0.6556	0.2864
CNR hueso-músculo	0.0935	0.0311	0.3327

3.3. Representación de espondilólisis

En uno de los sujetos con dolor lumbar, detectamos espondilólisis progresiva con un defecto óseo de tamaño moderado visto como una brecha con alta intensidad de señal en FSE T2 (Figura 4A, flecha) y una pseudoartrosis clara tanto en la UTE procesada con múltiples ecos (Figura 4B, flecha) como en la Imágenes de FE procesadas con múltiples ecos (Figura 4C, flecha). También medimos el perfil de la señal. a través del defecto óseo en imágenes procesadas por UTE y FE. Los anchos de los defectos, medidas como ancho total a la mitad del máximo, fueron 2,75 mm y 2,39 mm para UTE y FE, respectivamente.

4. Discusión

Este estudio ha demostrado la viabilidad de la resonancia magnética de la columna vertebral para producir un contraste similar al de la tomografía computarizada. Mediante el empleo de secuencias UTE y FE de múltiples ecos combinadas con técnicas sencillas de procesamiento de imágenes, hemos observado mejoras discernibles en la imagen. calidad y contraste óseo en comparación con el uso de enfoques de eco único. Nuestros hallazgos son alentador, lo que sugiere que estos enfoques se pueden utilizar para obtener imágenes similares a las de TC útiles para evaluar la espondilólisis, aunque con limitaciones.

Nuestro estudio comparó secuencias UTE multieco y 3D FE multieco y demostró que, si bien ambas secuencias pueden representar el hueso cortical razonablemente bien, las imágenes UTE proporcionó un contraste más plano para los tejidos blandos que hacían que el hueso se distinguiera (parece oscuro) de los tejidos circundantes (que parecen brillantes) más fácilmente, mientras que las imágenes FE tuvieron mayor resolución y contraste hueso-músculo que la UTE, lo que será invaluable para detectar

Machine Translated by Google

fracturas. También demostramos que el procesamiento de todas las imágenes de la adquisición de ecos múltiples proporcionó una CNR significativamente mayor para el hueso tanto para las adquisiciones de UTE como de FE.

Nuestro estudio se basa en estudios anteriores con un propósito similar de obtener imágenes de huesos mediante resonancia magnética. Muchos utilizaron un enfoque similar de adquirir imágenes que representan hueso con una señal vacía y tejido circundante con mayor intensidad de señal e invertir la imagen para proporcionar una apariencia similar a la de una TC [21,26,27]. Estos estudios han demostrado que estas secuencias convencionales pueden proporcionar una buena representación de la estructura ósea cortical y, en un estudio [27], se demostró una alta precisión (>90%) en la detección de fracturas óseas. Nuestro resultado en general corroboró estos resultados anteriores y sugirió el beneficio de utilizar imágenes de eco múltiple para mejorar la calidad de la imagen. Si bien no investigamos formalmente el efecto de diferentes técnicas de procesamiento, nuestro método simple de promediación e inversión se puede realizar en cualquier consola de resonancia magnética utilizando herramientas de procesamiento de imágenes integradas. Se han intentado con diversos grados de éxito otras técnicas de procesamiento, como la resta de eco reescalada [28], la inversión simple de un solo eco [27] o la suma de todos menos el último eco seguido del último eco [21] . Hay enfoques aún más avanzados disponibles, como el uso del aprendizaje profundo para crear imágenes similares a las de una TC (pseudo-CT) a partir de una resonancia magnética [18,29,30], pero actualmente requieren un procesamiento extenso fuera de línea que puede retrasar la evaluación clínica.

Este es un estudio inicial con muchas limitaciones. Si bien se ha demostrado la viabilidad, se necesita un estudio comparativo utilizando imágenes de referencia de TC. Dado que es difícil adquirir imágenes de TC y RM sin necesidad clínica, un estudio inicial podría utilizar muestras cadavéricas, como se realizaba anteriormente [18]. Además, el número de temas utilizados fue muy pequeño, pero esto es típico en los primeros desarrollos técnicos. No obstante, será necesario un estudio más amplio en el futuro para confirmar los hallazgos actuales y hacer que los resultados sean generalizables para la aplicación prevista. Descubrimos que las diferencias en la SNR y la CNR entre las secuencias de RM eran sustanciales, y la tendencia probablemente será similar con un mayor número de sujetos, ya que la intensidad de la señal del hueso y músculo cortical puede no variar marcadamente entre sujetos sin una patología particular. . Si bien hubiera sido ideal involucrar a radiólogos para comparar la calidad de la imagen y el rendimiento diagnóstico para detectar fracturas pars, eso habría requerido una cantidad bastante grande de sujetos, así como imágenes de TC de referencia. Esta es una probable extensión futura del trabajo actual. Como estudio inicial, pudimos inscribir a dos atletas jóvenes con dolor lumbar persistente y mostramos positivamente espondilólisis en uno de ellos en la Figura 4, lo que demuestra la viabilidad clínica.

A pesar de los avances en las secuencias de pulsos y las técnicas de posprocesamiento, todavía no existe un método basado en resonancia magnética que pueda producir imágenes equivalentes a las tomografías computarizadas. En términos de técnicas apropiadas para la evaluación de fracturas óseas en la pars, ambas técnicas analizadas en este artículo, junto con enfoques similares anteriores basados en el procesamiento de imágenes convencional [19,21,27], podrían aportar valor. El uso de inteligencia artificial para sintetizar imágenes pseudo-CT a partir de imágenes de MRI [18,31,32], al tiempo que produce el mejor contraste óseo (alcanzando CNR de 100 a 150 [18], en comparación con alrededor de 20 en este estudio) y CT- como la apariencia, aún no son prácticos. El trabajo futuro explorará la posibilidad de mejorar las imágenes óseas mediante el uso de procesamiento de imágenes más avanzado y/o técnicas de aprendizaje profundo.

5. Conclusiones

En conclusión, este estudio ha demostrado la viabilidad de dos técnicas de resonancia magnética para proporcionar una alternativa sin radiación para la evaluación de la espondilólisis, mostrándose su aplicación clínica en un sujeto joven con un defecto de la pars. Otros avances en la tecnología de resonancia magnética con UTE y FE de eco múltiple tienen el potencial de transformar el estándar de atención para los atletas adolescentes y otras personas con espondilólisis ístmica, ofreciendo una alternativa de imágenes más segura, igualmente efectiva y libre de radiación.

Contribuciones de los autores: Conceptualización: WCB, SA, VM y MM; metodología, WCB, VM, YY y MM; software, WCB, VM e YY; validación, WCB y SA; análisis formal, DV y WCB; investigación, WCB, MM, SA, YY, TY, AM y DV; recursos, AM, TY y DV; datos

Machine Translated by Google

curación, WCB; redacción: preparación del borrador original, WCB, SA y MM; redacción: revisión y edición, VM, AM, TY, SA, DV y WCB; visualización, WCB; supervisión, MM y WCB; administración de proyectos, AM y WCB; adquisición de financiación, MM y WCB Todos los autores han leído y aceptado la versión publicada del manuscrito.

Financiamiento: Won C. Bae recibió financiamiento para investigación de Canon Medical Systems, EE. UU. Mitsue Miyazaki recibió financiación para investigación de Canon Medical Systems Corporation, Japón (35938). Las agencias de financiación no tuvieron ningún papel en el diseño del estudio, la recopilación de datos, la interpretación o la decisión de enviar este trabajo para su publicación.

Declaración de la Junta de Revisión Institucional: El estudio se realizó de acuerdo con la Declaración de Helsinki y fue aprobado por la Junta de Revisión Institucional de la Universidad de California, San Diego (protocolo n.° 200335, fecha de aprobación 17 de octubre de 2023).

Declaración de consentimiento informado: Se obtuvo el consentimiento informado de todos los sujetos involucrados en el estudio.

Declaración de disponibilidad de datos: Los datos que respaldan los hallazgos de este estudio no están disponibles públicamente por razones de sensibilidad. Los datos anónimos pueden estar disponibles del autor correspondiente tras una revisión de la solicitud. Los datos se encuentran en un almacenamiento de datos de acceso controlado en la institución del autor correspondiente.

Conflictos de intereses: Yuichi Yamashita es empleado de Canon Medical Systems, Japón. El resto de autores declaran no tener conflictos de intereses.

Referencias

1. Olsen, TL; Anderson, RL; Dearwater, SR; Kriska, AM; Cauley, JA; Aarón, DJ; LaPorte, RE La epidemiología del dolor lumbar en una población adolescente. Soy. J. Salud Pública 1992, 82, 606–608. [Referencia cruzada] [PubMed]
2. Wiltse, LL; Newman, PH; Macnab, I. Clasificación de espondilolisis y espondilolistesis. Clínico. Ortopédico. Relacionado. Res. 1976, 117, 23-29. [Referencia cruzada]
3. Fredrickson, BE; panadero, D.; McHolick, WJ; Yuan, HA; Lubicky, JP La historia natural de la espondilolisis y la espondilolistesis. J. Hueso Jt. Cirugía. Soy. 1984, 66, 699–707. [Referencia cruzada]
4. Bechtel, W.; Griffiths, H.; Eisenstadt, R. La patogénesis de la espondilólisis. Investigando. Radiol. 1982, 17, S29. [Referencia cruzada]
5. Li, J.; Liang, J.; Xu, Y.; Du, D.; Feng, F.; Shen, J.; Cui, Y. Incidencia de espondilólisis lumbar en atletas con dolor lumbar: una evaluación sistemática y un metanálisis de un solo grupo. Medicina 2023, 102, e34857. [Referencia cruzada]
6. Oeste, AM; d'Hemecourt, PA; Bono, DO; Micheli, LJ; Sugimoto, D. Precisión diagnóstica de la resonancia magnética y la tomografía computarizada en atletas jóvenes con espondilólisis. Clínico. Pediatra. 2019, 58, 671–676. [Referencia cruzada] [PubMed]
7. Yamane, T.; Yoshida, T.; Mimatsu, K. Diagnóstico precoz de espondilólisis lumbar mediante resonancia magnética. J. Hueso Jt. Cirugía. Hno. 1993, 75, 764–768. [Referencia cruzada] [PubMed]
8. Ulmer, JL; Mathews, vicepresidente; Elster, AD; Marcos, LP; Daniels, DL; Mueller, W. Imágenes por resonancia magnética de la espondilólisis lumbar: el importancia de las observaciones auxiliares. AJR Am. J. Roentgenol. 1997, 169, 233–239. [Referencia cruzada]
9. Leona, A.; Cianfoni, A.; Cerase, A.; Magarelli, N.; Bonomo, L. Espondilólisis lumbar: una revisión. Esqueleto. Radiol. 2011, 40, 683–700. [Referencia cruzada]
10. Viaje, N.; Rue, T.; Cardis, E.; Le Pointe, HD; Brisse, H.; Châteil, JF; Laurier, D.; Bernier, MO Tomografías computarizadas infantiles y riesgo de cáncer: impacto de los factores predisponentes al cáncer en las estimaciones de riesgo. J. Radiol. Prot. 2016, 36, N1–N7. [Referencia cruzada]
11. Berrington de González, A.; Pascual, E.; Veiga, L. Estudios epidemiológicos de tomografías computarizadas y riesgo de cáncer: el estado de la ciencia. Hno. J. Radiol. 2021, 94, 20210471. [Referencia cruzada] [PubMed]
12. Wang, WH; cantado, CY; Wang, Carolina del Sur; Shao, YJ Riesgos de leucemia, tumores intracraneales y linfomas en la infancia y la edad adulta temprana después de la exposición pediátrica a la radiación de la tomografía computarizada. CMAJ 2023, 195, E575–E583. [Referencia cruzada]
13. Carey, TS; Garrett, JM; Jackman, A.; Hadler, N. Recurrencia y búsqueda de atención después del dolor de espalda agudo: resultados de un estudio a largo plazo estudio de seguimiento. Proyecto de dolor de espalda de Carolina del Norte. Medicina. Cuidado 1999, 37, 157–164. [Referencia cruzada] [PubMed]
14. Bae, WC; Biswas, R.; Chen, K.; Chang, EY; Chung, CB UTE MRI de la unión osteocondral. actual. Radiol. Rep. 2014, 2, 35. [Referencia cruzada] [PubMed]
15. Bharadwaj, UU; Coy, A.; Motamedi, D.; Sol, D.; José, GB; Krug, R.; Link, TM CT-like MRI: una evaluación cualitativa de ZTE Secuencias para anomalías óseas de la rodilla. Esqueleto. Radiol. 2022, 51, 1585–1594. [Referencia cruzada] [PubMed]
16. Cheng, Kentucky; Moazamian, D.; Puede.; Jang, H.; Jerban, S.; Du, J.; Chung, CB Aplicación clínica de imágenes por resonancia magnética (MR) con tiempo de eco ultracorto (UTE) y tiempo de eco cero (ZTE) en la evaluación de la osteoartritis. Esqueleto. Radiol. 2023, 52, 2149–2157. [Referencia cruzada] [PubMed]
17. Breighner, RE; Endo, Y.; Konin, médico de cabecera; Gulotta, LV; Koff, MF; Potter, HG Desarrollos técnicos: Imágenes con tiempo de eco cero del hombro: detalle óseo mejorado mediante el uso de imágenes por resonancia magnética. Radiología 2018, 286, 960–966. [Referencia cruzada] [PubMed]
18. Achar, S.; Hwang, D.; Finkenstaedt, T.; Malis, V.; Bae, WC Evaluación de espondilólisis asistida por aprendizaje profundo fotografiada con Imágenes por resonancia magnética con tiempo de eco ultracorto. Sensores 2023, 23, 8001. [CrossRef]

Machine Translated by Google

19. Jang, U.; Hwang, D. Imágenes de RM de contraste múltiple T2 (*) de alta calidad a partir de imágenes de eco múltiple de baja calidad utilizando métodos de eliminación de ruido en el dominio temporal. Medicina. Física. 2012, 39, 468–474. [Referencia cruzada]
20. Jang, U.; Nam, Y.; Kim, DH; Hwang, D. Mejora de la SNR y resolución de la venografía ponderada por susceptibilidad mediante Eliminación de ruido multieco basada en modelos. Neuroimagen 2013, 70, 308–316. [Referencia cruzada]
21. Johnson, B.; Alizai, H.; Dempsey, M. Eco de campo rápido que se asemeja a una tomografía computarizada usando espacio restringido entre ecos (FRACTURA): una nueva técnica de resonancia magnética con contraste óseo superior. Esqueleto. Radiol. 2021, 50, 1705–1713. [Referencia cruzada] [PubMed]
22. Goerner, Florida; Clarke, GD Medición de la relación señal-ruido en imágenes de resonancia magnética parcialmente paralelas. Medicina. Física. 2011, 38, 5049–5057. [Referencia cruzada]
23. Edelstein, W.; Bottomley, P.; Hart, H.; Leue, W.; Schenck, J.; Redington, R. Imágenes de RMN a 5,1 MHz: trabajo en progreso. En Simposio Internacional sobre Imágenes de RMN; Witcofski, R., Karstaedt, N., Partain, C., Eds.; Escuela de Medicina Bowman Gray: Winston-Salem, Carolina del Norte, EE. UU., 1982; págs. 139-145.
24. Mishra, P.; Singh, U.; Pandey, CM; Mishra, P.; Pandey, G. Aplicación de la prueba t de Student, análisis de varianza y covarianza. Ana. Tarjeta. Anest. 2019, 22, 407–411. [Referencia cruzada] [PubMed]
25. McHugh, ML Pruebas de análisis de comparación múltiple en ANOVA. Bioquímica. Medicina. 2011, 21, 203–209. [Referencia cruzada] [PubMed]
26. Tsuchiya, K.; Gomyo, M.; Katase, S.; Hiraoka, S.; Tateishi, H. Imágenes óseas por resonancia magnética: aplicaciones a las lesiones vertebrales. Japón. J. Radiol. 2023, 41, 1173–1185. [Referencia cruzada] [PubMed]
27. Schwaiger, BJ; Schneider, C.; Kronthaler, S.; Gassert, pies; Bohm, C.; Pfeiffer, D.; Baum, T.; Kirschke, JS; Karampinos, DC; Makowski, señor; et al. Imágenes tipo CT basadas en secuencias de resonancia magnética de eco de gradiente estropeado T1 y tiempo de eco ultracorto para la evaluación de fracturas vertebrales y cambios óseos degenerativos de la columna. euros. Radiol. 2021, 31, 4680–4689. [Referencia cruzada] [PubMed]
28. Du, J.; Bydder, M.; Takahashi, AM; Carl, M.; Chung, CB; Bydder, GM Short T2 contraste con eco ultracorto tridimensional imágenes del tiempo. Magn. Reson. Imágenes 2011, 29, 470–482. [Referencia cruzada]
29. Grande, A.; Barateau, A.; Nunes, JC; Mylona, E.; Castelli, J.; Lafond, C.; Greer, PB; Dowling, JA; Baxter, J.; Saint-Jalmes, H.; et al. Comparación de métodos basados en aprendizaje profundo y basados en parches para la generación de pseudo-CT en la planificación de dosis de próstata basada en resonancia magnética. Int. J. Radiat. Oncol. Biol. Física. 2019, 105, 1137–1150. [Referencia cruzada] [PubMed]
30. Borbona, V.; Jaouen, V.; Hognon, C.; Boussion, N.; Lucía, F.; Pradier, O.; Bert, J.; Visvikis, D.; Schick, U. Validación dosimétrica de una generación de pseudo-CT basada en GAN para radioterapia cerebral estereotáctica únicamente con resonancia magnética. Cánceres 2021, 13, 1082. [CrossRef]
31. Florkow, MC; Willemsen, K.; Mascarenhas, VV; Oei, EHG; van Stralen, M.; Seevinck, PR Imágenes por resonancia magnética versus tomografía computarizada para imágenes óseas tridimensionales de patologías musculoesqueléticas: una revisión. J. Magn. Reson. Imágenes 2022, 56, 11–34. [Referencia cruzada]
32. Morbee, L.; Vereecke, E.; Laloo, F.; Chen, M.; Herregods, N.; Jans, L. Imágenes por resonancia magnética de los huesos pélvicos: las técnicas actuales y de vanguardia. J. Belg. Soc. Radiol. 2022, 106, 123. [Referencia cruzada] [PubMed]

Descargo de responsabilidad/Nota del editor: Las declaraciones, opiniones y datos contenidos en todas las publicaciones son únicamente de los autores y contribuyentes individuales y no de MDPI ni de los editores. MDPI y/o los editores renuncian a toda responsabilidad por cualquier daño a personas o propiedad que resulte de cualquier idea, método, instrucción o producto mencionado en el contenido.

Machine Translated by Google

cálculo

MDPI

Artículo

Identificación y comprensión de la dinámica de nuevos inhibidores de Dominio peptidasa de colagenasa G de 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] y Maryam Ishrat Niaz [7]

1 Departamento de Ciencias de Laboratorio Clínico, Facultad de Ciencias Médicas Aplicadas, Universidad de Taif, PO Box 11099, Taif 21944, Arabia Saudita; fouzeyyah@tu.edu.sa (FAA); maha1@tu.edu.sa (MB); a.shafie@tu.edu.sa (AS); hawsawi.nm@gmail.com (Nueva Hampshire); h.banjer@tu.edu.sa (HJB); a.awwadh@tu.edu.sa (AA)

2 Departamento de Patología y Medicina de Laboratorio, Programa Hospitalario de las Fuerzas de Seguridad, PO Box 3643, Riad 11481, Arabia Saudita; ahazazi@sfh.med.sa

3 Facultad de Medicina, Universidad Alfaisal, PO Box 50927, Riyadh 11533, Arabia Saudita

4 Departamento de Medicina Familiar y Comunitaria, Facultad de Medicina, Universidad King Saud (KSU), Riad 11481, Arabia Saudita; drnora@ksu.edu.sa

5 Centro Universitario de Medicina Familiar, Ciudad Médica de la Universidad Rey Saud, Universidad Rey Saud (KSU), Riad 11481, Arabia Saudita

6 Departamento de Cirugía Oral y Maxilofacial y Ciencias de Diagnóstico, Facultad de Odontología, Universidad de Taif, PO Box 11099, Taif 21944, Arabia Saudita; aaashour@tu.edu.sa

7 Departamento de Ciencias Básicas para Enfermería, Facultad de Enfermería, Universidad de Taif, PO Box 11099, Taif 21944, Arabia Saudita; mimohammad@tu.edu.sa

* Correspondencia: farahanjum@tu.edu.sa

Resumen: Clostridium histolyticum es una bacteria anaerobia Gram positiva perteneciente al grupo Clostridium género. Produce colagenasa, una enzima implicada en la descomposición del colágeno, que es clave Componente de los tejidos conectivos. Sin embargo, la resistencia a los antimicrobianos (RAM) plantea un gran desafío en combatir las infecciones causadas por esta bacteria. La larga duración del desarrollo de fármacos tradicionales técnicas ha dado lugar a un cambio hacia el diseño de fármacos asistido por ordenador y otros métodos modernos de descubrimiento de fármacos. aproches. El método anterior ofrece un medio rentable para recopilar información completa. sobre cómo los ligandos interactúan con sus proteínas diana. El objetivo de este estudio es crear novelas, fármacos explícitos que inhiben específicamente la enzima colagenasa de C. histolyticum . A través de una evaluación virtual basada en estructuras, se analizó una biblioteca que contiene 1830 compuestos para identificar posibles Candidatos a fármacos contra las enzimas colagenasas. Después de eso, la simulación de dinámica molecular (MD) se realizó en una solución acuosa para evaluar el comportamiento de la proteína y el ligando en una dinámica ambiente mientras que se ejecutó el análisis de la teoría funcional de la densidad (DFT) para predecir el propiedades y estructura de los compuestos de plomo, y se utilizó la técnica WaterSwap para obtener conocimientos sobre la interacción fármaco-proteína con las moléculas de agua. Además, el componente principal Se realizó un análisis (PCA) para revelar cambios conformacionales, puentes salinos para expresar electrostáticos. interacción y estabilidad de proteínas, y absorción, distribución, metabolismo, excreción y toxicidad. (ADMET) para evaluar el perfil farmacocinético de los principales compuestos y moléculas de control. Tres Se identificaron candidatos a fármacos potentes MSID000001, MSID000002, MSID000003 y el control con una puntuación de unión de −10,7 kcal/mol, −9,8 kcal/mol, −9,5 kcal/mol y −8 kcal/mol, respectivamente. Además, el análisis del área de superficie de Mecánica Molecular Poisson-Boltzmann (MMPBSA) de la Las trayectorias de simulación revelaron puntuaciones de energía de −79,54 kcal/mol, −73,99 kcal/mol, −62,26 kcal/mol, y −70,66 kcal/mol, respectivamente. Las propiedades farmacocinéticas exhibidas estuvieron bajo la rango aceptable. Los compuestos tienen el potencial de ser fármacos novedosos; por lo tanto, una mayor investigación debe realizarse para conocer su acción anticolagenasa contra las infecciones por C. histolyticum y resistencia a los antibióticos.

check for updates

Cita: Anjum, F.; Hazazi, A.; Alsaeedi, FA; Bakhuraysah, M.; Shafie, A.; Alshehri, NA; Hawsawi, NORTE.; Ashour, AA; Banjer, HJ; Alharthi, A.; et al. Identificación y Comprensión dinámica de la novela. Inhibidores del dominio peptidasa de Colagenasa G de Clostridium histolítico. Computación 2024, 12, 153. https://doi.org/10.3390/cálculo12080153

Editor Académico: Claudio Amovilli

Recibido: 27 de junio de 2024
Revisado: 18 de julio de 2024
Aceptado: 21 de julio de 2024
Publicado: 25 de julio de 2024

Copyright: © 2024 por los autores. Licenciatario MDPI, Basilea, Suiza. Este artículo es un artículo de acceso abierto. distribuido bajo los términos y condiciones de los Creative Commons Licencia de atribución (CC BY) (https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

Machine Translated by Google

Palabras clave: resistencia a los antimicrobianos; simulación dinámica molecular; análisis de componentes principales; puentes de sal; Intercambio de agua; diseño de fármacos basado en estructuras

1. Introducción

El aumento de bacterias resistentes a los medicamentos es una grave amenaza para la salud pública y la economía mundial, como lo demuestra el reciente aumento de las muertes bacterianas [1]. Al mismo tiempo, la lentitud con la que se descubren nuevos antibióticos empeora el problema y, en última instancia, podría provocar muertes por enfermedades menores actuales [2]. Para prevenir esta progresión, se deben tomar medidas inmediatas, lo que requiere la investigación de enfoques terapéuticos alternativos sin antibióticos. Entre ellos destacan como opción viable los fármacos antivirulencia, comúnmente denominados “patobloqueantes”. Estos medicamentos pueden prevenir o retrasar eficazmente enfermedades al atacar y prevenir los factores de patogenicidad de las bacterias [3].

La bacteria anaerobia Gram-positiva Clostridium histolyticum pertenece al género Clostridium, que comprende una amplia categoría de bacterias caracterizadas por tener la capacidad de producir una gran cantidad de toxinas y enzimas [4]. C. histolyticum es miembro de la clase Clostridia y del filo Firmicutes [5]. Principalmente, C. histolyticum ha atraído mucha atención en la investigación biomédica ya que tiene una sólida actividad enzimática junto con asociaciones con diversos tipos de afecciones y enfermedades médicas en humanos. Puede sobrevivir en una amplia gama de entornos, incluido el agua, el suelo y los intestinos de humanos y animales, debido a su estructura en forma de varilla junto con su capacidad para producir endosporas en condiciones ambientales desafiantes [6]. La enfermedad de Peyronie y la contractura de Du son dos tipos de enfermedades en las que las colagenasas de C. histolyticum han producido un metabolismo irregular del colágeno [7]. Durante estas condiciones, una alta concentración de depósitos de colágeno provoca contracturas y fibrosis del tejido, que limitan la función y causan dolor [7].

Las colagenasas, hialuronidasas, proteasas y hemolisinas representan algunos de los factores de virulencia que produce C. histolyticum . Estas enzimas son vitales en la invasión de tejidos, la lisis de la célula huésped y la patogénesis [8]. C. histolyticum produce cinco tipos distintos de toxinas. De ellas, las toxinas β son la causa principal de su patogénesis, mientras que las colagenasas son cruciales para la infección clostridial por el virus [9]. Las colagenasas se destacan entre estos factores de virulencia debido a su capacidad única para descomponer el colágeno, la proteína estructural clave que se encuentra en los tejidos conectivos [1]. Las enzimas proteolíticas llamadas colagenasas clostridiales atacan específicamente a las moléculas de colágeno. Inducen la rotura de las fibras de colágeno y la alteración del tejido conectivo al cortar los enlaces peptídicos dentro de la estructura triple helicoidal de las fibrillas de colágeno [10]. Estas enzimas exhiben un alto grado de especificidad de sustrato para numerosas formas de colágeno proteico, que incluyen los tipos I, II, III y IV [11]. Hay dos tipos de enzimas colagenasas, ColG y ColH [1]. La colagenasa H (ColH) y la colagenasa G (ColG) pertenecen a la familia de las metaloproteasas M9. Las colagenasas se consideran objetivos clave para el desarrollo de otros enfoques de tratamiento de la resistencia a los antibióticos, ya que afectan negativamente el desarrollo de infecciones bacterianas causadas por C. histolyticum [9].

Un estudio realizado por [12] utilizó péptidos sintéticos y aminoácidos no proteógenos con el objetivo de encontrar inhibidores contra las colagenasas de Clostridium histolyticum . El estudio tenía como objetivo encontrar nuevos inhibidores contra la tripsina y las colagenasas. Mediante acoplamiento molecular se ha estudiado la interacción entre aminoácidos y péptidos no proteinógenos con colagenasa de C. histolyticum y tripsina. Según el análisis de acoplamiento molecular, la N-terc- butoxicarbonilglicil-(S)-2-amino-3-(4-((4-fluorofenil)-etinil)-fenil)-α-alanina mostró una interacción prometedora con las colagenasas. El resultado muestra que el dipéptido es un buen inhibidor de las colagenasas.

Los investigadores han podido desarrollar nuevos medicamentos y vacunas que podrían reducir tanto el tiempo como el costo relacionados con el desarrollo de nuevos medicamentos a través de avances en bioinformática y enfoques computacionales [13]. Desarrollar un fármaco completamente nuevo mediante enfoques experimentales es una tarea difícil. La reutilización de medicamentos es una práctica emergente que implica la reutilización de medicamentos de uso común que previamente se ha demostrac

Machine Translated by Google

ffi

ff

ser seguro en ensayos en humanos para el tratamiento de diferentes enfermedades. Sin embargo, teniendo en cuenta el alto coste y el largo plazo, el enfoque no es sostenible [14]. El rápido aumento de la resistencia bacteriana obliga a los investigadores a centrarse en el desarrollo de fármacos novedosos y potentes [15]. Teniendo en cuenta las numerosas desventajas asociadas con el descubrimiento de fármacos tradicionales, el diseño de fármacos asistido por ordenador podría ser una alternativa más útil para la investigación debido a su menor precio y al consumo de pocos recursos [16]. Una técnica computacional popular utiliza una herramienta de diseño estructural de fármacos para examinar virtualmente múltiples bibliotecas de fármacos frente a un objetivo específico. Esto podría acelerar el proceso de diseño de fármacos al ahorrar tiempo en el desarrollo de nuevas pistas para apuntar a la enzima o proteína específica [17]. Teniendo esto en cuenta, durante este estudio se emplearon múltiples técnicas quimioinformáticas y biofísica para descubrir posibles fármacos líderes contra las colagenasas de C. histolyticum .

2. Metodología La

Figura 1 muestra una descripción esquemática del trabajo de investigación completo.

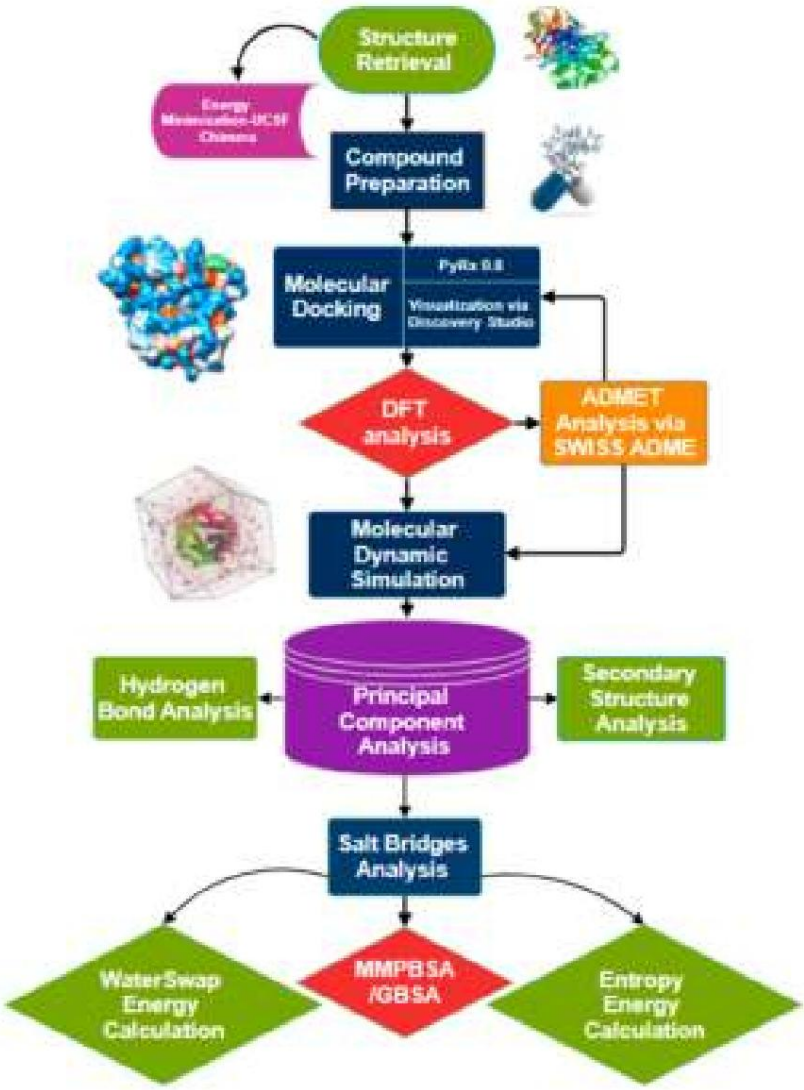


Figura 1. El flujo de trabajo computacional integrado comienza con (i) recuperación y preparación de estructuras seguidas de (ii) preparación de compuestos y (iii) acoplamiento molecular. A continuación, análisis DFT para estimar las propiedades y la estructura electrónica (iv), ADMET para evaluar el perfil farmacocinético (v) y simulación MD, (vi) análisis PCA así como (vii) análisis de estructura secundaria, (viii) análisis de enlaces de hidrógeno. (ix) Puentes de sal, (x) MMPBSA, (xi) Cálculo de energía de entropía y finalmente (xii) estimación de energía de intercambio de agua.

Machine Translated by Google

2.1. Recuperación y preparación de la estructura cristalina de la enzima

colagenasa La estructura cristalina de la colagenasa de C. histolyticum se recuperó del Protein Data Bank (PDB) https://www.rcsb.org/?ref=nav_home con identificación PDB; 7ZBV. Posteriormente, la estructura se cargó en UCSF Chimera v.1.17 para una visualización temprana, detección de residuos faltantes y detección de errores estructurales [18]. Para completar la estructura, se agregaron átomos y cargas de hidrógeno a través de Chimaera v1.17 utilizando las funciones "Agregar carga" y "AgregarH" [19]. A continuación, se aplicaron dos algoritmos para minimizar la energía: el algoritmo de gradiente conjugado, que se ejecuta durante 5000 pasos, y el algoritmo de descenso más pronunciado, que se ejecuta durante 5000 ciclos con un tamaño de paso de 0,02 Å [20]. Estos procedimientos cíclicos tienen como objetivo minimizar los problemas estéricos en la estructura de una enzima. Después de minimizar la energía, la estructura mejorada de la enzima se guardó en formato pdb.

2.2. Selección y preparación de la biblioteca de ligandos

Identificar inhibidores novedosos y potentes contra la enzima colagenasa, que contiene 1830 compuestos, utilizando varias fuentes naturales. La biblioteca MeFSAT de metabolitos secundarios y terapias de hongos medicinales se descargó en formato SDF [21]. Luego, la biblioteca se importó al software PyRx 0.8 para el proceso de minimización de energía [22].

El campo de fuerza MM2 se aplicó para minimizar inicialmente la energía del compuesto [23]. Los compuestos se convirtieron al formato pdbqt para la detección virtual basada en estructuras [24].

2.3. Estudios de acoplamiento molecular

La detección virtual basada en estructuras es una técnica eficaz para detectar bibliotecas de medicamentos frente a cualquier biomolécula objetivo [25]. Utilizando Auto Dock en PyRx 0.8, se llevó a cabo una detección virtual de compuestos dirigidos a una proteína específica [26]. Después de cargar la biblioteca química y de proteínas objetivo en PyRx para minimizar aún más la energía, todos los ligandos se convirtieron al formato Auto Dock. Además, Auto Dock hizo que el acoplamiento de los tres ligandos principales fuera considerablemente más rápido. Según la puntuación de las energías de enlace, se ordenaron las moléculas. Aquellos con la puntuación de energía más baja se eligieron por su conformación de unión estable y, a continuación, se llevaron a cabo la alineación estructural, el análisis y la visualización tridimensionales (3D) a través de Discovery Studio 2.4 [27].

2.4. Teoría del funcional de densidad (DFT)

Todas las estructuras estudiadas se optimizaron utilizando el funcional B3LYP con corrección GD3 y un conjunto de bases 6–311+G (d, p) utilizando el método de cálculo DFT [28]. La optimización de la geometría se utilizó además para verificar la conformación estable de las estructuras estudiadas junto con descriptores químicos y parámetros de reactividad molecular, como la brecha de energía, el potencial químico y de ionización, el orbital molecular de frontera (FMO), la afinidad electrónica, la electronegatividad, la dureza química, la suavidad y la electrófila. También se estimó el índice para encontrar la naturaleza nucleofílica y electrófila, la reactividad química y la estabilidad [29].
Suite Gaussian16 (https://gaussian.com/gaussian16/) Se utilizó para todos los cálculos.
Se empleó la herramienta de visualización molecular GaussView6 para visualizar y generar mapas de contorno y mapas de potencial electrostático molecular (MEP) [30]. Estos mapas podrían ayudar en la identificación de posibles áreas que participan en reacciones químicas o que son cruciales para las interacciones fármaco-receptor [31].

2.5. Perfil ADME y farmacocinética

ADME y la actividad farmacológica de clientes potenciales seleccionados desempeñan un papel importante en la caja de herramientas de desarrollo de fármacos [32]. El perfil de análisis de adsorción, distribución, metabolismo y excreción se determinó utilizando SwissADME http://www.swissadme.ch/. Para el análisis de predicción de la toxicidad de los compuestos se utiliza una base de datos denominada pkCSM https://biosig.lab. uq.edu.au/ fue utilizado [33].

Machine Translated by Google

2.6. Simulación dinámica molecular

Dado que el análisis de acoplamiento puede ser inexacto, es necesario realizar una validación adicional , particularmente a través de la técnica de simulación MD [34]. La etapa inicial en la preparación de complejos de proteínas y ligandos para la simulación de MD fue el análisis de acoplamiento [35]. El sitio de unión de un ligando al bolsillo activo de la proteína en condiciones estáticas se determinó mediante estudios de acoplamiento molecular [36]. Se pudo predecir la posición de unión del ligando durante condiciones fisiológicas difíciles mediante el uso de simulaciones MD [37]. Los complejos se procesaron inicialmente utilizando el programa Antechamber de AMBER22. La proteína receptora fue creada por el campo de fuerza FF14Sb, mientras que los compuestos se elaboraron utilizando el campo de fuerza GAFF 5 [38]. La simulación MD se realizó en tres fases, que incluyeron la generación del archivo prtmtop, la etapa de preprocesamiento y el paso de producción [39]. Después de añadir contraiones, los complejos acoplados específicamente elegidos se sumergieron inicialmente en la caja de agua TIP3P. Después de eso, cada complejo pasó por una producción de 200 ns y luego se calentó gradualmente a 310 K y se permitió su estabilización [40]. Para estudiar la selección de complejos 57 basada en la estructura, se utilizó el CPPTRAJ. El gráfico de simulación 60 se ha creado utilizando XMGRACE v5.1 [41].

2.7. Análisis de enlaces de

hidrógeno Es importante contar el número de enlaces de H formados entre los compuestos y los residuos en el sitio activo de la enzima después de la simulación, ya que esto indica con qué firmeza se unen los compuestos [42]. En esta investigación, estudiamos la formación de enlaces de hidrógeno entre los compuestos y el sitio activo de los residuos enzimáticos mediante simulaciones de dinámica molecular. El programa AMBER22 se utilizó para la configuración, el equilibrio y el desarrollo de trayectorias del sistema. Posteriormente se aplicó el módulo cpptraj de AMBER para estudiar los enlaces H. Además, se empleó un ángulo de corte de 120° y una distancia de corte de 3,5 Å entre los átomos donadores y aceptores de hidrógeno para determinar los enlaces de H [43].
La visualización de los enlaces de H se realizó utilizando un software de visualización molecular como dinámica molecular visual (VMD) v1.9.3 [44].

2.8. Calcular las afinidades vinculantes

Obtener información sobre la energía libre de unión es vital para comprender cómo interactúan los ligandos y las proteínas [45]. Se utilizaron las técnicas AMBER22 MM/PBSA para calcular las energías libres de unión (unión G) de los complejos. Utilizando la MMPBSA, se estimó la energía libre de unión entre los compuestos y la enzima colagenasa principal [46]. Las energías de enlace se calcularon utilizando la siguiente ecuación:

$$\begin{aligned} EMM &= \Delta Eint + \Delta Eele + \Delta Evdw\ \Delta Gasol \\ &= \Delta Gp + \Delta Gnp\ \Delta Gtotal = \\ \Delta EMM &+ \Delta Gsol\ \Delta Gbind = \Delta EMM \\ &+ \Delta Gsol - T \end{aligned} \quad (1)$$

donde ΔEMM representa un cambio total de energía de la mecánica molecular, ΔEint representa un cambio total de energía de interacciones internas, ΔEele representa un cambio total de energía electrostática, ΔEvdw representa un cambio total de energía de van der Waals, ΔGsol representa un cambio total de energía de solvatación, ΔGp muestra el cambio total de energía de solvatación polar y ΔGnp para un cambio total de energía de solvatación no polar.

2.9. Cálculo de energía de entropía

Se utilizó un método de estimación de modo normal en el software AMBER v22 para estimar la energía de entropía de cada complejo [47]. Para garantizar un muestreo conformacional representativo, se eligieron diez cuadros de las trayectorias de simulación MD. Luego, estos marcos se sometieron a un análisis en modo normal para calcular de forma independiente la energía de entropía para cada complejo.

Machine Translated by Google

2.10. Estimación de energía absoluta de WaterSwap

Utilizando una técnica avanzada WaterSwap, se calculó la energía libre de unión absoluta de los complejos para validar la formación de complejos intermoleculares fuertes [48].
Esta técnica es más precisa y eficaz que MMPB/GBSA, ya que muestra la función vital que desempeñan las moléculas de agua al promover la interacción entre los ligandos y los residuos del sitio activo en una enzima específica [49].

2.11. Análisis de estructura secundaria

Se realizó un análisis de la estructura secundaria de las proteínas objetivo para identificar las diferencias en los patrones de la estructura secundaria [50]. El módulo VMD de AMBER22 se utilizó para el análisis de la estructura secundaria de la enzima objetivo.

2.12. Análisis de Componentes Principales (PCA)

PCA, a menudo denominada Dinámica Esencial (ED), es una técnica que simplifica los datos y explica los cambios de movimiento observables de la proteína durante el período de simulación [51]. En el presente estudio, la PCA se logró diagonalizando la matriz de covarianza construida usando los átomos Cα de la enzima recodificada en el SMT usando la siguiente ecuación:

$$C = <(qi - <qi>)(qj - <qj>)T> \quad (2)$$

mientras que <qi> y <qj> representan sus posiciones medias sobre grupos conformacionales derivados de simulaciones MIMD, y qi y qj son las coordenadas cartesianas de los átomos i-ésimo y j-ésimo de Cα en la enzima objetivo, respectivamente. En conjunto, el valor propio y el vector propio resultantes de la diagonalización indican el movimiento coordinado del dominio estructural y su amplitud fluctuante en un vector propio, respectivamente. Para realizar el PCA se utilizó el programa CPPTRAJ en Amber [52].

2.13. Puentes de

sal El programa de software AMBER22 se utilizó para realizar una evaluación computacional de puentes de sal [53]. La realización de análisis de puentes salinos es vital por varias razones en el diseño computacional de fármacos. Las estructuras de las proteínas se estabilizaron y las interacciones moleculares se vieron influenciadas por los puentes salinos, que se forman entre residuos de aminoácidos con cargas opuestas en una proteína [45]. Mediante el análisis computacional de los puentes salinos, los investigadores pueden aprender más sobre la dinámica y la estabilidad de los complejos proteína-ligando, lo que ayuda a identificar interacciones importantes necesarias para la unión del fármaco [54].

3. Resultados

3.1. Recuperación de estructuras y preparación inicial

El estudio reciente se realizó para identificar inhibidores potentes contra Clostridium hsitolyticum con la principal enzima colagenasa. La estructura se recuperó de PDB utilizando el ID de PDB; 7ZBV. Las colagenasas tienen Simetría global: Asimétrica—C1 y Estequiometría Global: Monómero—A1. Para determinar la estructura enzimática accesible con una resolución de 1,95 Å se utilizó el método de difracción de rayos X. La estructura cristalina se visualizó mediante UCSF Chimera v.1.17. La Figura 2 muestra la estructura tridimensional general (3D) de la colagenasa que representa la hélice alfa, los residuos catalíticos y las cadenas beta. Además, la Figura 2 también muestra una vista en primer plano de los sitios activos implicados en la unión del ligando.

Machine Translated by Google

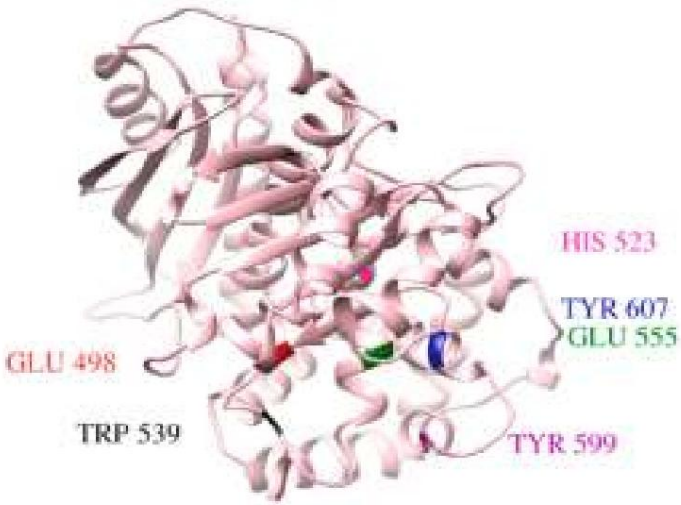


Figura 2. Destaca los residuos del sitio activo marcados GLU498, TRP539, HIS523, TYR607, GLU555 y TYR599 en la estructura tridimensional (3D) de la enzima colagenasa.

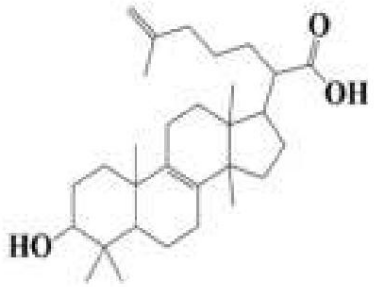
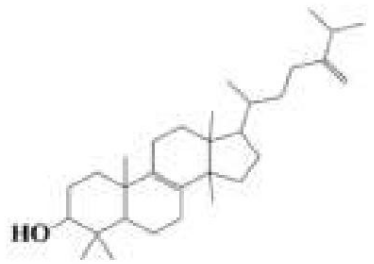
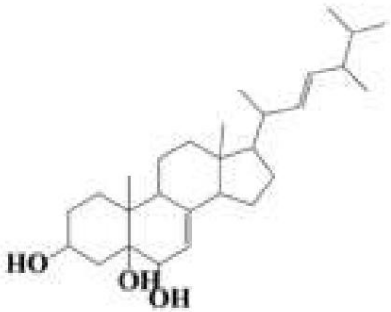
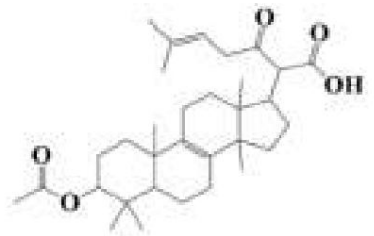
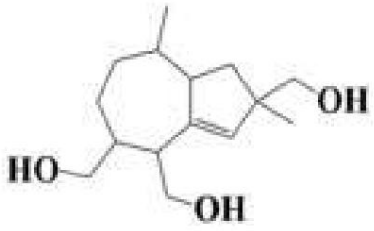
3.2. Análisis de posturas/acoplamiento molecular e interacción de unión

El acoplamiento molecular proporciona una mejor comprensión de la interacción entre proteínas y ligandos en el proceso de desarrollo de fármacos [32]. En este estudio se recuperó una biblioteca en estructura formato de archivo de datos (SDF). Los metabolitos secundarios y la terapéutica de los hongos medicinales. Se eligió la biblioteca MeFSAT que tiene 1830 compuestos para identificar los inhibidores potenciales. contra la enzima colagenasa de C. histolyticum . Se realizó una detección virtual basada en estructuras para 1830 compuestos frente a la enzima objetivo utilizando el PyRx 0.8 AutoDock. Herramienta de vina. Según las puntuaciones de unión, se seleccionaron como aciertos 10 compuestos que mostraban una fuerte interacción con la enzima colagenasa. Su estructura y química. Los nombres junto con sus puntuaciones de unión se dan en la Tabla 1. Para validar los resultados del acoplamiento y evaluar su potencial como inhibidores de la enzima colagenasa, 3/10 compuestos fueron seleccionados para análisis computacional adicional, es decir, simulación dinámica molecular. El El análisis de acoplamiento reveló que los tres compuestos principales (MSID1) 2-(3-hidroxi-4,4,10,13,14-pentametil2,3,4,5,6,7,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahidro-1H-ciclopenta[a]fenantren- 17-il)-6-metilhept-6-enoico ácido, (MSID2) 4,4,10,13,14-pentametil-17-(6-metil- 5-metilenheptan-2-il)-2,3,4,5,6,7,10,11,12 ,13,14,15,16,17-tetradecahidro-1H-ciclopenta[a] fenantren-3-ol y (MSID3) (E)-17-(5,6-dimetilhept-3-en-2-il)-10,13-dimetil-2,3,4,5,6, El 9,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahidro-1H-ciclopenta[a]fenantreno-3,5,6-triol mostró puntuaciones de unión prometedoras de −10,7 kcal/mol, −9,8 kcal/mol y −9,5 kcal/mol, respectivamente, mientras que el control mostró una puntuación de unión de −8 con la enzima colagenasa La interacción y las posturas de unión de los compuestos de impacto se muestran en la Figura 3. Al análisis de las posturas de unión y la interacción, se reveló que MSID1, con el mayor puntuación de unión de -10,7, formó enlaces de hidrógeno convencionales con Tyr496 e hizo van Interacción der Waals con Glu498, Tyr599, Trp604, Ile497, Glu524, Leu495, Glu555, Gly493, y Asn492. HIS527 mostró la interacción del enlace carbono-hidrógeno, mientras que Alkyl y Se observó interacción Pi-Alquilo con Trp39 y Ala531, respectivamente (Figura 4). MSID2 con la segunda puntuación de unión más alta de -9,8 reveló la interacción de van der Waals con Ile576, Glu559 y Arg573. His523, Glu524, Asn 492, Glu555, Trp539, Tyr599, Trp604, Glu519 y Gly 493 mientras que Tyr607 par Alky y PHE515 Pi-sigma interactúan respectivamente (Figura 4). MSID3, que tiene la tercera puntuación de unión más alta -9,5, formó la interacción de van der Waals con Leu520, Tyr607, Glu524, Tyr599, His527, Ile497, Ala531, Glu498, Tyr496, Leu495, Asn492, Gly494, Phe515 y Trp539 combinan la interacción Pi-Sigma con la proteína receptora (Figura 4). Sin embargo, también se observó que la molécula de control formaba enlaces de hidrógeno convencionales con His527, Glu498 y Tyr496, mientras que Pro499, Ala531, Tyr528, Glu555 e Ile497 mostraron van Interacción der Waals. Además, Leu495 y Trp539 combinan Pi-Alkyl y Pi-Pi apilados

Machine Translated by Google

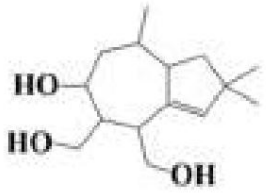
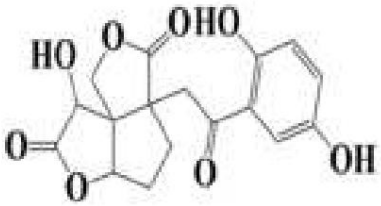
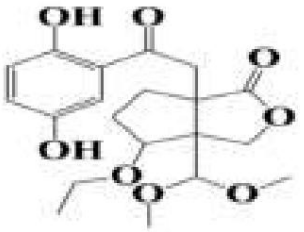
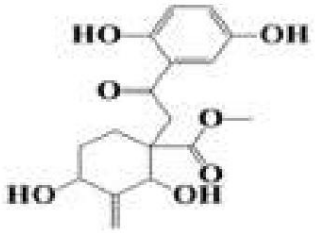
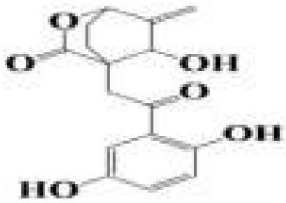
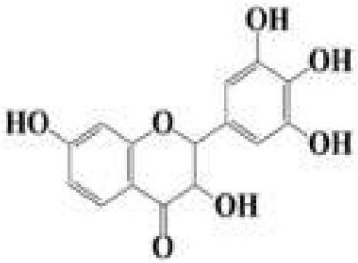
interacción (Figura 4). Los residuos de la enzima colagenasa que se observaron en interacción con los 3 compuestos principales se muestran en la Tabla 2.

Tabla 1. Los 10 compuestos principales con las mayores afinidades de unión, nombres químicos junto con sus estructuras químicas.

S.No	Compuestos	Estructura	Afinidad vinculante
1	MSID000001 2-(3-hidroxi-4,4,10,13,14-pentametil2,3,4,5,6,7,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahidro-1H- ácido ciclopenta[a]fenantren-17-il)-6-metilhept-6-enoico		−10,7 kcal/mol
2	MSID000002 4,4,10,13,14-pentametil-17-(6-metil-5-metilenheptan-2-il)-2,3,4,5,6,7,10,11,12,13,14, 15,16,17-tetradecahidro-1H-ciclopenta[a]fenantren-3-ol		−9,8 kcal/mol
3	MSID000003 (E)-17-(5,6-dimetilhept-3-en-2-il)-10,13-dimetil-2,3,4,5,6,9,10,11,12,13,14, 15,16,17-tetradecahidro-1H-ciclopenta[a]fenantreno-3,5,6-triol		−9,5 kcal/mol
4	MSID000004 2-(3-acetoxi-4,4,10,13,14-pentametil-2,3,4,5,6,7,10,11,12,13,14,15,16,17-tetradecahidro-Ácido 1H-ciclopenta[a]fenantren-17-il)-6-metil-3-oxohept-5-enoico		−9,3 kcal/mol
5	MSID000006 2,8-dimetil-1,2,4,5,6,7,8,8a-octahidroazulen-2,4,5-triil)trimetanol		−9,2 kcal/mol

Machine Translated by Google

Tabla 1. Cont.

S.No	Compuestos	Estructura	Afinidad vinculante
6	MSID000009 (6-hidroxi-2,2,8-trimetil-1,2,4,5,6,7,8,8a-octahidroazulen-4,5-diil)dimetanol		−9 kcal/mol
7	MSID000010 3a-(2-(2,5-dihidroxifenil)-2-oxoetil)-8-hidroxitetrahidrociclopenta[1,2-b:2,3-c′]difuran-3,7(1H,8H)-diona		−8,9 kcal/mol
8	MSID000016 6a-(2-(2,5-dihidroxifenil)-2-oxoetil)-3a-(dimetoximetil)-4-etoxihexahidro-1H-ciclopenta[c]furan-1-ona		−8,6 kcal/mol
9	MSID000020 1-(2-(2,5-dihidroxifenil)-2-oxoetil)-2,4-dihidroxi-3-metilenciclohexanocarboxilato de metilo		−8,5 kcal/mol
10	MSID000022 4-(2-(2,5-dihidroxifenil)-2-oxoetil)-5-hidroxi-6-metilen-2-oxabiciclo[2.2.2]octan-3-ona		−8,4 kcal/mol
11	Control 3,7-dihidroxi-2-(3,4,5-trihidroxifenil)croman-4-ona		−8 kcal/mol

Machine Translated by Google

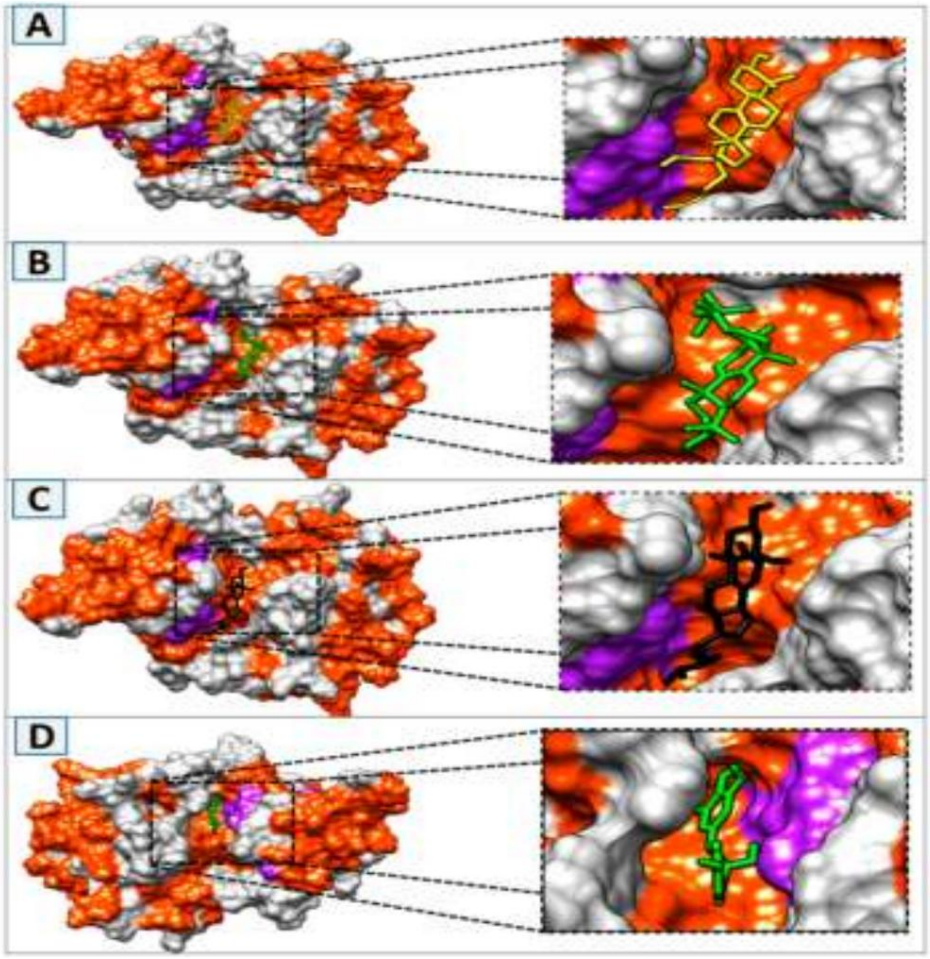


Figura 3. La interacción de acoplamiento tridimensional (3D) y las posturas de unión de la enzima objetivo con ligandos como MSID000001 (A), MSID000002 (B), MSID000003 (C) y Control (D).

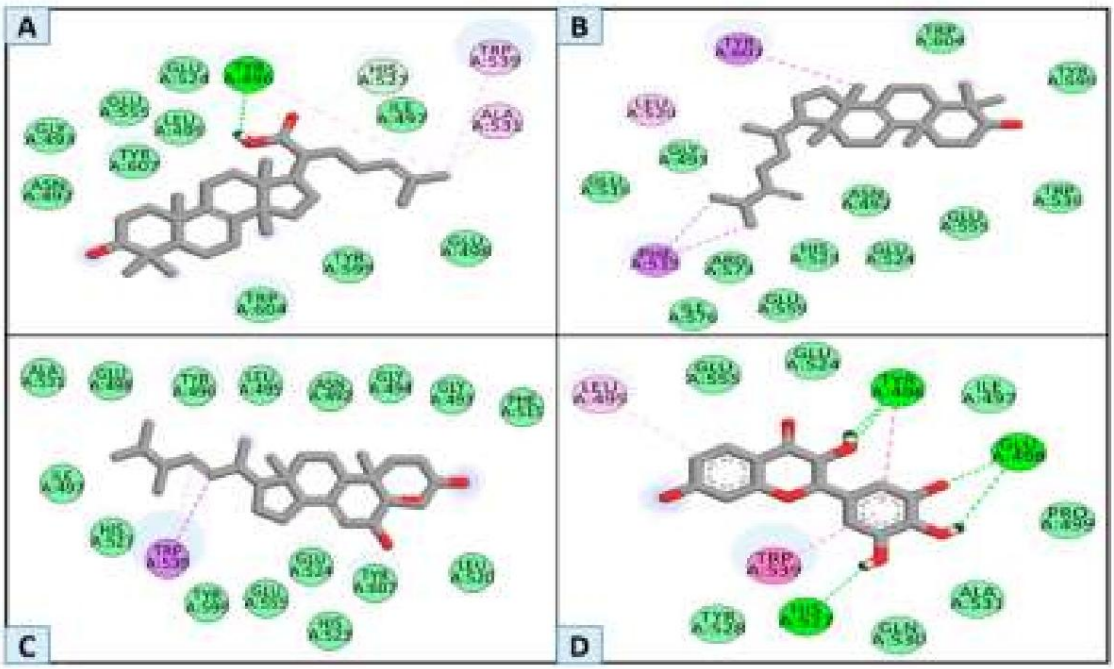


Figura 4. La interacción bidimensional (2D) entre la enzima colagenasa objetivo y los ligandos MSID000001 (A), MSID000002 (B), MSID000003 (C) y Control (D).

Machine Translated by Google

Tabla 2. La tabla muestra el perfil de interacción de aminoácidos de los compuestos afectados y las moléculas de control. con la enzima objetivo.

Compuestos	H-Bond	Van der Waals	Pi-alquilo	alquilo	Carbón-Hidrógeno Vínculo	Pi-Sigma	Pi-Pi apilados y Pi-Pi En forma de T
MSID000001	Tyr496	Glu498, Tyr599, Trp604, Ile497, Glu524, Leu495, Glu555, Gly493, asn492	Trp530	ala531	Su527	-	-
MSID000002	-	Ile576, Glu559, Arg573. Su523, Glu524, Asn492, Glu555, Trp539, Tyr599, Trp604, Glu519, Gly493	-	leu520	-	phe515, Tyr607	-
MSID000003	-	Leu520, Tyr607, Glu524, Tyr599, Su527, Ile497, Ala531, Glu498, Tyr496, Leu495, Asn492, Gly494, phe515	-	-	-	Trp539	
Control	Su527, glu498, Tyr496	Pro499, Ala531, Gln530,Tyr528, glu555, Ile497,Glu524	leu495	-	-	-	Trp539, Leu495

3.3. Teoría del funcional de densidad (DFT)

La Tabla 3 proporciona un análisis exhaustivo que incluye varias características como energías de optimización medidas en unidades atómicas, momentos dipolares medidos en Debye, polarizabilidad (α) medida en unidades atómicas, y energías HOMO/LUMO y sus relativas brecha de energía, medida en electronvoltios (eV). Estas características se presentan para los compuestos. bajo investigación. La gama de energías de optimización Hartree presentadas, que van desde au −1105.73 (control) a—au1398.26 (MSID000001), indica los distintos niveles de estabilidad entre las estructuras que se investigan. El compuesto más estable La conformación es MSID000001, que tiene un alto valor de energía negativa de au −1398,26. A esto le sigue MSID000003 con un valor de au −1320,80, luego MSID000002 con un valor de au −1288,26. El control tiene la conformación menos estable, con un valor de au −1105,73.

Tabla 3. Energías de optimización, energías HOMO y LUMO, y su gap calculado en el gas fase en el nivel B3LYP/6–311+G(d, p) de cálculos DFT.

Código de ligando	Mejoramiento Energía (au)	dipolo Momento (adiós)	Polarizabilidad (α) (au)	EH (eV)	EL (eV)	P.ej (eV)
Control	−1105,73	6.10	207.35	−6,45	−1,86	4.59
MSID000001	−1398,26	3.08	347,85	−6,13	−0,43	5.71
MSID000002	−1288,26	1,80	352,91	−6,01	−0,21	5.81
MSID000003	−1320,80	2.30	338.32	−6,53	−0,51	6.02

La Figura 5 muestra las estructuras óptimas de los compuestos bajo investigación, proporcionando una representación visual de sus topologías químicas y disposiciones espaciales. Todo

Machine Translated by Google

Los compuestos que se investigaron exhibieron una conformación estable como mínimos locales reales, como lo demuestran las frecuencias imaginarias positivas medidas. El MSID000001 exhibe un momento dipolar significativo, lo que sugiere un fuerte potencial electrostático que puede afectar su afinidad de unión con la proteína objetivo elegida. Los valores de polarizabilidad medidos oscilaron entre 207,35 (control) y 347,85 (MSID000001), 352,91 (MSID000002) y 338,32 (MSID000003) unidades atómicas (au). Esto sugiere un espectro de reactividad molecular entre los productos químicos probados. Las propiedades nucleofílicas y electrófilas están correlacionadas con los valores energéticos del HOMO y el LUMO. La molécula MSID000002 tiene una importante propiedad donadora de electrones debido a su alto valor de energía HOMO de eV −6,01. La nube de densidad LUMO es una nube vacía que exhibe una propiedad de aceptación de electrones. El producto químico MSID000001 exhibe una brecha de energía baja de eV 5,71, que es mayor que el valor de control de eV 4,59. Esto indica que MSID000001 tiene una mayor reactividad en comparación con los otros compuestos investigados.

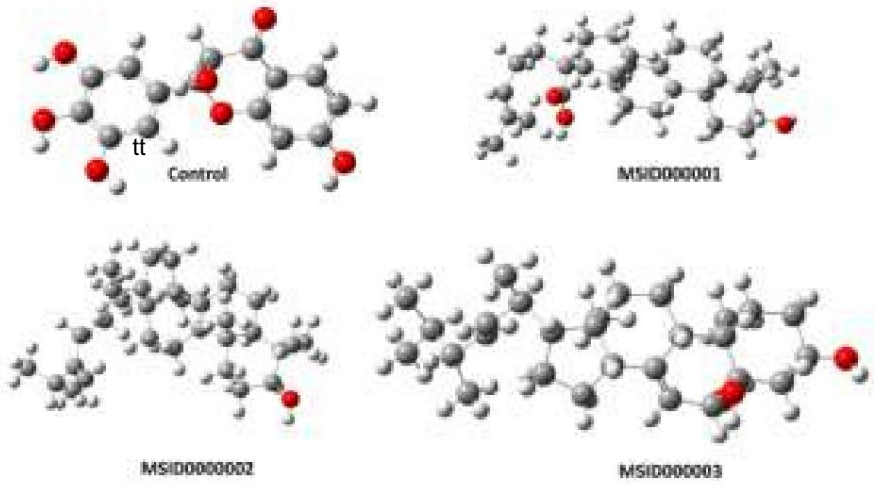


Figura 5. Estructuras optimizadas de los compuestos estudiados en el nivel B3LYP/6–311+G(d, p) de análisis DFT en fase gaseosa.

La Figura 6 muestra los mapas de contorno de los orbitales HOMO-LUMO junto con sus correspondientes valores de brecha de energía. Los valores de energía HOMO/LUMO se utilizaron para crear los descriptores de reactividad global, que funcionaron como instrumentos importantes para comprender las propiedades de los medicamentos y sus posibles interacciones con objetivos biológicos. El compuesto MSID000003 exhibió un alto potencial de ionización (I = 6,53), superando en consecuencia al control (6,45), MSID000001 (6,13) y MSID000002 (6,01). Esto indica que MSID000003 posee una notable capacidad para donar electrones en comparación con los otros compuestos bajo investigación.

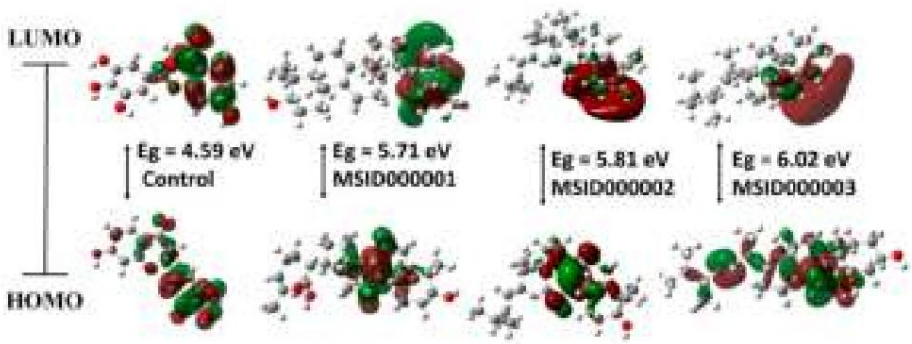


Figura 6. Gráficos de contorno de HOMO y LUMO de los compuestos estudiados.

Por el contrario, el compuesto MSID000002 tenía un valor de afinidad electrónica bajo (A = 0,21), lo que indica que tiene la capacidad más baja entre los compuestos para aceptar electrones. El

Machine Translated by Google

Los valores de dureza y suavidad varían de 1,37 a 2,80 y de 0,68 a 1,40, respectivamente, y fueron calculado para los compuestos bajo investigación. La molécula MSID000002 presenta una alto nivel de reactividad, como se ve por su elevado valor de suavidad (S = 1,40). La electrofilicidad El valor (ω) osciló entre 11,76 (control) y 17,08 (MSID000003), lo que indica su capacidad para interactúan con andamios nucleofílicos de objetivos biológicos. Los descriptores de reactividad del Las sustancias bajo investigación se proporcionan en la Tabla 4.

Tabla 4. Descriptores de reactividad global de los compuestos objetivo.

Código de ligando	Químico Potencial μ (eV)	Electronegatividad χ (eV)	Dureza η (eV)	Blandura S (eV)	Electrofilicidad ω(eV)	Ionización Potencial (I)	Electrón Afinidad (A)
Control	4.15	−4,15	1.37	0,68	11.76	6.45	1,86
MSID000001	3.28	−3,28	2.64	1.32	14.20	6.13	0,43
MSID000002	3.11	−3.11	2,80	1,40	13.53	6.01	0,21
MSID000003	3.52	−3,52	2,75	1.38	17.08	6.53	0,51

Los mapas de potencial electrostático molecular son herramientas esenciales para visualizar la carga. patrón de distribución de las moléculas investigadas. En el contexto del eurodiputado, como se muestra en En la Figura 7, las áreas rojas indican ubicaciones que tienen una mayor afinidad por los centros ricos en electrones. Estas regiones se consideran susceptibles a ataques electrofílicos. Por el contrario, el azul los puntos indican regiones donde las moléculas tienen una mayor afinidad por los centros deficientes en electrones, lo que facilita los ataques nucleofílicos. Las regiones electrófilas y nucleófilas de un La molécula juega un papel crucial en la formación de contactos polares con residuos de aminoácidos específicos. El Las partes de color verde amarillento exhibieron el aspecto neutro de los productos químicos examinados, lo que indica sus posibles interacciones de van der Waals con la proteína objetivo.

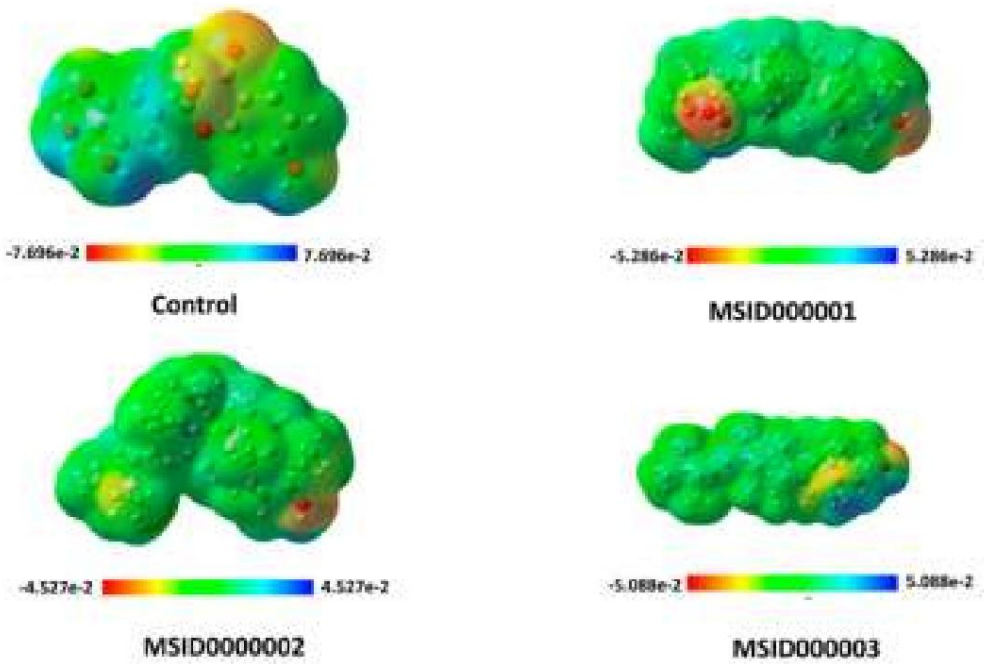


Figura 7. Mapas de potencial electrostático molecular (MEP) para los compuestos estudiados.

La Figura 7 ilustra los mapas de potencial electrostático molecular de las sustancias bajo investigación. La presencia de potencial de carga negativa, indicada por manchas rojas en átomos de oxígeno en las estructuras analizadas, sugiere que estas ubicaciones son susceptibles a Ataques electrófilos. Estas ubicaciones pueden potencialmente operar como sitios para interacciones polares. con importantes residuos de aminoácidos, ya que son capaces de aceptar enlaces de hidrógeno.

Machine Translated by Google

3.4. Perfiles de absorción, distribución, metabolismo, excreción y toxicidad (ADMET)

También se evaluaron las características fisicoquímicas de los compuestos seleccionados. Se analizaron la fórmula química del compuesto, el peso molecular, el número de átomos pesados aromáticos, la proporción de Csp3, las propiedades fisicoquímicas de refractividad, TPSA y el número de donantes y aceptores de enlaces de H. Además, se evaluaron estudios de farmacocinética, solubilidad en agua y lipofilicidad de los compuestos. A continuación, en el análisis del perfil farmacocinético se estudiaron la absorción GI, el sustrato de P-gp, la permeabilidad de la BHE, las características de la química medicinal y la similitud con los fármacos de los compuestos identificados . Las tablas S1 a S4 incluyen toda esta información. Los compuestos fueron identificados como moléculas similares a fármacos porque tienen características fisicoquímicas adecuadas. También se observó que los compuestos tenían un rango aceptable de farmacocinética y biodisponibilidad oral de absorción gastrointestinal. Los compuestos tienen una alta puntuación de accesibilidad sintética, lo que los hace sencillos de sintetizar. De manera similar, los compuestos no tuvieron ensayo PAINS y, por lo tanto, fueron espec

3.5. Simulación dinámica molecular

Con el “software AMBER20”, los complejos acoplados en la parte superior y la molécula de control se sometieron a una simulación MD de 500 ns. Las trayectorias de simulación generaron datos para (i) desviación cuadrática media (RMSD), (ii) fluctuación cuadrática media (RMSF), (iii) radio de giro (RoG), (iv) análisis del factor beta y (v) solvente. superficie accesible (SASA).

La estabilidad del complejo proteína-ligando durante el período de simulación se puede observar en la figura RMSD. Si el RMSD aumenta de manera constante, indica una desviación estructural; mientras que si se estabiliza, representa equilibrio [55]. Los tres complejos principales MSID000001, MSID000002 y MSID000003 junto con la molécula de control mostraron estabilidad durante todo el período de simulación sin desviaciones importantes y se observaron cambios en las posturas de unión del ligando con un RMSD promedio de 1,96 Å, 2,01 Å, 1,59 Å y 1,60 Å. mientras que los valores máximos observados fueron 2,76 Å, 3,07 Å, 2,31 Å y 2,27 Å, respectivamente (Figura 8A). La flexibilidad de los residuos de aminoácidos en el complejo proteína-ligando se puede observar mediante análisis RMSF (Figura 8B). En el gráfico RMSF, los valles denotan regiones rígidas mientras que los picos indican regiones con mayor flexibilidad [56]. El análisis RMSF mostró una fluctuación notable al comienzo del período de simulación; sin embargo, la estabilización puede ocurrir después de 200 ns. Los valores mínimos de RMSF mostrados fueron 0,95 Å, 0,88 Å, 0,87 Å y 0,82 Å, siendo los valores máximos 3,28 Å, 4,41 Å, 5,44 Å y 3,74 Å respectivamente. Los valores más bajos para los tres complejos principales y el control fueron 0,44 Å, 0,40 Å, 0,44 Å y 0,38 Å secuencialmente para MSID000001, MSID000002, MSID000003 y Control. Durante la simulación, la rigidez de la combinación proteína-ligando se evalúa mediante el análisis del radio de giro (RoG). Siempre que aumenta RoG, indica relajación o expansión; cuando disminuye, indica compacidad y rigidez [38]. De acuerdo con la formación de un complejo proteína-ligando estable, los resultados de nuestra simulación indican que cada complejo permaneció rígido y compacto durante los períodos de simulación, lo que sugiere la estabilización y compactación de los complejos (Figura 8C). Sus valores promedio observados fueron 21,88 Å, 21,77 Å, 21,65 Å y 21,68 Å MSID000001, MSID000002, MSID000003, mientras que los valores máximos de 22,19 Å, 22,16 Å, 22,04 Å y 22,03 Å y los más bajos de 21. 45 Å, 21,43 Å, 21,31 Å , y 21,35 Å observados. Los valores bajos de RoG sugieren una estructura compacta, mientras que un aumento muestra expansión y eran plegamiento. El análisis de factores β obtiene información sobre la flexibilidad y movilidad de átomos individuales

dentro del complejo proteína-ligando [57]. Los resultados del factor beta indican que los valores medios para los tres complejos principales y el control son 29,55 Å, 27,96 Å, 26,06 Å y 22,17 Å, respectivamente.
Sus valores máximos obtenidos fueron 283,7 Å, 513,97 Å, 780,8 Å y 370,05 Å de forma similar. Además, sus valores más bajos observados fueron 5,12 Å, 4,39 Å, 5,28 Å y 3,92 Å para MSID000001, MSID000002 y MSID000003, respectivamente. Cierre la posición de unión del ligando con valores que oscilan entre 22 y 29, lo que refleja una mejor flexibilidad en los residuos implicados en la unión e interacción del ligando (Figura 8D).

Machine Translated by Google

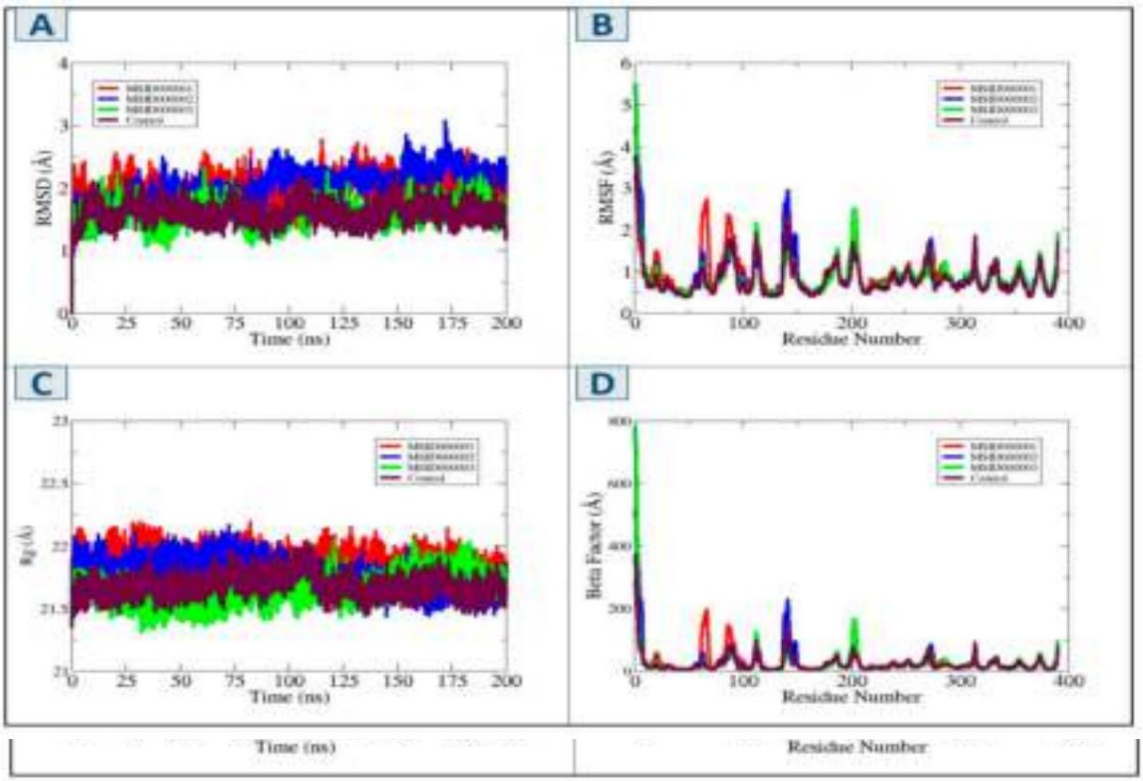


Figura 8. Los complejos MSID000001, MSID000002 y MSID000003 controlan la flexibilidad, compacidad y estabilidad de las moléculas mediante (A) RMSD, (B) RMSF, (C) RoG y (D) factores β.

3.6. Área de superficie accesible a disolventes (SASA)

Se realizó un análisis del área de superficie accesible al disolvente (SASA) en los complejos superiores para descubrir la interacción entre las moléculas del disolvente en la superficie de la proteína objetivo. Se obtuvieron los valores promedio para MSID000001, (1722.1 nm2), MSID000002 (16,649.3 nm2), MSID000003 (16,502 nm2), y control (16,625 nm2), mientras que los valores máximos se revelaron como (18,620.3 nm2), (17,906.5 nm2), (18.158,8 nm2), y el control fue (18.013,1 nm2), respectivamente. Por el contrario, los valores más bajos observados fueron MSID000001 (14.723,8 nm2), MSID000002 (14.772,3 nm2), MSID000003 (1446,2 nm2) y el control (14.633,3 nm2). Los gráficos ilustran que después de la unión del ligando, no se observaron desviaciones importantes, como se muestra en la siguiente Figura 9.

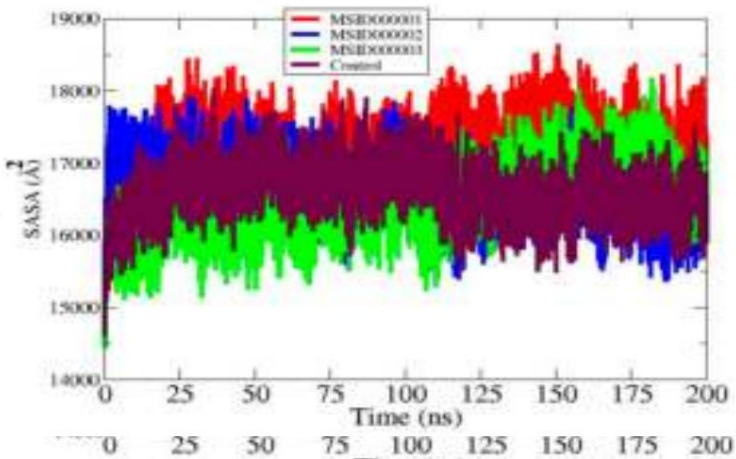


Figura 9. Información sobre los tres complejos principales y control con la enzima colagenasa objetivo.

3.7. Análisis de enlaces H Era

vital enfatizar el importante papel de los enlaces de hidrógeno en el mantenimiento de complejos entre ligandos y receptores acoplados. Identificar cuál de los residuos enzimáticos

Machine Translated by Google

Era especialmente necesaria la formación de enlaces de hidrógeno con los compuestos. Como se demostró En la Tabla 5, el átomo de hidrógeno que forma el enlace se denomina "donante", mientras que el El átomo cargado negativamente que toma el enlace se denomina "aceptor". el porcentaje del tiempo de simulación donde existe el enlace de hidrógeno se puede ver en el campo “Ocupación” columna. Los enlaces de hidrógeno formados por la enzima del receptor con los tres ligandos principales. Las moléculas se dan en la tabla.

Tabla 5. Los enlaces de hidrógeno formados entre los ligandos y el sitio activo de Clostridium histolyticum. colagenasa.

MSID000001		
Donante	Aceptador	Ocupación
HIE128-Lado	LIG391-Principal	0,30%
HIE128-Lado	LIG391-Principal	0,10%
LIG391-Lado	GLU156-Lado	0,10%
MSID000002		
LIG391-Principal	ASP184-Lado	29,80%
MSID000003		
LIG391-Principal	TYR208-Lado	1–10%
LIG391-Lado	GLU156-Lado	5,40%
LIG391-Principal	TYR200-Lado	0,30%
LIG391-Principal	GLU156-Lado	0,10%
LIG391-Lado	TYR208-Lado	1,50%
TYR208-Lado	LIG391-Lado	0,10%
LIG391-Lado	TYR200-Lado	0,10%
Control		
LIG391-Lado	GLU125-Lado	70,00%
LIG391-Lado	GLU99-Lado	2,90%

3.8. Análisis de Componentes Principales (PCA)

Se emplean métodos estadísticos multivariados como el PCA para comprender mejor la la complejidad del vasto conjunto de datos. Transforma las variables medidas en componentes principales. (PC), que representan variables no relacionadas [58]. Cada PC es complementaria, lo que indica que son ortogonales entre sí. PC1 representa la mayor variabilidad del conjunto de datos, posteriormente seguido de las PC (PC2, PC3, etc.) [59]. Se realizó y visualizó PCA para identificar Los cambios estructurales más notables dentro de los complejos proteína-ligando propuestos se exhibieron durante la unión entre sí [60]. Análisis de componentes principales (PCA) se empleó para obtener datos sobre las fases de conformación y el diseño de la enzima objetivo. con los ligandos y la molécula de control utilizando la dinámica molecular (MD) de 100 ns trayectorias de simulación.

Según los hallazgos del estudio, la mayoría de los compuestos objeto de esta investigación Son moléculas fisiológicamente activas que interactúan con ligandos de receptores nucleares y otros. enzimas para inducir actividades fisiológicas mediante la inhibición de la enzima colagenasa. Después de analizar estos gráficos, es evidente que las distribuciones de valores propios de los complejos mostrados en la Figura 10 difieren entre sí. Específicamente, los valores propios del complejo de control (D) muestran una dispersión mucho más amplia seguida de MSID000003 que los de MSID000001. (A) y el complejo MSID000002 (B). Esto sugiere que existe una mayor variabilidad en la Estados conformacionales de las interacciones que involucran a la colagenasa de Clostridium histolyticum . enzima en Control (D). Esta variabilidad implica que la dinámica estructural y el potencial

Machine Translated by Google

Inicialmente, las implicaciones funcionales de las interacciones de la enzima varían significativamente entre estos complejos.

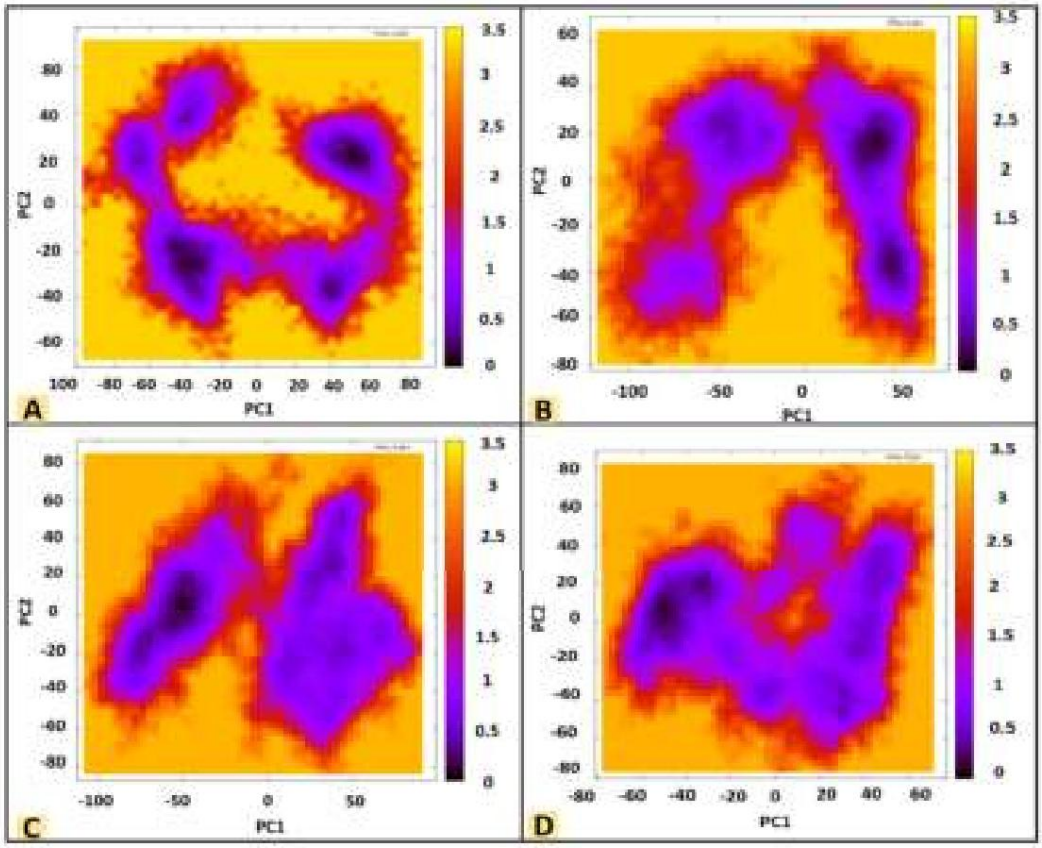


Figura 10. Análisis de componentes principales de MSID000001 (A), MSID000002 (B), MSID000003 (C) y Control (D), respectivamente.

3.9. Análisis de estructura secundaria

La estructura general del complejo proteína-enzima durante el análisis se compone de elementos estructurales secundarios que incluyen hélices alfa y láminas beta, que proporcionan estabilidad compleja y contienen los sitios activos necesarios para la actividad enzimática [61]. Se realizó un análisis de la estructura secundaria para comprender e investigar las bases estructurales de la función de la colagenasa de C. histolyticum . Se pueden observar giros y bucles cerrados dentro del componente enzimático, lo que ayuda en la unión de sustratos y el recambio catalítico. El número de láminas β y hélice alfa formadas durante el período de simulación se calculó y se representa en la Figura β S1. Tras el análisis, se mostraron diferentes elementos de la estructura secundaria, como T significa giro y bucles en la estructura, E representa hebras β, B para el puente β de enlace H- β aislado entre hebras β , H muestra la hélice α en el motivo SS donde se encuentra la columna vertebral de la proteína. facilita una estructura helicoidal, G representa un tipo de estructura secundaria helicoidal, Pi-Pi indicó una estructura helicoidal de forma rara y C muestra bobinas en la estructura de la proteína. Como se muestra en la Figura S1, donde se representa la estructura secundaria de MSID000001, MSID000002, MSID000003 y Control.

3.10. Cálculos MMPBSA/GSA

Utilizando los módulos MM-GBSA y MM-PBSA de AMBER22, se estimaron las energías libres de enlace para los complejos acoplados MSID000001, MSID000002, MSID000003 y Control (Tabla 6). Para el complejo acoplado MSID000001, el MM-GBSA calculó una energía total de −78,58 kcal/mol, para el complejo MSID000002, −70,44 kcal/mol, y para el complejo acoplado MSID000003, −59,32 kcal/mol. Como se muestra en la Tabla 3, la energía libre neta calculada para los complejos en los resultados de MM-PBSA fue −79,54 kcal/mol, −73,99 kcal/mol,

Machine Translated by Google

y −62,22 kcal/mol, respectivamente. Se prevé que los complejos se desarrollen con fuerza e interacciones intermoleculares estables basadas en puntuaciones bajas de energía de unión neta.

Tabla 6. Análisis MMGBSA y MMPBSA de los tres complejos principales junto con la molécula de control.

Parámetro de energía	MSID000001	MSID000002	MSID000003	Control
		MMGBSA		
energía de van der waals	−65,14	−61,23	−55,91	−60,99
Energía electrostática	−24.01	−20,81	−15,49	−17,67
Energía total de la fase gaseosa	−89,15	−82,04	−71,4	−78,66
Energía de salvación total	10.57	11.60	12.08	10.46
Energía neta	−78,58	−70,44	−59,32	−68,2
		MMPBSA		
Energía van der Waals	−65,14	−61,23	−55,91	−60,99
Electrostática energética	−24.01	−20,81	−15,49	−17,67
Energía total de la fase gaseosa	−89,15	−82,04	−71,4	−78,66
Salvación total de energía	9.61	8.05	9.14	8.00
Energía neta	−79,54	−73,99	−62,26	−70,66

3.11. Estimación de energía de WaterSwap

La estimación de energía de WaterSwap en el diseño de fármacos asistido por computadora se lleva a cabo para obtener conocimientos sobre la interacción de las moléculas de agua con proteínas y fármacos diana [49]. Por Al estudiar estas interacciones, podemos crear mejores fármacos que se unan de forma más estrecha y específica a sus objetivos, mejorando su eficacia [62]. Para revalidar el GBSA/MMPB estimaciones, la energía libre de enlace para cada complejo atracado se ha calculado con la técnica WaterSwap. La Figura 11 ilustra la energía de enlace de WaterSwap prevista. de múltiples pasos. Se utilizaron tres enfoques diferentes, en particular el de Bennett, la integración termodinámica (TI) y la perturbación de energía libre (FEP). Los compuestos de plomo MSID000001, MSID000002 y MSID000003, y el control son estables en energías de enlace y parecen ser candidatos a fármacos prometedores. La energía libre de unión de Bennett, TI y FEP Los valores para cada complejo se describen en la Figura 11 a continuación.

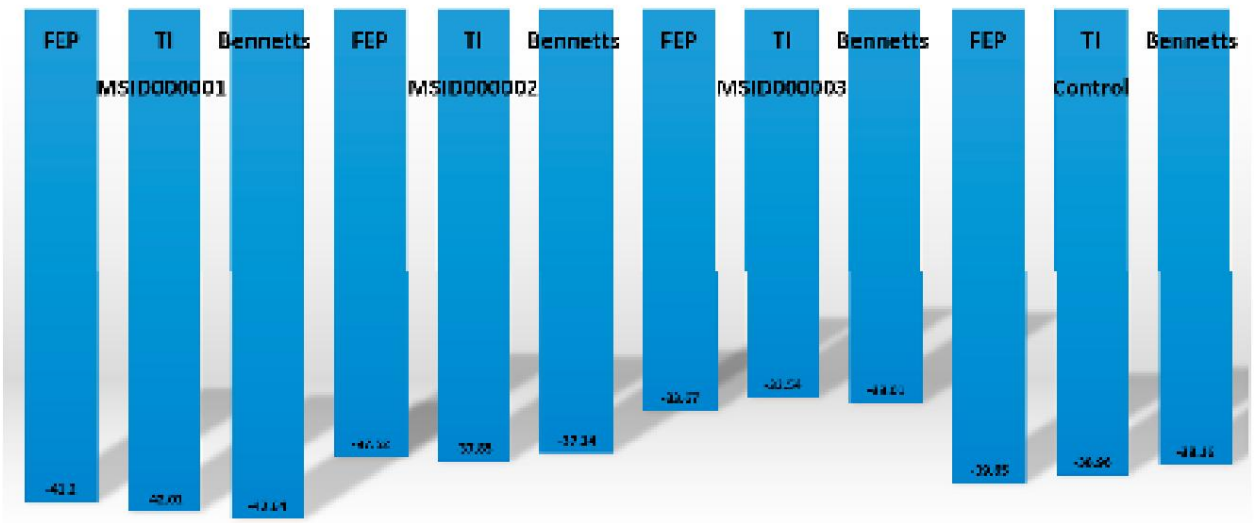


Figura 11. Energía de enlace de WaterSwap prevista para MSID000001, MSID000002 y MSID000003. y Control.

Machine Translated by Google

3.12. Estimación de energía de entropía

Se realizan cálculos de energía para evaluar la estabilidad de los complejos ligando-objetivo y afinidad vinculante en el desarrollo de fármacos, ofreciendo detalles sobre la estructura estructural del complejo características, estabilidad y afinidad vinculante [63]. Para obtener información sobre la energía de enlace neta, La contribución de energía de entropía se calculó utilizando AMBER22. La contribución de energía de entropía de los tres complejos principales y el control se describe en la tabla (Tabla 7), que muestra los valores de −5,96 kcal/mol, −2,85 kcal/mol, −1,36 kcal/mol y −2,60 kcal/mol para MSID000001, MSID000002 y MSID000003, y el control, respectivamente.

Tabla 7. Cálculos de energía entropía de los tres complejos principales, así como de la molécula de control.

Complejo	traslacional	Vibracional	Rotacional	ΔSTotal
MSID000001	5.01	7,86	1147.09	−5,96
MSID000002	10,85	12.66	1269.48	−2,85
MSID000003	15,96	13.05	1566.12	−1,36
Control	10.53	12.04	1428.64	−2,60

3.13. Estudios de Puentes de Sal

La interacción no covalente más fuerte que se encuentra en la naturaleza se conoce como puentes salinos. que están involucrados en el reconocimiento molecular, las interacciones proteína-proteína y la proteína. plegado [64]. Dos tipos de cadenas laterales de aminoácidos participan en la interacción de los puentes salinos, Glu o Glu si el ligando está cargado positivamente, mientras que las cadenas de aminoácidos cargadas negativamente son Arg o Lys [65] (Tabla 8). En esta técnica, la interacción electrostática entre los Se observaron iones con carga opuesta en la región de acoplamiento de MSID000001, MSID000002, MSID000003 y Control. (Ver Figura S2).

Tabla 8. Interacción del puente salino entre MSID000001, MSID000002, MSID000003 y Control con La enzima objetivo se puede ver en la siguiente tabla.

complejos	Interacción de puentes de sal
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
Control	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

Hubo diferencias significativas en la distribución de los residuos cargados involucrados. al comparar los puentes salinos de los compuestos afectados con el control. Cuando En lo que respecta a la creación de puentes salinos, el control mostró un mayor número de resultados positivos.

Machine Translated by Google

residuos cargados, como arginina (Arg) y lisina (Lys). Por el contrario, el aspartato (Asp) y el glutamato (Glu) son ejemplos de residuos cargados negativamente que participan principalmente en las interacciones de los puentes salinos en los compuestos afectados. La variación sugiere que mientras que el control comprende principalmente residuos cargados positivamente, los compuestos afectados forman en gran medida puentes salinos con residuos cargados negativamente. Las diferencias en la participación de residuos aumentan la posibilidad de que las afinidades y características específicas de unión de los compuestos afectados difieran de las del control, lo que podría mejorar la estabilidad y la eficiencia de unión total a la proteína objetivo.

4. Discusión

Los estudios experimentales que buscan comprender las bases moleculares de una enfermedad a nivel estructural suelen requerir mucho tiempo y esfuerzo. Dado que las técnicas experimentales tienen muchas desventajas y limitaciones, existe un mercado para los enfoques in silico , que pueden identificar inhibidores potenciales con mayor eficiencia y precisión [38].

Múltiples enfoques de predicción basados en secuencias y estructuras, que comprenden varios algoritmos, se combinan para desarrollar una herramienta eficaz que ofrece predicciones precisas y exactas [66].

La principal enzima colagenasa producida por Clostridium histolyticum llama mucho la atención como un objetivo prometedor para las intervenciones farmacológicas debido a su papel clave en la descomposición de los tejidos y el proceso de curación de las heridas [67]. La proteína más común en la matriz extracelular, o capa externa, de los tejidos conectivos, el colágeno, es descompuesta por la principal enzima colagenasa producida por Clostridium histolyticum [10]. Las causas subyacentes de trastornos particulares como la contractura de Dupuytren, la enfermedad de Peyronie, así como la cicatrización de heridas y la remodelación de tejidos, se ven significativamente afectadas por la actividad de la enzima [68].

Dirigirse a las principales enzimas colagenasa a través de inhibidores específicos tiene un potencial considerable para regular la descomposición del tejido, cambiar los mecanismos de curación de heridas y posiblemente reducir los síntomas relacionados con afecciones que afectan el colágeno [69]. Por lo tanto, el desarrollo de fármacos que se dirijan eficazmente a la principal enzima colagenasa de Clostridium histolyticum no presenta ningún obstáculo. Se debe mantener la selección frente a las enzimas del huésped y las reacciones adversas deben mantenerse al mínimo [70].

Utilizando técnicas computacionales, se llevó a cabo un estudio integral in silico para identificar posibles inhibidores contra Clostridium histolyticum con la principal enzima colagenasa. Mediante el empleo de modelos de acoplamiento molecular, realizamos la selección de la biblioteca MeFSAT terapéutica y de metabolitos secundarios de hongos medicinales que tiene 1800 compuestos e identificamos tres compuestos principales. MSID000001, MSID000002, MSID000003 exhibieron puntuaciones de unión prometedoras de −10,7 kcal/mol, −9,8 kcal/mol y −9,5 kcal/mol, respectivamente, mientras que el control mostró una puntuación de unión de −8 kcal/mol al sitio activo de la enzima. El modo de vinculación y las interacciones no cambiaron de ninguna manera aparente durante el tiempo simulado. Estos compuestos cumplían los criterios necesarios para ser considerados similares a fármacos y también presentaban buenas propiedades farmacocinéticas. Además, se emplearon simulaciones de MD para mostrar la dinámica y la estabilidad de los complejos proteína-ligando durante el período de simulación. Se utilizó el análisis de datos de trayectoria para identificar buenas conformaciones de unión y modificaciones estructurales dentro del sitio activo de la colagenasa en la unión del ligando.

Además, la dinámica de los sistemas enzima-ligando se investigó mediante análisis de componentes principales (PCA), que mostró información sobre los cambios conformacionales causados por la unión del inhibidor. Además, la investigación destacó el efecto de la interacción del inhibidor sobre los elementos estructurales secundarios de las colagenasas, así como el papel de los puentes salinos en el mantenimiento de la estabilidad de los complejos enzima-ligando. Comprender el mecanismo de acción y optimizar el desarrollo de compuestos líderes para lograr una mayor especificidad y eficacia requiere el conocimiento de los datos mencionados. Teniendo en cuenta su potencial como fármacos novedosos, estos compuestos ofrecen más investigaciones experimentales para determinar con qué eficacia actúan contra Clostridium histolyticum. Teniendo todo en cuenta, estos hallazgos indican que la proteína permaneció estructuralmente inalterada mientras se encuentran los ligandos seleccionados, a pesar de que no se produjeron cambios conformacionales obvios.

Machine Translated by Google

Nuestros hallazgos se alinean con estudios previos que investigan inhibidores contra colagenasas de Clostridium histolyticum. [71] informó sobre un estudio para desarrollar una técnica de detección virtual que integraba el descubrimiento de métodos farmacológicos basados en ligandos y en estructuras para identificar inhibidores potenciales de la colagenasa A bacteriana. Se utilizaron tres medicamentos aprobados por la FDA, benzotiazida, entacapona y lodoxamida. identificados como fuertes candidatos para inhibir la colagenasa bacteriana. Estos fármacos se seleccionaron en función de sus buenas interacciones simuladas con la colagenasa bacteriana y su potencial evaluado para bloquear la enzima. El estudio enfatizó la necesidad de realizar más investigaciones para verificar la función biológica prevista de estos compuestos específicos, así como para evaluar su eficacia en el manejo de infecciones causadas por la colagenasa bacteriana.

La identificación de posibles inhibidores de las colagenasas de Clostridium histolyticum podría ser útil para abordar enfermedades como la fibrosis y las heridas crónicas relacionadas con la degradación del colágeno. La actividad enzimática de las colagenasas es el objetivo de estos inhibidores, que podrían reducir el daño tisular y promover la regeneración de tejidos y la cicatrización de heridas. Según nuestros hallazgos, los compuestos de plomo encontrados mediante análisis in silico deben someterse a extensos experimentos de validación para evaluar las características de efectividad y seguridad. Mientras que el análisis in silico es tremendamente prometedor, este estudio incluye ciertas limitaciones. Las variables de simulación y la calidad de la estructura de la proteína son factores clave en la precisión computacional. El análisis de acoplamiento podría pasar por alto la flexibilidad de las proteínas y los efectos del disolvente , lo que aumenta la probabilidad de resultados falsos positivos. La demanda de cooperación multidisciplinaria y validación para confirmar la potencia inhibidora se destaca por los limitados datos experimentales.

La optimización de las características de los inhibidores y la validación experimental deberían ser los principales campos de estudio futuro. La integración de datos experimentales y computacionales puede avanzar en el desarrollo de nuevos fármacos para enfermedades relacionadas con el colágeno. En pocas palabras, nuestros hallazgos facilitan el descubrimiento de fármacos al mejorar las opciones de tratamiento para los trastornos relacionados con la degradación del colágeno, aunque es necesario realizar una mayor validación para combatir la resistencia a los antimicrobianos.

5. Conclusiones

Esta investigación tuvo como objetivo identificar inhibidores de la colagenasa G de C. histolyticum . Mediante el uso de modelos informáticos y un enfoque in silico, pudimos identificar los tres compuestos principales, MSID000001, MSID000002 y MSID000003, que mostraron potencial para inhibir eficientemente la actividad de la enzima. Estos hallazgos ofrecieron un paso hacia el desarrollo y caracterización de nuevos inhibidores dirigidos al dominio peptidasa G de C. histolyticum . Es necesario realizar más investigaciones para inhibir eficazmente dicha enzima. En el futuro, es necesario realizar una investigación experimental para validar los hallazgos computacionales de esta investigación.

Materiales complementarios: la siguiente información de respaldo se puede descargar en: https://www. mdpi.com/article/10.3390/computation12080153/s1, Figura S1: La estructura secundaria de los tres complejos principales MSID000001 (A), MSID000002 (B), MSID000003 (C) y Control (D), respectivamente.
Figura S2: La interacción de los puentes salinos de los tres complejos principales MSID000001, MSID000002, MSID000003 y Control, respectivamente, se representan en la figura anterior. Tabla S1: Perfil farmacocinético de MSID000001, MSID000002, MSID000003 y Control. Tabla S2: Propiedades de lipofilicidad de los compuestos investigados. Tabla S3: Propiedades fisicoquímicas de los compuestos seleccionados. Tabla S4: Semejanza a los fármacos de los compuestos estudiados.

Contribuciones de los autores: Conceptualización, FA; metodología, FA, AH, NAA y FAA; software, NH; validación, AAA; análisis formal, AAA; investigación, MB; recursos, AS; curación de datos, NAA y AAA; redacción: preparación del borrador original, HJB; redacción: revisión y edición, AA; visualización, MÍN; supervisión, FA; administración de proyectos, FA; adquisición de financiación, FA Todos los autores han leído y aceptado la versión publicada del manuscrito.

Financiamiento: Esta investigación fue financiada por la Universidad de Taif, Arabia Saudita, número de proyecto (TU-DSPP-2024-140).

Declaración de disponibilidad de datos: todos los datos generados en la investigación actual se presentan en el manuscrito.

Machine Translated by Google

Agradecimientos: Los autores extienden su agradecimiento a la Universidad de Taif, Arabia Saudita, por apoyar este trabajo a través del proyecto número (TU-DSPP-2024-140).

Conflictos de intereses: Los autores declaran no tener conflictos de intereses.

Referencias

1. Alhayek, A.; Abdelsamie, AS; Schönauer, E.; Camberlein, V.; Hutterer, E.; Posselt, G.; Serwanja, J.; Blöchl, C.; Huber, CG; Haupenthal, J.; et al. Descubrimiento y caracterización de inhibidores de colagenasas clostridiales y bacilares sintetizados y aprobados por la FDA . J. Med. Química. 2022, 65, 12933–12955. [Referencia cruzada] [PubMed]

2. Muteeb, G.; Rehman, MT; Shahwan, M.; Aatif, M. Origen de los antibióticos y la resistencia a los antibióticos, y sus impactos sobre los fármacos Desarrollo: una revisión narrativa. Productos farmacéuticos 2023, 16, 1615. [CrossRef] [PubMed]

3. Calvert, MB; Jumde, VR; Titz, A. Patobloqueantes o fármacos antivirulentos como nueva opción para el tratamiento de infecciones bacterianas. Beilstein J. Org. Química. 2018, 14, 2607–2617. [Referencia cruzada] [PubMed]

4. Popoff, SEÑOR; Bouvet, P. Características genéticas de los clostridios toxigénicos y evolución de los genes de las toxinas. Toxico 2013, 75, 63–89. [Referencia cruzada] [PubMed]

5. Marrón, RL; Larkinson, MLY; Clarke, TB Diseño inmunológico de comunidades comensales para tratar infecciones intestinales y Inflamación. Patógeno PLoS. 2021, 17, e1009191. [Referencia cruzada] [PubMed]

6. Palmer, JS; Hough, RL; Oeste, HM; Avery, LM Una revisión de la abundancia, el comportamiento y la detección de patógenos clostridiales en Suelos Agrícolas. euros. J. Ciencia del suelo. 2019, 70, 911–929. [Referencia cruzada]

7. Gabrielson, AT; Spitz, JT; Hellstrom, WJG Colagenasa Clostridium Histolyticum en el tratamiento de enfermedades urológicas: impacto actual y futuro. Sexo. Medicina. Rev. 2018, 6, 143–156. [Referencia cruzada] [PubMed]

8. Popoff, MR Descripción general de las toxinas proteicas bacterianas de bacterias patógenas: modo de acción y conocimientos sobre la evolución. Toxinas 2024, 16, 182. [CrossRef] [PubMed]

9. Kaya, C.; Hirsch, AKH dirigido a proteasas bacterianas extracelulares para el desarrollo de nuevos agentes antivirulencia. Chimia 2022, 76, 402–408. [Referencia cruzada] [PubMed]

10. Eckhard, U.; Huesgen, PF; Brandstetter, H.; En general, el perfil de especificidad de la proteasa proteómica CM de las colagenasas clostridiales revela su naturaleza intrínseca como degradadores dedicados del colágeno. J. Proteoma. 2014, 100, 102-114. [Referencia cruzada] [PubMed]

11. Shekhter, AB; Balakireva, AV; Kuznetsova, Nevada; Vukolova, MN; Litvitsky, PF; Zamyatnin Jr, enzimas colagenolíticas AA y sus aplicaciones en biomedicina. actual. Medicina. Química. 2019, 26, 487–505. [Referencia cruzada] [PubMed]

12. Sargsyan, A.; Akobian, H.; Mardiyan, Z.; Jamharyan, S.; Dadayan, A.; Sargsyan, T.; Hovhannisyan, N. Modelado, síntesis y detección in vitro de aminoácidos y péptidos inusuales como inhibidores de proteasa. J. química. Tecnología. Metal. 2023, 58, 615–620. [Referencia cruzada]

13. María, RR; Arturo, CJ; Alicia, J.; Paulina, MG; Gerardo, A. El Impacto de la Bioinformática en el Diseño y Desarrollo de Vacunas. Vacunas 2017, 2, 3–6.

14. dos Santos Nascimento, IJ; da Silva Rodrigues, ÉE; da Silva, MF; de Araújo-Júnior, JX; de Moura, RO Avances en métodos computacionales para descubrir nuevos inhibidores NS2B-NS3 útiles contra los virus del dengue y el Zika. actual. Arriba. Medicina. Química. 2022, 22, 2435–2462. [Referencia cruzada] [PubMed]

15. Saha, M.; Sarkar, A. Revisión sobre múltiples facetas de la resistencia a los medicamentos: un desafío creciente en el siglo XXI. J. Xenobióticos 2021, 11, 197–214. [Referencia cruzada] [PubMed]

16. Koré, PP; Mutha, MM; Antré, RV; Oswal, RJ; Kshirsagar, SS Diseño de fármacos asistido por computadora: una herramienta innovadora para el modelado. Abierto J. Med. Química. 2012, 2, 26238. [Referencia cruzada]

17. Sarkar, S.; Gulati, K.; Kairamkonda, M.; Mishra, A.; Poluri, KM Elucidación de las interacciones proteína-proteína mediante enfoques computacionales y diseño de inhibidores de moléculas pequeñas contra ellas para diversas enfermedades. actual. Arriba. Medicina. Química. 2018, 18, 1719–1736. [Referencia cruzada]

18. Palchevskyi, S.; Czarnocki-Cieciura, M.; Vistoli, G.; Gervasoni, S.; Nowak, E.; Beccari, AR; Nowotny, M.; Talarico, C. Estructura de Canal TRPM8 humano. Comunitario. Biol. 2023, 6, 1065. [Referencia cruzada]

19. Kaliappan, S.; Bombay, IIT UCSF Chimera: descripción general. 2018. Disponible en línea: https://www.cgl.ucsf.edu/chimera/ (accedido el 20 de julio de 2024).

20. Pencheva, T.; Lagorce, D.; Pajeva, I.; Villoutreix, BO; Miteva, MA AMMOS: Optimización automatizada de la mecánica molecular Herramienta para cribado in silico. Bioinformación de BMC. 2008, 9, 438. [Referencia cruzada] [PubMed]

21. Bhowmick, S.; Saha, A.; Osman, SM; Alasmary, FA; Almutairi, TM; Islam, MA Identificación basada en la estructura de los principales inhibidores de la proteasa del SARS-CoV-2 a partir de bibliotecas químicas específicas de antivirales: un enfoque de detección computacional exhaustivo. Mol. Diversos. 2021, 25, 1979–1997. [Referencia cruzada] [PubMed]

22. Zothantluanga, J.; Aswin, SK; Rudrapal, M.; Chetia, D. Flavonoide-glucósido antipalúdico de Acacia Pennata con efecto inhibidor Potencial contra PfDHFR-TS: un estudio in-silico. Biointerfaz Res. Aplica. Química 2021, 12, 4871–4887.

23. Halgren, TA MMFF VII. Caracterización de MMFF94, MMFF94 y otros campos de fuerza ampliamente disponibles para energías conformacionales y para energías y geometrías de interacción intermolecular. J. Computación. Química. 1999, 20, 730–748. [Referencia cruzada]

24. Olawale, F.; Iwaloye, O.; Elekofehinti, OO Detección virtual de compuestos naturales como inhibidores selectivos de la quinasa-1 similar a Polo en la caja Polo C-terminal y el dominio catalítico N-terminal. J. Biomol. Estructura. Din. 2022, 40, 13606–13624. [Referencia cruzada] [PubMed]

Machine Translated by Google

25. Lavecchia, A.; Di Giovanni, C. Estrategias de detección virtual en el descubrimiento de fármacos: una revisión crítica. actual. Medicina. Química. 2013, 20, 2839–2860. [Referencia cruzada] [PubMed]
26. Dallakyan, S.; Olson, AJ Detección de bibliotecas de moléculas pequeñas mediante acoplamiento con PyRx. En Biología Química. Métodos en molecular Biología; Humana Press: Nueva York, NY, EE. UU., 2015; págs. 243-250.
27. Kumar, SP; Girija, ASS; Priyadharsini, JV dirigido a la inhibición mediada por NM23-H1 de metástasis tumorales en hepatitis viral con compuestos bioactivos de Ganoderma Lucidum: un estudio computacional. Indio J. Pharm. Ciencia. 2020, 82, 300. [Referencia cruzada]
28. Bilal, MS; Ejaz, SA; Zargar, S.; Akhtar, N.; Wani, TA; Riaz, N.; Aborode, AT; Siddique, F.; Altwaijry, N.; Alkahtani, HM; et al. Investigación computacional de derivados de 1, 3, 4 oxadiazol como inhibidores principales de VEGFR 2 en comparación con EGFR: teoría funcional de la densidad, acoplamiento molecular y estudios de simulación de dinámica molecular. Biomoléculas 2022, 12, 1612. [CrossRef] [PubMed]
29. Masnabadi, N.; Thalji, señor; Alhasan, HS; Mahmoodi, Z.; Soldatov, AV; Ali, GAM Características estructurales, electrónicas, de reactividad y conformacionales del 2, 5, 5-trimetil-1, 3, 2-diheterofosfinano-2-sulfuro y sus derivados: cálculos de DFT, MEP y NBO . Moléculas 2022, 27, 4011. [CrossRef] [PubMed]
30. Hashem, ÉL; Ahmad, S.; Kumer, A.; Bakri, Y. El Predicción in silico e in vitro de nuevos compuestos N-heterocíclicos sintetizados como anti-SARS-CoV-2. Ciencia. Rep. 2024, 14, 1152. [CrossRef]
31. Fátima, A.; Pooja, K.; Savita, S.; Singh, M.; Verma, I.; Siddiqui, N.; Javed, S. Estudios cuánticos, espectroscópicos experimentales, de superficie de Hirshfeld y de acoplamiento molecular del fármaco antimicrobiano sulfatiazol. J. Mol. Estructura. 2021, 1245, 131118. [Referencia cruzada]
32. Bruno, A.; Costantino, G.; Sartori, L.; Radi, M. La caja de herramientas de descubrimiento de fármacos in silico: aplicaciones en el descubrimiento de clientes potenciales y Mejoramiento. actual. Medicina. Química. 2019, 26, 3838–3873. [Referencia cruzada] [PubMed]
33. Lohohola, PO; Mbala, BM; Bambi, S.-MN; Mawete, DT; Matondo, A.; Mvondo, JGM In Silico ADME/T Propiedades de Derivados de quinina utilizando servidores web SwissADME y PkCSM. Int. J. Trop. Dis. Salud 2021, 42, 1–12.
34. Makeneni, S.; Thieker, DF; Woods, RJ Aplicación de agrupaciones de poses y simulaciones MD para eliminar falsos positivos en moléculas Unión cósmica. J. química. inf. Modelo. 2018, 58, 605–614. [Referencia cruzada] [PubMed]
35. Shukla, R.; Tripathi, T. Simulación de dinámica molecular de proteínas y complejos proteína-ligando. En drogas asistidas por computadora Diseño; Springer: Singapur, 2020; págs. 133-161.
36. Pujadas, G.; Vaque, M.; Ardevol, A.; Hoja, C.; Salvado, MJ; Blay, M.; Fernández-Larrea, J.; Arola, L. Acoplamiento proteína-ligando: A Revisión de avances recientes y perspectivas futuras. actual. Farmacéutica. Anal. 2008, 4, 1–19. [Referencia cruzada]
37. Alamri, MA; Mirza, MU; Adeel, MM; Ashfaq, UA; Tahir Ul Qamar, M.; Shahid, F.; Ahmad, S.; Alatawi, EA; Albalawi, gerente general; Allemailem, KS; et al. Elucidación estructural de la proteína L del virus de la fiebre del Valle del Rift hacia el descubrimiento de sus posibles inhibidores. Productos farmacéuticos 2022, 15, 659. [CrossRef] [PubMed]
38. Miandad, K.; Ullah, A.; Bashir, K.; Khan, S.; Abideen, SA; Coctelera, B.; Alharbí, M.; Alshammari, A.; Ali, M.; Haleem, A.; et al. Detección virtual de fitoquímicos de Artemisia Annua como posibles inhibidores de la enzima proteasa principal del SARS-CoV-2. Moléculas 2022, 27, 8103. [CrossRef] [PubMed]
39. Rieder, SR; Ries, B.; Schaller, K.; Campeón, C.; Barros, EP; Hünenberger, PH; Riniker, S. Muestreo de distribución envolvente de intercambio de réplicas utilizando topologías de campo de fuerza AMBER generalizadas: aplicación a cálculos de energía libre de hidratación relativa para grandes conjuntos de moléculas. J. química. inf. Modelo. 2022, 62, 3043–3056. [Referencia cruzada] [PubMed]
40. Fratev, F.; Sirimulla, S. Un protocolo de muestreo FEP+ mejorado de perturbación de energía libre para dominios de unión a ligandos flexibles. Ciencia. Rep. 2019, 9, 16829. [CrossRef] [PubMed]
41. Tiwari, P.; Sharma, P.; Kumar, M.; Kapil, A.; Abdul Samath, E.; Kaur, P. Identificación de nuevos inhibidores naturales de la ligasa MurD como posibles agentes antimicrobianos dirigidos a Acinetobacter Baumannii: detección in silico y evaluación biológica. J. Biomol. Estructura. Din. 2022, 40, 14051–14066. [Referencia cruzada] [PubMed]
42. Honarparvar, B.; Gobernador, T.; Maguire, GEM; Solimán, MES; Kruger, HG Enfoque integrado para el diseño de fármacos enzimáticos basado en estructuras: modelado molecular, espectroscopia y bioactividad experimental. Química. Rev. 2014, 114, 493–537. [Referencia cruzada] [PubMed]
43. Zschau, RL; Zacharias, M. Mecanismo de formación de horquilla B en AzoChignolin y Chignolin. J. Computación. Química. 2023, 44, 988–1001. [Referencia cruzada] [PubMed]
44. Justino, GC; Nascimento, CP; Justino, MC Simulaciones y análisis de dinámica molecular para pregrado en bioinformática Estudiantes. Bioquímica. Mol. Biol. Educativo. 2021, 49, 570–582. [Referencia cruzada] [PubMed]
45. Brandsdal, BO; Österberg, F.; Almlöf, M.; Feierberg, I.; Luzhkov, VB; Åqvist, J. Cálculos de energía libre y unión de ligandos. Adv. Química de proteínas. 2003, 66, 123-158. [PubMed]
46. Gul, S.; Ozcán, O.; Asar, S.; Okyar, A.; Barıs, I.; Kavakli, IH Identificación in silico de fármacos ampliamente utilizados y bien tolerados como posibles inhibidores de la proteasa similar a 3C del SARS-CoV-2 y de la ARN polimerasa dependiente de ARN viral para uso directo en ensayos clínicos. J. Biomol. Estructura. Din. 2021, 39, 6772–6791. [Referencia cruzada] [PubMed]
47. Miller III, BR; McGee Jr, TD; Swails, JM; Homeyer, N.; Gohlke, H.; Roitberg, AE MMPBSA. Py: un programa eficiente para Cálculos de energía libre de estado final. J. química. Computación teórica. 2012, 8, 3314–3321. [Referencia cruzada] [PubMed]
48. Maderas, CJ; Malaisree, M.; Michel, J.; Largo, B.; McIntosh-Smith, S.; Mulholland, AJ Descomposición rápida y visualización de energías libres de unión a proteínas y ligandos por residuos y agua. Faraday discutir. 2014, 169, 477–499. [Referencia cruzada] [PubMed]

Machine Translated by Google

49. Bergström, CAS; Larsson, P. Predicción computacional de la solubilidad de fármacos en sistemas a base de agua: enfoques cualitativos y cuantitativos utilizados en el entorno actual de descubrimiento y desarrollo de fármacos. Int. J. Farmacéutica. 2018, 540, 185–193. [Referencia cruzada] [PubMed]
50. Montgomerie, S.; Sundararaj, S.; Gallin, WJ; Wishart, DS mejora de la precisión de la predicción de la estructura secundaria de las proteínas Usando alineación estructural. Bioinformación de BMC. 2006, 7, 301. [Referencia cruzada] [PubMed]
51. Tanwar, H.; Kumar, DT; Doss, CGP; Zayed, H. Clasificación bioinformática de mutaciones en pacientes con mucopolisacárido- hermana IIIA. Metab. Enfermedad cerebral. 2019, 34, 1577–1594. [Referencia cruzada] [PubMed]
52. Wang, J.; Yang, W.; Zhao, L.; Wei, B.; Chen, J. Mecanismo de unión de inhibidores de BRD4 y BRD9 decodificados mediante múltiples simulaciones de dinámica molecular independientes y aprendizaje profundo. Moléculas 2024, 29, 1857. [CrossRef] [PubMed]
53. Henderson, R.; Anasti, K.; Manne, K.; Puestos, V.; Saunders, C.; Bililign, Y.; Williams, A.; Bubphamala, P.; Montani, M.; Kachhap, S. Ingeniería de inmunógenos que seleccionan mutaciones específicas en anticuerpos ampliamente neutralizantes del VIH. bioRxiv 2023. [CrossRef]
54. Mortier, J.; Rakers, C.; Bermúdez, M.; Murgueitio, MS; Riniker, S.; Wolber, G. El impacto de la dinámica molecular en el diseño de fármacos: aplicaciones para la caracterización de complejos ligando-macromolécula. Descubrimiento de drogas. Hoy 2015, 20, 686–702. [Referencia cruzada] [PubMed]
55. Ahmed, SA; Ali, N.; Qureshi, U.; Khalil, R.; Qasmi, Z.-UH Simulación de dinámica molecular de la lipasa pancreática humana y el complejo lipasa-colipasa: información sobre las fluctuaciones estructurales y los cambios conformacionales. Int. J. Computación. Teor. Química. 2020, 8, 19. [Referencia cruzada]
56. Elmaaty, AA; Darwish, KM; Khattab, M.; Elhady, SS; Salah, M.; Hamed, desaparecido en combate; Al-Karmalawy, AA; Saleh, MM En una búsqueda de posibles fármacos candidatos para combatir la COVID-19: un estudio computacional reveló que el ácido salvianólico B es un potencial terapéutico dirigido a las proteínas 3CLpro y Spike. J. Biomol. Estructura. Din. 2022, 40, 8866–8893. [Referencia cruzada] [PubMed]
57. Sol, Z.; Liu, Q.; Qu, G.; Feng, Y.; Reetz, MT Utilidad de los factores B en la ciencia de las proteínas: interpretación de la rigidez, la flexibilidad y los factores internos Termestabilidad del movimiento y la ingeniería. Química. Rev. 2019, 119, 1626–1665. [Referencia cruzada] [PubMed]
58. Gewers, Florida; Ferreira, GR; De Arruda, HF; Silva, FN; Comín, CH; Amancio, RD; Costa, LdF Análisis de componentes principales: Un enfoque natural para la exploración de datos. Computación ACM. Sobrevivir. 2021, 54, 1–34. [Referencia cruzada]
59. Yoo, C.; Shahlaei, M. Las aplicaciones de PCA en estudios QSAR: un estudio de caso sobre antagonistas de CCR5. Química. Biol. Desdrogas. 2018, 91, 137-152. [Referencia cruzada]
60. Karnati, KR; Wang, Y. Conocimientos estructurales y de unión sobre las interacciones de la proteasa del VIH-1 y el ligando P2 a través de simulaciones de dinámica molecular, energía libre de unión y análisis de componentes principales. J. Mol. Gráfico. Modelo. 2019, 92, 112-122. [Referencia cruzada] [PubMed]
61. Chaudhary, K.; Kumar, K.; Venkatesu, P.; Masram, DT Inmovilización de proteínas sobre óxido de grafeno o superficie de óxido de grafeno reducido y sus aplicaciones: influencia sobre la actividad, estabilidad estructural y térmica de la proteína. Adv. Ciencia de la interfaz coloidal. 2021, 289, 102367. [Referencia cruzada] [PubMed]
62. Jamal, SB; Ismail, S.; Yousaf, R.; Qazi, AS; Iftkhar, S.; Abbasi, SW Explorando nuevos inhibidores basados en 1-hidroxinaftaleno-2-carboxanilidas contra las quinasas N-terminales C-Jun mediante simulación dinámica molecular y análisis de intercambio de agua. Aplica. Bioquímica. Biotecnología. 2023, 196, 1803–1819. [Referencia cruzada] [PubMed]
63. Panday, SK; Ghosh, I. Predicción in silico basada en la estructura de la afinidad de unión entre receptor y ligando: avances y desafíos actuales. En Bioinformática estructural: aplicaciones en el proceso de descubrimiento de fármacos preclínicos. Retos y Avances en Química y Física Computacional; Springer: Cham, Suiza, 2019; págs. 109-175.
64. Kirby, JP El puente salino de amidinio-carboxilato y las reacciones de transferencia de electrones; Universidad Estatal de Michigan: East Lansing, MI, EE. UU., 1997; ISBN 0591744015.
65. Gupta, Minnesota; Uversky, VN Importancia biológica de la arginina: una revisión completa de las funciones en la estructura, el trastorno y Funcionalidad de Péptidos y Proteínas. Int. J. Biol. Macromol. 2023, 257, 128646. [Referencia cruzada] [PubMed]
66. Pakhrin, SC; Shrestha, B.; Adhikari, B.; Kc, DB Avances basados en el aprendizaje profundo en la predicción de la estructura de proteínas. Int. J. Mol. Ciencia. 2021, 22, 5553. [Referencia cruzada] [PubMed]
67. Gomes, D.; Silvestre, S.; Duarte, AP; Venuti, A.; Soares, CP; Passarinha, L.; Sousa, Â. Enfoques in silico: una forma de revelar nuevos fármacos terapéuticos para el tratamiento del cáncer de cuello uterino. Productos farmacéuticos 2021, 14, 741. [CrossRef] [PubMed]
68. Al-Thakafi, S.; Al-Hathal, Enfermedad de N. Peyronie: una revisión de la literatura sobre epidemiología, genética, fisiopatología y diagnóstico y elaboración. Traducción Androl. Urol. 2016, 5, 280. [Referencia cruzada] [PubMed]
69. Alipour, H.; Raz, A.; Zakeri, S.; Djaid, ND Aplicaciones terapéuticas de la colagenasa (metaloproteasas): una revisión. Pac asiático. J. tropo. Biomédica. 2016, 6, 975–981. [Referencia cruzada]
70. Supuran, CT; Scozzafava, A.; Mastrolorenzo, A. Proteasas bacterianas: uso terapéutico actual y perspectivas futuras para el Desarrollo de nuevos antibióticos. Opinión de expertos. Ahí. Palmadita. 2001, 11, 221–259. [Referencia cruzada]
71. Nitulescu, G.; Nitulescu, gerente general; Zanfirescu, A.; Mihai, DP; Gradinaru, D. Candidatos para reutilización como agentes antivirulencia basados en el análisis del perfil estructural de inhibidores de colagenasa microbiana. Productos farmacéuticos 2021, 14, 62. [CrossRef] [PubMed]

Descargo de responsabilidad/Nota del editor: Las declaraciones, opiniones y datos contenidos en todas las publicaciones son únicamente de los autores y contribuyentes individuales y no de MDPI ni de los editores. MDPI y/o los editores renuncian a toda responsabilidad por cualquier daño a personas o propiedad que resulte de cualquier idea, método, instrucción o producto mencionado en el contenido.

Machine Translated by Google

cálculo

MDPI

Artículo

Enfoque bayesiano para la estimación estocástica de la población Curvas de supervivencia en Chile utilizando técnicas ABC y su impacto sobre las estructuras sociales

Rolando Rubilar Torrealba y Claudio[1], Karime Chahuán-Jiménez 2,*, Hanns de la Fuente-Mella 3, Elórtegui Gómez[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

3 Instituto de Estadística, Facultad de Ciencias, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Valparaíso 2340031, Chile; hanns.delafuente@pucv.cl

4 Escuela de Periodismo, Facultad de Ciencias Económicas y Administrativas, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Valparaíso 2373223, Chile; claudio.elortegui@pucv.cl * Correspondencia: karime.chahuan@uv.cl

Resumen: En Chile y el mundo, la esperanza de vida ha aumentado consistentemente durante las últimas seis décadas. Así, el propósito de este estudio fue identificar, medir y estimar los índices de mortalidad poblacional en Chile, las estimaciones de mortalidad se utilizan para calcular la esperanza de vida al construir tablas de vida. El enfoque bayesiano, específicamente a través de la Computación Bayesiana Aproximada (ABC), se emplea para optimizar la selección de parámetros para estos cálculos. ABC corresponde a una clase de métodos computacionales basados en la estadística bayesiana que podrían usarse para estimar las distribuciones posteriores de los parámetros del modelo. Para esta investigación se aplicó ABC para estimar las razones de mortalidad en Chile, utilizando información disponible desde 2004 hasta 2021. Los resultados mostraron heterogeneidad en los resultados a la hora de seleccionar el mejor modelo. Adicionalmente, fue posible generar proyecciones para los próximos 10 años de las series analizadas en la investigación. Finalmente, el principal aporte de esta investigación es que medimos y estimamos las tasas de mortalidad poblacional en Chile, definiendo la selección óptima de parámetros, con el fin de contribuir a crear un vínculo entre las ciencias sociales y técnicas para el avance e implementación del conocimiento actual en el campo de las estructuras sociales.

Palabras clave: mortalidad; población de mayor edad; esperanza de vida; procesos estocásticos; análisis bayesiano

check for updates

Cita: Rubilar-Torrealba, R.; Chahuán-Jiménez, K.; de la Fuente-Mella, H.; Elórtegui Gómez, C. Enfoque bayesiano para la estimación estocástica de curvas de supervivencia poblacional en Chile mediante técnicas ABC y su impacto sobre las estructuras sociales. Computación 2024, 12, 154. https://doi.org/10.3390/ computation12080154

Editores Académicos: Minzhang Zheng y Pedro D. Manrique

Recibido: 2 de julio de 2024
Revisado: 19 de julio de 2024
Aceptado: 25 de julio de 2024
Publicado: 29 de julio de 2024

Copyright: © 2024 por los autores. Licenciatario MDPI, Basilea, Suiza. Este artículo es un artículo de acceso abierto. distribuido bajo los términos y condiciones de los Creative Commons Licencia de atribución (CC BY) (https:// creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

1. Introducción

La salud se considera cada vez más un aspecto crítico del crecimiento económico, y el seguimiento de la esperanza de vida saludable es esencial para evaluar la sostenibilidad financiera de los sistemas de atención sanitaria y social [1]. Los autores de [2] encontraron que la esperanza de vida se incorporaba con mayor frecuencia en las pautas de detección y tratamiento como evidencia para facilitar la toma de decisiones clínicas relacionadas con el paciente, y que la esperanza de vida que incorporaba el estado de salud difería sustancialmente de las tablas de vida y el estado de salud de los Estados Unidos. Casos de estados.

Según [3], el aumento de la esperanza de vida en los países de altos ingresos de Asia y el Pacífico se debe en gran medida a un cambio en la mortalidad de las enfermedades no transmisibles a la vejez, lo que ha provocado un rápido envejecimiento de la población y exige políticas centradas en la salud. años en la vejez. Por otro lado, las proyecciones de la esperanza de vida en los países occidentales indican que la esperanza de vida de hecho seguirá aumentando en la mayoría de los países occidentales, pero una importante pregunta abierta es si una mayor esperanza de vida se asociará con más o menos años de mala salud. Por lo tanto, resulta útil complementar las proyecciones de esperanza de vida con proyecciones de esperanza de salud. Los autores de [4] señalan que a la hora de elegir una política se deben considerar factores analíticos y aplicados, así como sus

Machine Translated by Google

de cálculo de tablas de esperanza de vida y mortalidad, centrándose en necesidades, audiencia y estrategia de comunicación; valores y normas comunitarios para abordar explícitamente las desigualdades; y capacidad analítica.

El cambio demográfico, con el envejecimiento de las sociedades, y el cambio epidemiológico, con el aumento de las enfermedades crónicas, son incuestionables a nivel global. Entre las consecuencias de estos cambios está el aumento de la multimorbilidad, la fragilidad y, por otro lado, el aumento de la esperanza de vida, lo que significa un aumento de la demanda de servicios sociales y de salu Este escenario implica complejidad en la gestión y organización de los cuidados, que requieren una adaptación estructural y funcional de los recursos sanitarios disponibles si queremos conservarlos y hacerlos sostenibles. Sin embargo, los efectos de la toma de decisiones a mediano y largo plazo en los sistemas de salud plantean un gran desafío sin la ayuda de la tecnología, es decir, sin el uso de herramientas computacionales y modelos matemáticos.

Este no es un desafío nuevo: científicos de diferentes áreas del conocimiento han cuestionado la viabilidad y sostenibilidad de los sistemas de salud durante varias décadas. En este contexto, es importante resaltar el vínculo entre las ciencias sociales y técnicas para el avance e implementación del conocimiento actual en este campo.

Monitorear la esperanza de vida en áreas pequeñas es importante para la política de salud, pero plantea dificultades para el análisis de tablas de vida convencionales [5]. Además, el modelo implícito que subyace al análisis de tablas de vida convencionales implica un enfoque de efectos fijos parametrizados. Según el ranking de clases sociales, existe una clara relación entre el nivel educativo y la esperanza de vida. La clasificación de clase social es incluso más alta en cuanto a esperanza de salud que en cuanto a esperanza de vida

Para señalar que existe un vacío en la literatura demográfica asociada con la interpretación de las tendencias periódicas en la esperanza de vida, se presentan los efectos de tempo [6] ; Este es el caso cuando de repente se posponen un gran número de muertes. En las condiciones anteriores, la tabla de vida aumenta la longevidad de la población al ponderar las muertes diferidas con la esperanza de vida restante. El estudio de [7] muestra que la esperanza de vida a los 50 años difiere en 8,6 años para los hombres y 5,5 años para las mujeres entre los quintiles de ingresos más altos y más bajos. La diferencia en la esperanza de vida sin discapacidad es de 12,8 y 11,0 años para hombres y mujeres, respectivamente. El efecto de la mortalidad contribuye igualmente a la diferencia en la esperanza de vida sin discapacidad para los hombres y ligeramente más para las mujeres.

La investigación de [8] muestra que las mujeres viven más tiempo, pero pasan más años con mala salud que los hombres. Los mismos autores enfatizan la necesidad de considerar las diferencias de género en la demanda de atención médica. También es importante considerar la necesidad de políticas que aumenten el número de años que las personas mayores pueden vivir con buena salud. Los resultados de [9] exponen la existencia de desigualdades étnico-raciales en la esperanza de vida en Chile, y muestran que los pueblos indígenas mapuche están en mayor desventaja en términos de supervivencia que otros grupos indígenas y no indígenas, con implicaciones para la toma de decisiones sobre políticas étnicas. .

En el caso de la esperanza de vida, las políticas sanitarias actuales deben tener en cuenta el creciente número de beneficiarios con múltiples enfermedades crónicas a la hora de determinar las proyecciones demográficas y la solvencia financiera [10]. Según [11], la esperanza de vida es una medida utilizada para comparar las diferencias de salud entre poblaciones. El uso de métodos paramétricos flexibles combinados para estimar la esperanza de vida en muestras pequeñas ha arrojado resultados prometedores, permitiendo modelar la esperanza de vida por edad exacta, con una mayor precisión estadística y un menor sesgo, y una predicción de diferentes patrones de covariables sin estratificación.

En términos de medición del riesgo de vida, [12] indica que cada individuo tiene una vida y que esta vida tiene un riesgo de mortalidad específico por edad. Si se ajusta este riesgo de mortalidad de un individuo con su probabilidad de vida específica de su edad, la esperanza de vida cambiaría.

La investigación de [13] muestra que las curvas de esperanza de vida de poblaciones homogéneas y no homogéneas se cruzan en la edad promedio a la que los más frágiles habrían muerto y en la edad máxima vivida en la población (cuando los últimos miembros de la cohorte habrían muerto).).

Un análisis de las tablas de vida sugiere que algunos grupos de inmigrantes tienen diferentes expectativas de vida porque la tasa de mortalidad estandarizada es sensible a las diferencias demográficas entre los grupos que se comparan [11]. Para [14], los métodos asociados

Machine Translated by Google

Las tablas de vida no suelen implicar un modelo estadístico explícito, pero las densidades estadísticas subyacentes se aplican cuando se requieren estimaciones de errores estándar. Los autores proponen un método bayesiano de efectos aleatorios [15-18] que agrega la fuerza en áreas, edades y grupos utilizando métodos de efectos aleatorios que hacen lo siguiente: (a) identificar correlaciones entre áreas y edades vecinas y (b) detectar similitudes en los efectos espaciales y de edad entre grupos demográficos estratificados (por ejemplo, género).

Uno de los primeros intentos de modelar la mortalidad humana fue el del actuario inglés Benjamin Gompertz, quien argumentó que, a partir de cierta edad, el logaritmo de la fuerza de la mortalidad es una función lineal de la edad. Esta hipótesis, más tarde llamada ley de Gompertz, ha sido ampliamente utilizada en las proyecciones demográficas y actuariales de la mortalidad durante los dos últimos siglos [19]. Los autores de [20] aplicaron la relación marco del modelo de mortalidad de Gompertz-Makeham comúnmente utilizado en estudios de humanos y vida silvestre, asumiendo que el parámetro de tasa de Gompertz se ve afectado por la heterogeneidad individual, y muestran que en los resultados de un estudio de simulación, el modelo se recupera adecuadamente. los parámetros utilizados para la simulación.

Según [21], los modelos de mortalidad se pueden dividir en modelos estáticos (funciones de edad únicamente) versus dinámicos (funciones de edad y año en curso), y modelos deterministas versus estocásticos. Los autores consideraron los modelos de Gompertz y Makeham, que son deterministas y estáticos, y el método de Lee-Carter, que predice la mortalidad estocásticamente como un paseo aleatorio con deriva. Además, los autores señalaron que los modelos basados en Gompertz y Makeham se utilizan ampliamente con fines educativos, de predicción y de evaluación de riesgos , y el avance reciente más significativo en modelización y predicción de mortalidad: el método Lee-Carter.

Las estimaciones de mortalidad se utilizan para construir esperanzas de vida en la construcción de tablas de vida. Al comparar diferentes estimaciones de la esperanza de vida, los resultados de [22] muestran que el modelo de Lee-Carter sin el componente de memoria larga puede proporcionar subestimaciones de la esperanza de vida, mientras que las extensiones a la estructura del modelo de memoria larga reducen este efecto. Sin embargo, los resultados empíricos muestran que la estimación utilizando la metodología Gompertz-Makeham a diferencia de la metodología Lee-Carter es similar [21]; por esta razón, en esta investigación se utiliza la ampliamente conocida metodología Gompertz-Makeham.

Según [23], la mejora de la mortalidad es un desafío para la planificación de pensiones públicas y para el negocio de anualidades privadas. Anticipar la mortalidad futura es importante tanto para las políticas públicas como para la gestión de las instituciones financieras. A medida que disminuye la mortalidad de la población, los sistemas nacionales de seguridad social y las compañías de seguros de la mayoría de los países desarrollados están reevaluando sus tablas de mortalidad para reflejar el riesgo de longevidad [24].

Teniendo en cuenta la esperanza de vida y su impacto en las políticas gubernamentales, así como la tabla de vida existente, esta investigación tiene como objetivo estimar las curvas de mortalidad de la población masculina y femenina, a partir de proyecciones de los parámetros que determinan la mortalidad de cada cohorte, utilizando el método ABC (Computación Bayesiana Aproximada). El enfoque ABC nos proporciona una metodología flexible que puede adaptarse a problemas de estimación altamente complejos [6,25–29], como la estimación de la ley de mortalidad de una población. En este sentido, podemos probar diferentes modelos de comportamiento de mortalidad poblacional sin alterar significativamente la estructura de la metodología que se propondrá en este trabajo de in

Este manuscrito está dividido en cuatro secciones principales, que incluyen los Materiales y Los Métodos, los Resultados, la Discusión y, finalmente, las Conclusiones.

2. Materiales y métodos

En esta investigación utilizamos datos oficiales del gobierno chileno sobre estadísticas vitales obtenidos de https://www.ine.gob.cl/estadisticas/sociales/demografia-y-vitales/ nacimientos-matrimonios-y-defunciones (consultado el 29 de abril de 2024). Específicamente, se utilizó estadística sobre el número de defunciones de cada cohorte, con información disponible desde 2004 hasta 2021, que consideró los datos oficiales consolidados para las estimaciones y proyecciones a realizar.

Machine Translated by Google

La Figura 1 muestra la evolución de la esperanza de vida en el tiempo de la población chilena. Podemos observar que la esperanza de vida ha aumentado constantemente durante las últimas seis décadas. Este crecimiento en la esperanza de vida no es exclusivo de Chile, es una tendencia que se observa a nivel mundial. Las razones de la mejora en la esperanza de vida se centran en mejoras sostenidas en la calidad de vida y un mayor gasto en atención sanitaria, entre otras variables sociales que han sido ampliamente estudiadas en la literatura [30,31].

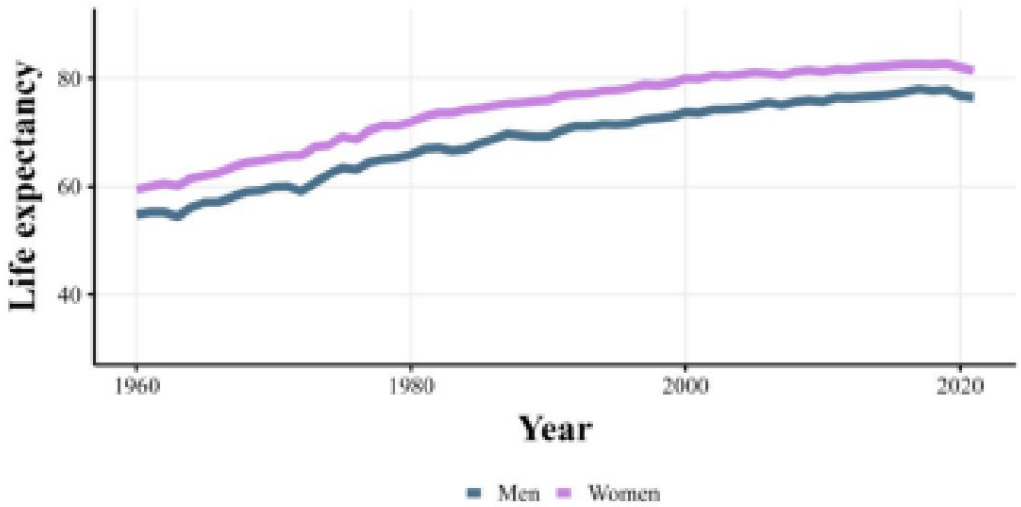


Figura 1. Evolución de la esperanza de vida en Chile.

Centrarse en la esperanza de vida plantea la necesidad de modelar la supervivencia para cada cohorte específica y así generar diversas políticas públicas orientadas a aspectos demográficos. Sin embargo, si ampliamos el análisis estático a un análisis temporal, esto genera dudas sobre la estabilidad de los parámetros que definen la mortalidad poblacional y crea una oportunidad para desarrollar mejoras metodológicas para proyectar la esperanza de vida de la población y su evolución en el tiempo.

2.1. Ley Gompertz-Makeham

Uno de los modelos más conocidos y utilizados para estimar las tasas de mortalidad poblacional corresponde a los desarrollados originalmente por Gompertz [32] y Make-ham [33], y se construye utilizando la fuerza instantánea de mortalidad λ(i), donde i corresponde a la edad de la cohorte específica. La estimación de la ley de Gompertz requiere la estimación de dos parámetros que pueden estimarse mediante técnicas estadísticas estándar relacionadas con la evolución de la edad de la población. Sin embargo, el desarrollo de Makeham añade un tercer parámetro en el proceso de estimación, que requiere técnicas de aproximación numérica pero produce un mejor ajuste a los datos de población al considerar un efecto de mortalidad extrínseco [34,35]. En esta investigación utilizamos una versión del modelo de Gompertz-Makeham, que describimos como

$$\lambda(yo) = C + {}_{mi}(yo-m)/b \quad b, \tag{1}$$

donde el parámetro C corresponde al efecto extrínseco de la mortalidad, b corresponde a una constante de ajuste exponencial y m corresponde a un factor que podemos interpretar como una ley de decadencia poblacional en el tiempo y que está relacionado con la esperanza de vida de la población.
Para obtener más referencias sobre el modelado de la ley de Gompertz-Makeham, consulte [36,37].

Para el cálculo de la probabilidad de muerte en el siguiente periodo $q_i^t = 1 - p_i^t$, donde $pag_i^t = Pr(Ti \geq t)$, utilizamos la siguiente definición de la función de supervivencia

$$t\,p = \exp - yo \int_i^{i+t} \lambda(s)ds\,. \tag{2}$$

Machine Translated by Google

Proposición 1. Según la ley de mortalidad de Gompertz-Makeham (ecuación (1)), con C = 0, la probabilidad de supervivencia en el período t es

$$_{t}p_{i} = \exp\left(-\frac{e^{(i-m)/b}\left(1 - e^{t}\right)}{b}\right). \quad (3)$$

Prueba. De las ecuaciones (1) y (2), tenemos la siguiente definición

$$_{t}p_{i} = \exp\left(-\int_{i}^{yo+t} C + \frac{e^{(s-m)/b}}{b}\, ds.\right)$$

Resolviendo la integral definida para la ecuación anterior, tenemos

$$_{t}p_{i} \exp\left(-Ct + e^{(i-m)/b}\left(1 - e^{t}\right)\right).$$

Ahora, suponiendo C = 0, la probabilidad de supervivencia es

$$_{t}p_{i} \exp\left(e^{(i-m)/b}\left(1 - e^{t}\right)\right).$$

□

La Figura 2 muestra la evolución del decaimiento poblacional bajo diferentes parametrizaciones , comenzando con una edad inicial de 50 años. Esta figura ilustra cómo la población disminuye a medida que aumenta la edad y permite proyectar la composición por edades de la población, facilitando el establecimiento de políticas demográficas específicas y adaptadas a l

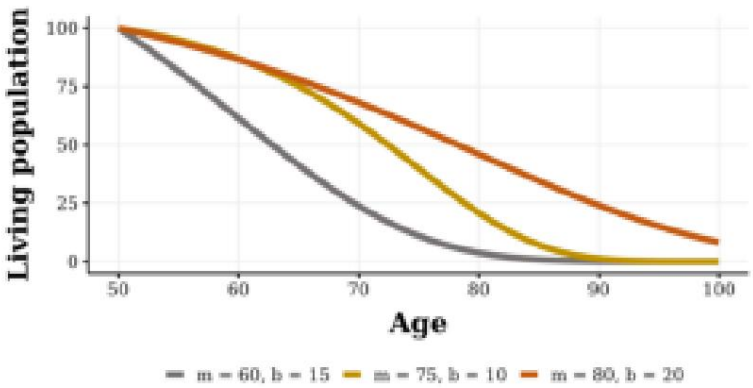


Figura 2. Diferentes curvas de supervivencia con datos sintéticos.

Dentro de los elementos esenciales para estimar los parámetros que definen la ley Gompertz-Makeham, es necesario comprender la dinámica de la mortalidad de diferentes cohortes poblacionales. Con datos de mortalidad de varias cohortes, generamos ajustes y estimaciones de los valores de los parámetros para la Ecuación (3).

2.2. Tasas de mortalidad

Las tablas de tasas de mortalidad y mortalidad se utilizan en diversas aplicaciones como la estimación de la esperanza de vida y el cálculo del monto de las pensiones vitalicias, entre muchas otras aplicaciones. Las tablas de tasas de mortalidad corresponden a una matriz de valores pertenecientes a una cohorte específica i en un momento t específico, lo que permite comprender la evolución temporal de las tasas de mortalidad. Definimos Xi,t = (x1,i,t , x2,i,t , . . . , xNi ,i,t) como un vector que representa la proporción de sobrevivientes en el año siguiente para el número de personas en el área específica. cohorte i en un momento t. La densidad de probabilidad de cada elemento del vector Xi,t se define de la siguiente manera:

$$x_{n,i,t} = F(\Theta i,t), \quad (4)$$

Machine Translated by Google

donde Θi,t = (θ1,i,t , θ2,i,t , . . . θJ,i,t) corresponde al conjunto de parámetros de la cohorte i en el periodo t que definen el comportamiento estocástico de los elementos del vector Xi , t . Describimos la evolución de los valores de los parámetros que definen la función de densidad como

$$\theta_{j,i,t} = H_j(i, t) + v_{i,t}, \tag{5}$$

donde Hj(·) corresponde a una función específica del parámetro j que depende de la cohorte i en el periodo t; vt N(0, σ v2) corresponde a un término de error con una distribución normal de varianza 2φv . Esta descripción permite comprender la evolución de los valores de los parámetros que definen el comportamiento de supervivencia de los miembros de una cohorte específica como un fenómeno aleatorio. Como ejemplos de funciones que modelan la evolución temporal estocástica de parámetros podemos mencionar [38,39], entre otros autores.

Para esta investigación, asumimos que la función que describe la supervivencia de un individuo de la cohorte i para el año siguiente corresponde a una variable aleatoria que tiene una distribución de Bernoulli con el parámetro gi,t , donde el parámetro gi,t puede interpretarse como la proporción aproximada de individuos de la cohorte i que morirán en el próximo período, que describimos como

$$x_{j,i,t} \quad \text{Bernoulli}(g_{i,t}). \tag{6}$$

Por otro lado, proponemos que el parámetro gi,t evoluciona en el tiempo según un modelo autorregresivo integrado de media móvil (ARIMA) con respecto a la misma cohorte. En este sentido, el factor autorregresivo de una misma cohorte corresponde al factor de supervivencia natural a una determinada edad y la media móvil se relaciona con el comportamiento del término de error. Describimos el modelo ARIMA(S, 0, Z) y el modelo ARIMA(S, 1, Z) en las siguientes ecuaciones

$$g_{i,t} = \mu_i + \sum_{s=1}^{S} {}_{i,s}g_{i,t-s} + \sum_{z=1}^{Z} \kappa_{i,z}v_{i,t-z} + v_{i,t}, \tag{7}$$

$$\Delta g_{i,t} = \sum_{s=1}^{S} {}_{i,s}\Delta g_{i,t-s} + \sum_{z=1}^{Z} \kappa_{i,z}v_{i,t-z} + v_{i,t}. \tag{8}$$

Esta formulación nos permite comprender la evolución de los parámetros a lo largo del tiempo y nos ayuda a comprender su estabilidad como un fenómeno aleatorio. Otro aspecto importante es que nos proporciona una interesante herramienta para proyectar la supervivencia individual y, en consecuencia, la composición por edades de la sociedad. Un elemento a considerar corresponde a las limitaciones de las técnicas de series temporales en la predicción, especialmente cuando se extienden a lo largo de un lapso de tiempo muy amplio.

2.3. Estimación de parámetros usando técnicas ABC

En esta sección, definimos el procedimiento de estimación de parámetros para la ley de Gompertz usando técnicas basadas en la inferencia bayesiana. En el análisis bayesiano, el parámetro desconocido que define el comportamiento de mortalidad de la población se representa como una variable aleatoria η con una distribución de probabilidad π(η), conocida como distribución a priori. La distribución previa resume las creencias iniciales sobre los valores de los parámetros que tiene el investigador, las cuales deben actualizarse en función de la evidencia revelada por los datos observados.

Dado un conjunto de parámetros η, los datos observados X = x1, x2, . . . , xn sigue una función de densidad f(X|η) que define un modelo paramétrico con el valor de los parámetros η, que determina el comportamiento de la variable aleatoria. Teniendo esto en cuenta, podemos definir la distribución conjunta como

$$f(X, \eta) = f(X|\eta)\pi(\eta), \tag{9}$$

Machine Translated by Google

y la densidad marginal de X se define de la siguiente manera:

$$f(X) = f(X, \eta)d\eta = f(X|\eta)f(\eta)d\eta. \quad (10)$$

La densidad condicional de η dados los valores observados de X corresponde a f(η|X) y se conoce como distribución posterior. La distribución posterior se define como

$$\text{Densidad posterior} \quad \text{Probabilidad} \times \text{Densidad previa.} \quad (11)$$

Dentro de las técnicas modernas para estimar las distribuciones posteriores de parámetros que definen fenómenos aleatorios, podemos nombrar métodos como la Computación Bayesiana Aproximada (ABC). En la literatura, las menciones notables incluyen [6,25–29]. Las técnicas ABC comprenden una serie de algoritmos de aceptación-rechazo que utilizan estadísticas resumidas de una muestra aleatoria agrupada alrededor de un valor objetivo para la estimación de la distribución posterior de parámetros. Estas técnicas han demostrado una flexibilidad significativa debido a la facilidad de generar muestras aleatorias independientes y permiten aproximaciones de las verdaderas distribuciones de parámetros cuando la estimación analítica es compleja o no factible.

El algoritmo 1 muestra cómo aplicar técnicas ABC para estimar la disminución de la población, utilizando la ecuación (3) como base. El algoritmo toma los siguientes requisitos para comenzar: Nm que corresponde al número de muestras necesarias para calcular una densidad de probabilidad de los parámetros; ψm, que corresponde a la densidad a priori del parámetro m; ψb , que corresponde a la densidad a priori del parámetro b; inicial, que corresponde a la edad inicial en la que se quiere estimar la disminución de la población; terminal, que corresponde a la edad terminal para la evaluación de la disminución de la población; Mortalidad, que corresponde a la mortalidad anual sobre la cual se hará la estimación, la cual se puede obtener a partir de los datos de mortalidad observada de una población o su proyección; y , que corresponde al valor de error que estamos dispuestos a aceptar para la generación de la densidad de probabilidad de los parámetros.

Algoritmo 1 Modelado de la decadencia de la población.

```
Requerir: N, ψm, ψb , inicial, terminal, Mortalidad,  .
  j ← 0
  mientras j < N do m ←
      Uni f orm(0, ψm) b ← Uni f orm(0,
      ψb ) población ← 1 popsim ← 1
      para i = inicial a (terminal
      − 1) hacer
      población[i + 1 ] ← población[i] × (1 − Mortalidad[i]) (i−m)/
          b 1 − e 1/b popsim[i + 1] ← popsim[i] × (1 − exp e end for terminal if ∑
                                                                              )
          i=inicial |población[i] − popsim[i]| <  entonces
          METRO[j] ← metro
          B[j] ← bj
          ← j + 1
      final si
  final mientras
```

Uno de los pasos más importantes en las metodologías bayesianas es la selección de los parámetros myb previos . Una selección adecuada de la distribución anterior mejora los resultados de la estimación de la distribución posterior [40] y acelera los cálculos computacionales, haciendo factible el uso de estas metodologías en muchos casos. Sin embargo, muchas veces no existe información sobre cuál es el mejor previo a utilizar, y se debe utilizar una distribución no informativa como una distribución uniforme , asumiendo la posibilidad de sesgos en los resultados que deben ser

Machine Translated by Google

corregido mediante la selección adecuada de la distribución anterior. En nuestro procedimiento sugerimos utilizar una distribución uniforme para la caracterización del prior, ya que no contamos con información sobre el comportamiento de todos los parámetros de mortalidad en su conjunto.

En el siguiente paso, es necesario seleccionar aleatoriamente valores para myb , utilizando los antecedentes determinados para los parámetros. Posteriormente se calcula la caída de la mortalidad real y la estimada en base a los parámetros seleccionados. Una vez obtenidos los decaimientos, tanto reales como basados en los parámetros seleccionados, se mide la diferencia. Si la diferencia está por debajo del valor de , se acepta y se incorpora a los vectores M y B. Finalmente, podemos calcular la densidad posterior usando los vectores M y B.

La Figura 3 muestra un resumen de la metodología utilizada para estimar las curvas de supervivencia. En primer lugar, es necesario obtener datos históricos de mortalidad de la población. Esto nos permite estimar el valor de los parámetros de mortalidad de cada cohorte para cada año, obteniendo así la serie temporal de los valores estimados de los parámetros. En segundo lugar, se procede a proyectar los valores de los parámetros para un cierto número de años, con base en la metodología descrita en las Ecuaciones (7) y (8). En tercer lugar, utilizamos las proyecciones de cada cohorte como entradas para el Algoritmo 1, obteniendo así las densidades de parámetros utilizadas para calibrar la curva de mortalidad descrita en la Ecuación (3). Finalmente, se procede a obtener valores aleatorios para los parámetros de la Ecuación (3) utilizando las densidades calculadas, con el fin de obtener la proyección de supervivencia de la población. Esto proporciona una densidad de supervivencia para cada una de las edades proyectadas, que puede usarse para alguna aplicación social en el contexto de la proyección de población.

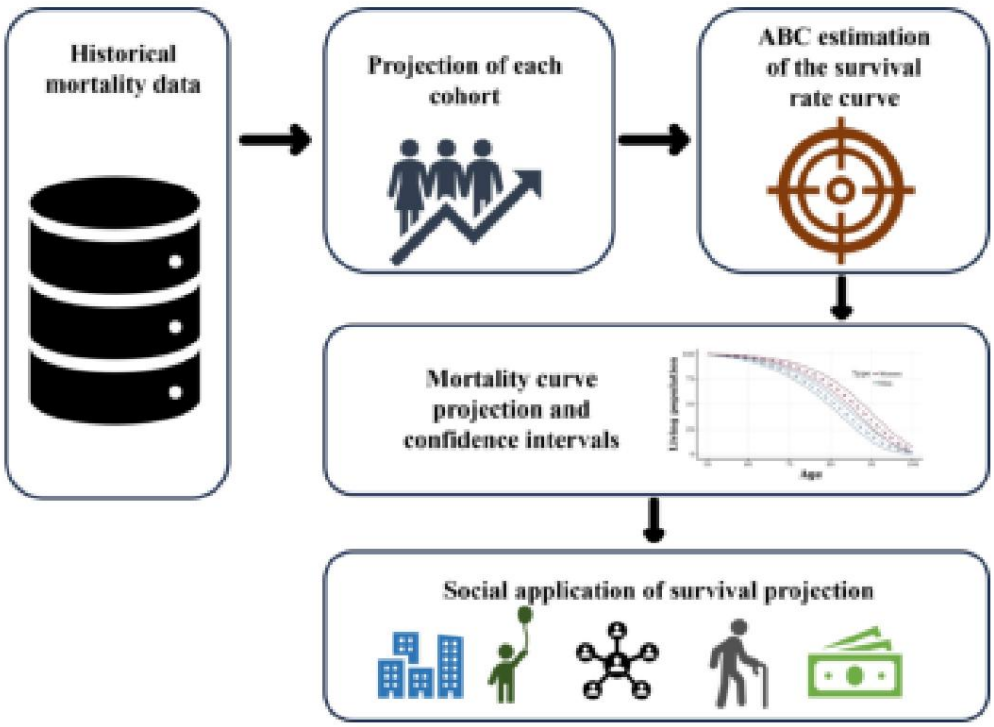


Figura 3. Resumen de la metodología utilizada en la investigación.

3. Resultados

En este apartado se procede a presentar los resultados de la metodología propuesta en los apartados anteriores. En primer lugar, mostramos en la Tabla 1 los resultados de algunas de las regresiones realizadas al estimar las proyecciones de la evolución de los parámetros en el tiempo, a partir de la expresión general de las Ecuaciones (7) y (8) para 2030. En este caso, seleccionamos el Modelo ARIMA con los criterios AIC más bajos, que permite combinar un modelo con baja varianza y un número limitado de parámetros a estimar, elemento fundamental debido al número limitado de observaciones para cada cohorte. Las columnas AR, I y MA corresponden al número de parámetros autorregresivos, integrados y de media móvil del modelo.

También incorporamos la información de los valores AIC y BIC de los modelos seleccionados.

Machine Translated by Google

Tabla 1. Estimación de parámetros para una muestra seleccionada de cohortes.

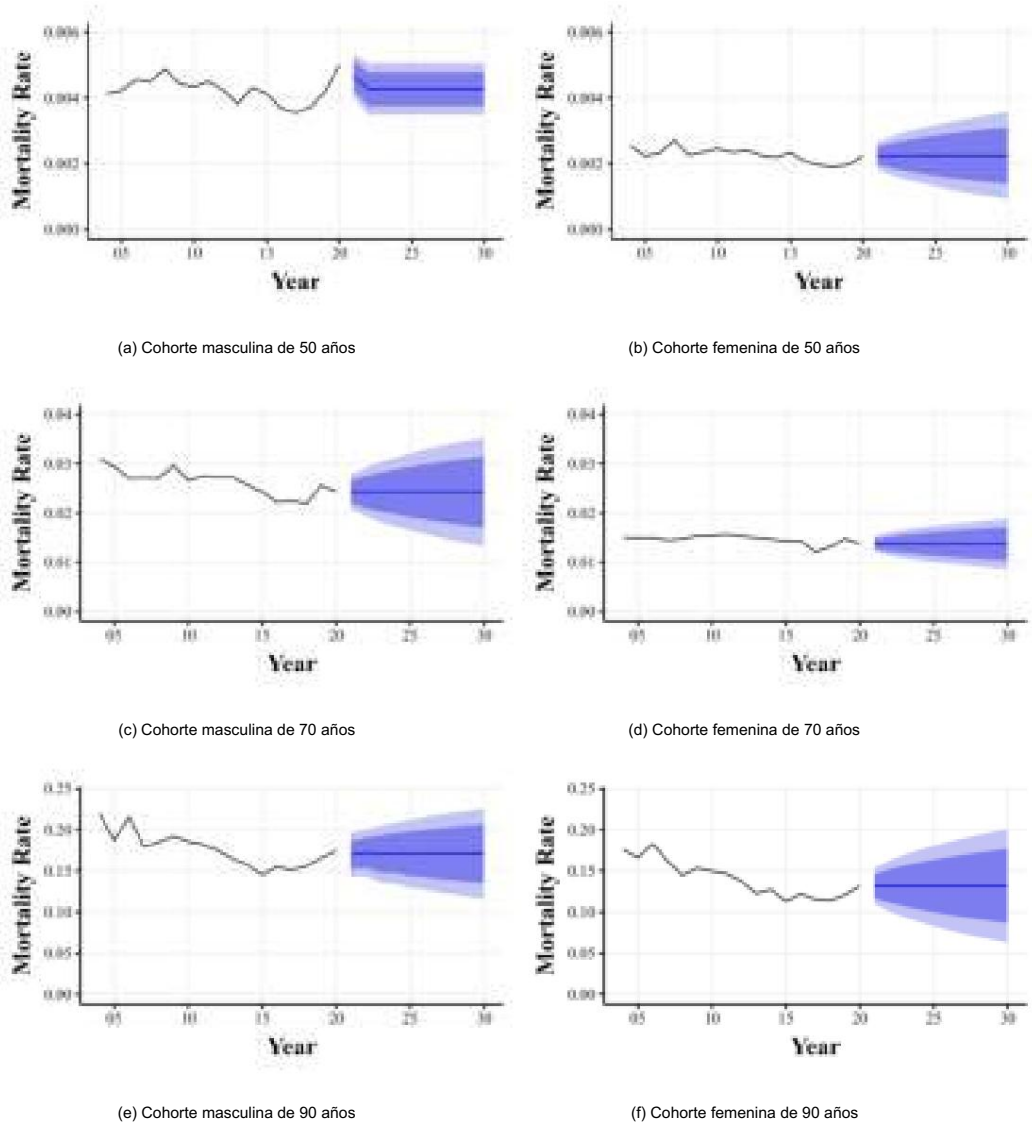
		Arkansas	I	MAMÁ	AIC	BIC
Femenino	50 años	0	1	0	−223,06	−222,29
	55 años	0	0	0	−241,18	−239,51
	60 años	0	1	0	−193,29	−192,81
	65 años	0	1	0	−195,04	−194,27
	70 años	0	1	0	−179,70	−178,92
	75 años	0	1	0	−158,23	−157,46
	80 años	0	1	0	−138,95	−138,17
	85 años	0	1	0	−121,86	−121,09
	90 años	0	1	0	−96,52	−95,75
Masculino	50 años	0	0	1	−218,45	−215,95
	55 años	0	0	0	−203,69	−202,03
	60 años	0	1	0	−176,22	−175,45
	65 años	0	1	0	−172,06	−171,28
	70 años	0	1	0	−155,15	−154,38
	75 años	0	1	0	−135,20	−134,42
	80 años	0	1	0	−129,22	−128,45
	85 años	0	1	0	−102,55	−101,78
	90 años	1	1	0	−89,32	−87,77

Los resultados muestran heterogeneidad de los resultados para la selección del mejor modelo. En algunos casos, eliminar la tendencia mediante diferenciación es suficiente para obtener una tendencia estacionaria. proceso, mientras que en otros es necesario considerar la media autorregresiva y móvil componentes para obtener un proceso estacionario.

A partir de los modelos seleccionados, generamos proyecciones para los próximos 10 años, que nos da los posibles resultados para el parámetro que define la mortalidad de cada valor de cohorte con un 95% de confianza. Esta proyección se muestra en la Figura 4, que considera proyecciones para hombres y mujeres de 50, 70 y 90 años. En general, podemos observar que para todas las proyecciones, La tasa de mortalidad de los hombres es mayor que la de las mujeres, lo que indica una diferencia significativa en la composición por edades de la población de edad avanzada. Con estas proyecciones podemos generar la curva de supervivencia descrita en la Ecuación (3), utilizando la metodología de estimación de parámetros utilizando las técnicas ABC descritas en el Algoritmo 1, el cual es un elemento necesario para la generación de aplicaciones sociales que requieran el uso de proyección poblacional.

La Tabla 2 muestra la estimación de los parámetros para la Ecuación (2) que describe el comportamiento decaimiento poblacional para hombres y mujeres, obtenidos como principales resultados del Algoritmo 1. La estimación utiliza el valor esperado de la proyección de los parámetros que determinan la tasa de mortalidad de cada cohorte; el caso del percentil 5 corresponde al mejor de los casos escenario para cada una de las cohortes ya que marca el escenario de mortalidad más bajo al que población podría verse sometida y el caso del percentil 95 corresponde al peor de los casos. tasa de mortalidad para cada cohorte. Las columnas identifican el valor promedio y el estándar. desviación para los parámetros myb para cada uno de los casos. Podemos observar que los escenarios para el parámetro m para hombres oscila entre 79.34 y 90.14, mientras que para el parámetro b oscila entre las 11.12 y las 11.79; para las mujeres, el parámetro m oscila entre 85,48 y 95,30 y parámetro b entre las 9.57 y las 11.30.

Machine Translated by Google



(a) Cohorte masculina de 50 años (b) Cohorte femenina de 50 años

(c) Cohorte masculina de 70 años (d) Cohorte femenina de 70 años

(e) Cohorte masculina de 90 años (f) Cohorte femenina de 90 años

Figura 4. Proyección del parámetro p para diferentes edades y diferentes sexos.

Tabla 2. Estimación de parámetros de decadencia poblacional para hombres y mujeres.

	metro		b	
	Significar	Dakota del Sur	Significar	Dakota del Sur
media masculina	83,39	0,60	11.12	0,96
Masculino bajo	79,34	0,56	11,21	1.04
Hombre alto	90,14	0,56	11,79	0,86
media femenina	88,92	0,64	9,95	0,79
Mujer baja	85,48	0,62	9,57	0,77
Mujer alta	95,30	0,96	11,30	1.08

La Figura 5 muestra el desplazamiento de la curva de supervivencia para machos y hembras, utilizando el valor medio de los parámetros mostrados en la Tabla 2 y comparado con la mortalidad estimada curva para el año 2000 como punto de partida. Se observa que en ambos casos hay una mejora en la esperanza de vida, lo que repercute en la composición por edades de la población de edad avanzada y tener un impacto importante en otros elementos relacionados, como la estimación de las pensiones y servicios de salud, por nombrar algunos.

Machine Translated by Google

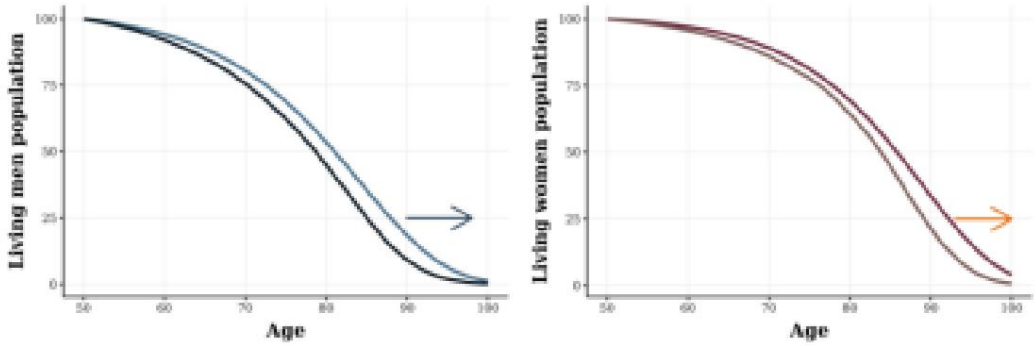


Figura 5. Evolución de la proyección del valor esperado de deterioro poblacional. El giro hacia la derecha implica mejoras en la esperanza de vida de la población.

Finalmente, generamos bandas de confianza para la estimación de la decadencia poblacional utilizando los valores asociados con el percentil 5 y el percentil 95 de las proyecciones de los parámetros definidos anteriormente, y utilizamos el Algoritmo 1 para la estimación de sus parámetros. La Figura 6 muestra la proyección de disminución de la población para hombres y mujeres, con sus respectivas bandas de confianza. Cabe mencionar que este procedimiento genera bandas de confianza, considerando el "mejor" y el "peor" caso en términos de la estimación de los parámetros de la tasa de mortalidad, lo que convierte a estas bandas de confianza en escenarios conservadores en términos de la estimación de la proyección de decaimiento poblacional. Para la generación de bandas de confianza considerando percentiles específicos se deben realizar simulaciones independientes para cada una de las cohortes. Luego, el procedimiento de estimación de parámetros definido en el Algoritmo 1 debe realizarse en un número suficientemente grande de cada una de las cohortes para obtener la densidad de la proyección de decaimiento.

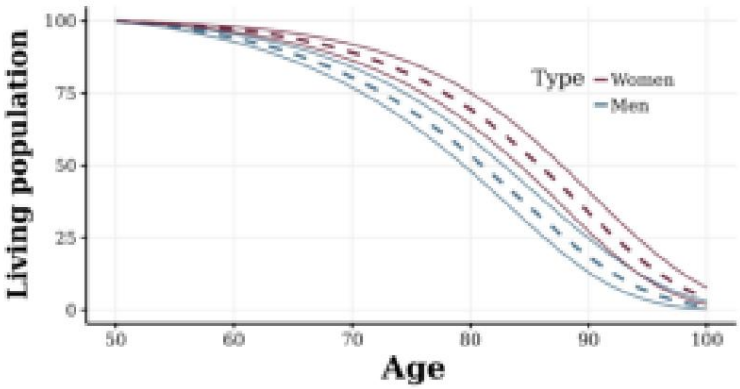


Figura 6. Estimación de las proyecciones de población hasta 2030. Las líneas de puntos corresponden al valor medio de las proyecciones.

Determinación de Renta Vitalicia

Para comprender cómo la metodología propuesta impacta significativamente varias aplicaciones , procedemos con un ejemplo simple de determinación de la renta vitalicia de un ciudadano. En este contexto, consideramos a un hombre que se jubila a los 65 años con un monto acumulado de USD 100.000. Además, utilizamos los datos de mortalidad de 2010 como base y los contrastamos con las proyecciones de densidad de población para 2030 generadas y mostradas en los resultados. La renta vitalicia del ciudadano se calcula como

$$f\,e_anualidades = \frac{Ws/(1+\gamma))\,li}{ai}, \tag{12}$$

donde Ws corresponde al nivel de riqueza que tiene el individuo s al momento de jubilarse; γ corresponde a la comisión de las compañías de seguros al ofrecer la anualidad,

Machine Translated by Google

que para este ejemplo tomaremos como cero; ai corresponde al factor de anualidad actuarial (ver [41]) a la edad i, que se puede calcular como

$$ai = \sum_{t=0}^{\infty} \frac{{}^{t}_{pag}i}{(1+r)\,t} \tag{13}$$

donde ${}^{t}_{pag}i$ corresponde a la función definida en la Ecuación (3) que define la probabilidad de supervivencia en la edad de jubilación i en t años en el futuro, y r representa la tasa anual efectiva tasa de valoración utilizada para descontar los flujos de efectivo, que para este ejemplo consideramos un valor del 3%.

En el Cuadro 3 se muestran los valores estimados para el cálculo de la renta vitalicia para un hombre jubilarse a los 65 años. La primera y quinta columnas corresponden a la edad del individuo; el segundo y sexto corresponden al factor de descuento utilizado (3% anual); el tercero y Las séptimas columnas corresponden a la supervivencia estimada del individuo para sobrevivir hasta el edad de la fila correspondiente, considerando las mortalidades de 2010; y, finalmente, el cuarto y octava columnas equivalen a la tercera y séptima, pero para la proyección de 2030.

Tabla 3. Valores para la estimación de renta vitalicia.

Edad	$1/(1+i)^t$	${}^{t}_{pag}yo,\ 2010$	${}^{t}_{pag}yo,\ 2030$	Edad	$1/(1+i)^t$	${}^{t}_{pag}yo,\ 2020$	${}^{t}_{pag}yo,\ 2030$
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

Finalmente, en el Cuadro 4 se muestran los resultados del cálculo de la renta vitalicia para el pensionado de 65 años. La primera columna corresponde a la estimación de la anualidad actuarial. factor, considerando las mortalidades de 2010; la segunda columna corresponde a la estimación de el factor de anualidad actuarial, pero considerando ahora la proyección 2030; el tercero y el cuarto las columnas corresponden a la anualidad calculada; y la quinta columna muestra el porcentaje variación entre anualidades. Se observa que a medida que mejora la esperanza de vida, en función de la Según la metodología propuesta, las anualidades disminuyen a medida que las personas viven más. La cantidad debe ser distribuidos a lo largo de una vida útil más larga.

Tabla 4. Resultados del impacto de la evolución de la mortalidad.

ai,2010	ai,2030	vida anualidad2010	vida útil_anualidad2030	% de variación
11.887	12.571	8412	7955	−5,43%

Machine Translated by Google

4. Discusión

El debate sobre la salud y sus diversas implicaciones para la población ha sido un aspecto de importancia recurrente y significativa en las emergencias ciudadanas, políticas y económicas en diferentes países del mundo.

La literatura muestra una necesidad creciente de una estimación adecuada de la esperanza de vida para intentar proyectar la dinámica poblacional y tomar decisiones sobre políticas públicas [42,43]. Sin embargo, la implementación de nuevas metodologías de estimación proporciona un nuevo marco sobre el cual realizar estas proyecciones.

En este sentido, las tres etapas de la metodología propuesta en esta investigación, (1) estimación de la curva de supervivencia poblacional, (2) proyección de los parámetros que definen la mortalidad de cada cohorte, y (3) estimación de los parámetros utilizando una metodología bayesiana , nos permiten entender las proyecciones de las curvas de supervivencia como un fenómeno aleatorio, a diferencia de la mayoría de las aproximaciones que se realizan en la literatura [36,37,44].

La estimación adecuada de las curvas de supervivencia presenta un problema intrínseco debido a la heterogeneidad de la población. Los países de altos ingresos tienen una mayor esperanza de vida debido al tratamiento de enfermedades [3] y al caso de poblaciones rurales versus poblaciones urbanas [45], entre otras fuentes de variación, lo que hace complejo tener una única función que describa la evolución de la población a medida que envejece.

La metodología propuesta nos permite generar una variedad de resultados posibles para la proyección poblacional mediante la metodología bayesiana presentada en esta investigación y, por lo tanto, absorbe cambios tecnológicos que pueden provocar mejoras drásticas en la esperanza de vida, así como eventos catastróficos que pueden inducir un aumento de la mortalidad.

Los resultados mostrados en la investigación muestran una diferencia en la estimación de los parámetros que definen la curva de supervivencia de hombres y mujeres, mostrando un comportamiento diferenciado que implica una nueva proyección para la pirámide poblacional, los cuales son elementos esenciales para la generación de políticas públicas de género. centrado en las personas mayores. Estos resultados generales implican una proporción significativa de mujeres mayores que requerirán servicios sociales especializados en un futuro próximo.

Por otro lado, un resultado intermedio que podemos observar es la estimación de modelos que definen la evolución temporal de los parámetros de mortalidad de cada cohorte de la población. En general, podemos observar que en una proporción significativa de cohortes, el mejor modelo que define el proceso de series temporales de los parámetros se basa en una simple diferenciación; sin embargo, otras cohortes establecen modelos más complejos para la dinámica.

En general, podemos mencionar que la metodología permite flexibilidad dentro de diferentes poblaciones y otras aplicaciones que requieren establecer la dinámica de supervivencia de una población.

Nuestro enfoque difiere de otras metodologías importantes, como la estimación de curvas de mortalidad [19,46–48]. En nuestro caso, consideramos la proyección de los parámetros que definen la mortalidad como el insumo fundamental para estimar las curvas de mortalidad. Además, la metodología propuesta, concebida como componentes modulares –siendo el uso de la ley de Gompertz-Makeham uno de esos módulos– nos permite la posibilidad de emplear otros enfoques de estimación de curvas de mortalidad que puedan servir como contrastes de modelos.

Un elemento importante a considerar es la selección de la distribución previa implementada en el algoritmo. En nuestro caso, se utiliza para la metodología una distribución no informativa (distribución uniforme) , asumiendo costos computacionales y posibles sesgos debido a la selección inadecuada de la distribución [40]. Este punto debería considerarse en investigaciones futuras con una mayor cantidad de datos disponibles para las estimaciones porque pequeñas fluctuaciones en las estimaciones pueden tener un impacto significativo en las proyecciones.

5. Conclusiones

En la presente investigación utilizamos datos oficiales del Gobierno de Chile sobre estadísticas de mortalidad vital. Específicamente, se utilizó estadística sobre el número de defunciones de cada cohorte, con información disponible desde 2004 hasta 2021, considerando los datos oficiales consolidados para las estimaciones y proyecciones a realizar.

Machine Translated by Google

Se puede observar que la esperanza de vida ha aumentado constantemente durante las últimas seis décadas.

Este crecimiento en la esperanza de vida no es exclusivo de Chile; es un fenómeno global. Las razones de la mejora de la esperanza de vida se centran en el aumento sostenido de la calidad de vida y el aumento del gasto en servicios médicos, entre otras variables sociales, que han sido ampliamente estudiadas en la literatura.

Hemos desarrollado una metodología para estimar las curvas que determinan la esperanza de vida, basada en la evolución temporal de los parámetros que determinan la mortalidad de la población, utilizando un modelo ARIMA. Esta metodología se basa en la proyección de los parámetros para posteriormente estimar la curva de Gompertz-Makeham, utilizando un enfoque bayesiano conocido como Computación Bayesiana Aproximada (ABC).

De hecho, investigaciones como la que aquí se presenta pueden ayudar a definir prioridades de trabajo, seguimiento e implementación de medidas para mejorar las debilidades observadas en los sistemas públicos que utilizan la esperanza de vida de la población para definir sus servicios, lo que tiene un impacto significativo. sobre la economía y que, hoy en día, representan un alto nivel de atención y escrutinio público por parte de los políticos y empresarios responsables de estos servicios en relación con las pensiones y los sistemas de salud.

La metodología presentada permite establecer el valor medio del desplazamiento de la curva de supervivencia para la población mayor de 50 años y las proyecciones de mejor y peor escenario, que pueden interpretarse como bandas de confianza en el pronóstico de supervivencia de la población.

Según la literatura, la relevancia del área de salud para el crecimiento económico podría ser un camino de trabajo y planificación para las partes involucradas, con el propósito de enfocarse en uno de sus problemas prioritarios, como es la reactivación económica, con el objetivo de lograr el crecimiento. tasas, por lo que es un área de interés en el ámbito internacional, reduciendo drásticamente la pobreza y elevando el ingreso per cápita.

En cuanto a limitaciones y direcciones futuras, planeamos abordar condiciones extremas como crisis financieras o condiciones pandémicas, utilizando métodos alternativos de estimación de entropía, como el método basado en histogramas, para evaluar la previsibilidad de las curvas de supervivencia en Chile a través del método de máxima entropía. incorporando datos de volatilidad extrema influenciados por contextos sociales. Además, a modo de proyección comparativa, este estudio podría analizar el peso estratégico que tienen una serie de variables que han estado en el foco de la discusión pública y privada, como la educación, la sostenibilidad, el equilibrio ambiental, la salud mental, la igualdad de género, la modernización del Estado y la democratización de las tecnologías digitales.

Contribuciones de los autores: curación de datos, HdlF-M., KC-J., CE-G. y RR-T.; análisis formal HdlF-M., KC-J. y RR-T.; investigación, HdlF-M., KC-J., CE-G. y RR-T.; metodología, HdlF-M., KC-J., CE-G. y RR-T.; escrito: borrador original, HdlF-M., KC-J., CE-G. y RR-T.; redacción: revisión y edición, HdlF-M., KC-J., CE-G. y RR-T. Todos los autores han leído y aceptado la versión publicada del manuscrito.

Financiamiento: El trabajo de investigación de H. de la Fuente-Mella fue apoyado parcialmente por el Proyecto FONDECYT Regular. Código del Proyecto: 1230881. Agencia Nacional de Investigación y Desarrollo de Chile (ANID).

Declaración de disponibilidad de datos: Los datos utilizados para respaldar los hallazgos de este estudio están disponibles a pedido del autor correspondiente.

Conflictos de intereses: Los autores declaran no tener ningún conflicto de intereses.

Referencias

1. Alaimo, LS; Levantesi, S.; Nigri, A. Agrupación difusa de la descomposición de la esperanza de vida saludable: un análisis multipoblacional. Socioeconomía. Plan. Ciencia. 2024, 92, 101805. [Referencia cruzada]
2. Cho, H.; Wang, Z.; Yabroff, KR; Liu, B.; McNeel, T.; Feuer, EJ; Mariotto, AB Estimación de la esperanza de vida ajustada por el estado de salud autoevaluado en los Estados Unidos: encuesta nacional de entrevistas de salud vinculada a la mortalidad. BMC Salud Pública 2022, 22, 141. [Referencia cruzada] [PubMed]

Machine Translated by Google

3. Jung, M.; Ko, W.; Muhwava, W.; Choi, Y.; Kim, H.; Parque, YS; Jamberé, GB; Cho, Y. Cuidado con las brechas: edad y causas de mortalidad y esperanza de vida específicas en la población mayor de Corea del Sur y Japón. BMC Public Health 2020, 20, 819. [CrossRef] [PubMed]

4. Roubal, AM; Pollock, EA; Gennuso, KP; Blomme, CK; Givens, ML Consideraciones metodológicas y prácticas comparativas para la esperanza de vida como medida de mortalidad en salud pública. Representante de Salud Pública 2022, 137, 255–262. [Referencia cruzada] [PubMed]

5. Congdon, P. Esperanza de vida para áreas pequeñas: una metodología bayesiana de efectos aleatorios. Int. Estadística. Rev. 2009, 77, 222–240. [Referencia cruzada]

6. Peters, GW; Fan, Y.; Sisson, SA Sobre Monte Carlo secuencial, control de rechazo parcial y cálculo bayesiano aproximado. Estadística. Computadora. 2012, 22, 1209–1222. [Referencia cruzada]

7. Brønnum-Hansen, H.; Foverskov, E.; Andersen, I. Desigualdad de ingresos en la esperanza de vida y esperanza de vida sin discapacidad en Dinamarca. J. Epidemiol. Salud comunitaria 2021, 75, 145–150. [Referencia cruzada]

8. Camargos, MCS; do Nascimento Rodrigues, R.; Machado, CJ Esperanza de vida saludable para los ancianos brasileños, 2003. Ciência Saúde Coletiva 2009, 14, 1903. [CrossRef]

9. Sandoval, MH; Alvear Portaccio, ME; Albalá, C. Esperanza de vida por origen étnico en Chile. Frente. Salud Pública 2023, 11, 1147542. [Referencia cruzada]

10. DuGoff, EH; Canudas-Romo, V.; Buttorff, C.; Leff, B.; Anderson, GF Múltiples enfermedades crónicas y esperanza de vida: un análisis de la tabla de vida. Medicina. Cuidado 2014, 52, 688–694. [Referencia cruzada]

11. Tyrer, F.; Chudasama, YV; Lambert, ordenador personal; Rutherford, MJ Métodos paramétricos flexibles para calcular la esperanza de vida en pequeños poblaciones. Popular. Métricas de salud 2023, 21, 13. [CrossRef] [PubMed]

12. Kamerud, DB Riesgo de mortalidad y esperanza de vida. J. Ópera. Res. Soc. 1989, 40, 199–200. [Referencia cruzada]

13. Wajiga, G.; Adekola, OA Esperanza de vida en una población no homogénea. J. Ópera. Res. Soc. 1998, 49, 1011–1012. [Referencia cruzada]

14. Ho Dang, P.; Nguyen, TN Nuevos métodos de estimación de la esperanza de vida. Reinar. Ecológico. Estadística. 2022, 29, 587–606. [Referencia cruzada]

15. Cairns, AJ; Blake, D.; Dowd, K.; Coughlan, GD; Khalaf-Allah, M. Modelado estocástico de mortalidad bayesiano para dos poblaciones. ASTIN Toro. J.IAA 2011, 41, 29–59.

16. Pham, H.; Pham, HT Un enfoque bayesiano para modelos de múltiples etapas con tasa de riesgo lineal dependiente del tiempo. Métodos de Montecarlo Aplica. 2019, 25, 307–316. [Referencia cruzada]

17. Kim, Y.; Kang, SB; Berliner, LM Modelos de procesos de difusión bayesianos con parámetros variables en el tiempo. J. Estadísticas coreanas. Soc. 2012, 41, 137-144. [Referencia cruzada]

18. Poon, A.; Zhu, D. Un nuevo modelo bayesiano de contagio e interdependencia. Economía. Rev.2022, 41, 806–826. [Referencia cruzada]

19. Li, H.; Bronceado, KS; Tuljapurkar, S.; Zhu, W. Ley de Gompertz revisada: previsión de la mortalidad con un modelo exponencial multifactorial. Asegurar. Matemáticas. Economía. 2021, 99, 268–281. [Referencia cruzada]

20. Colchero, F.; Kiyakoglu, BY Más allá del modelo proporcional de fragilidad: estimación bayesiana de la heterogeneidad individual de la mortalidad parámetros. Bioma. J. 2020, 62, 124-135. [Referencia cruzada]

21. Mélnikov, A.; Romaniuk, Y. Evaluación del desempeño de los modelos de mortalidad por riesgo de Gompertz, Makeham y Lee-Carter gestión con contratos unit linked. Asegurar. Matemáticas. Economía. 2006, 39, 310–329. [Referencia cruzada]

22. Yan, H.; Peters, GW; Chan, J. Modelos de mortalidad que incorporan memoria larga para la estimación de tablas de vida: un análisis exhaustivo. Ana. Actuar. Ciencia. 2021, 15, 567–604. [Referencia cruzada]

23. Delwarde, A.; Denuit, M.; Eilers, P. Suavizado de los modelos logbilineales de Lee-Carter y Poisson para la predicción de la mortalidad: A enfoque penalizado de log-verosimilitud. Estadística. Modelo. 2007, 7, 29–48. [Referencia cruzada]

24. Giacometti, R.; Bertocchi, M.; Rachev, ST; Fabozzi, FJ Una comparación del modelo Lee-Carter y el modelo AR-ARCH para pronosticar las tasas de mortalidad. Asegurar. Matemáticas. Economía. 2012, 50, 85–93. [Referencia cruzada]

25. Beaumont, MA; Cornuet, JM; Marín, JM; Robert, CP Cálculo bayesiano aproximado adaptativo. Biometrika 2009, 96, 983–990. [Referencia cruzada]

26. Toni, T.; Welch, D.; Strelkowa, N.; Ipsen, A.; Stumpf, MP Esquema de cálculo bayesiano aproximado para la inferencia de parámetros y selección de modelos en sistemas dinámicos. JR Soc. Interfaz 2008, 6, 187–202. [Referencia cruzada] [PubMed]

27. Sisson, SA; Fan, Y.; Tanaka, MM Montecarlo secuencial sin probabilidades. Proc. Nacional. Acad. Ciencia. Estados Unidos 2007, 104, 1760–1765. [Referencia cruzada] [PubMed]

28. Mejorana, P.; Molitor, J.; Plagnol, V.; Tavaré, S. Markov encadena Montecarlo sin probabilidades. Proc. Nacional. Acad. Ciencia. Estados Unidos 2003, 100, 15324–15328. [Referencia cruzada]

29. Rubilar-Torrealba, R.; Chahuán-Jiménez, K.; de la Fuente-Mella, H. Un análisis estocástico del efecto de los parámetros comerciales sobre la estabilidad de los mercados financieros utilizando un enfoque bayesiano. Matemáticas 2023, 11, 2527. [CrossRef]

30. Rofia, P.; Bucciol, A.; Hashlamoun, S. Determinantes de la esperanza de vida al nacer: un estudio longitudinal en los países de la OCDE. Int. J. Economía de la Salud. Gestionar. 2023, 23, 189–212. [Referencia cruzada]

31. Kabir, M. Determinantes de la esperanza de vida en los países en desarrollo. J. Dev. Áreas 2008, 41, 185–204. [Referencia cruzada]

32. Gompertz, B. Sobre la naturaleza de la función expresiva de la ley de la mortalidad humana y sobre un nuevo modo de determinar el valor de las contingencias de la vida. En una carta a Francis Baily, Esq. FRS, etc. Por Benjamín Gompertz, Esq. FR S. Philos. Trans. R. Soc. Londres. 1825, 115, 252–253.

33. Makeham, WM Sobre la ley de mortalidad y la construcción de tablas de anualidades. J.Inst. Actuar. 1860, 8, 301–310. [Referencia cruzada]

34. Hallén, A. Reevaluación de la adición de Makeham a la ley de Gompertz. Biogerontología 2009, 10, 517–522. [Referencia cruzada] [PubMed]

Machine Translated by Google

35. Golubev, A. ¿Cómo podría evolucionar la ley de Gompertz-Makeham? J. Theor. Biol. 2009, 258, 1–17. [Referencia cruzada]
36. Missov, TI Gamma-Gompertz esperanza de vida al nacer. Demogr. Res. 2013, 28, 259–270. [Referencia cruzada]
37. Missov, TI; Lenart, A. Gompertz – Esperanza de vida de Makeham: expresiones y aplicaciones. Teor. Popular. Biol. 2013, 90, 29–35. [Referencia cruzada] [PubMed]
38. Valores, JH; Watson, MW Estimación insesgada de la mediana de la varianza del coeficiente en un modelo de parámetros variables en el tiempo. J. Am. Estadística. Asociación. 1998, 93, 349–358. [Referencia cruzada]
39. Zhou, X.; Sun, L. Regresión de riesgos aditivos con información de censura faltante. Estadística. Pecado. 2003, 1237–1257. 40. van de Schoot, R.; Depaoli, S.; Rey, R.; Kramer, B.; Märtens, K.; Tadesse, MG; Vannucci, M.; Gelman, A.; Veen, D.; Willemsen, J.; et al. Estadística y modelización bayesiana. Nat. Rev. Métodos Prim. 2021, 1, 1. [Referencia cruzada]
41. Winklevoss, HE Pension Mathematics con ilustraciones numéricas; Prensa de la Universidad de Pensilvania: Filadelfia, PA, EE. UU., 1993.
42. Rostan, P.; Belhachemi, R.; Rostan, A. Evaluación de la sostenibilidad financiera de un sistema de pensiones con procesamiento de señales. Semental. Aplica. Economía. 2015, 33, 801–816. [Referencia cruzada]
43. Queiroz, BL; Ferreira, MLA La evolución de la participación en la fuerza laboral y la duración esperada de la jubilación en Brasil. J. Economía. Envejecimiento 2021, 18, 100304. [CrossRef]
44. Salinari, G.; De Santis, G. ¿Una o más tasas de envejecimiento? El modelo gamma-Gompertz extendido (EGG). Estadística. Métodos de aplicación. 2020, 29, 211–236. [Referencia cruzada]
45. Baeten, S.; Van Ourti, T.; Van Doorslaer, E. Crecientes desigualdades en ingresos y salud en China: ¿Quién se queda atrás? J. Economía de la Salud. 2013, 32, 1214–1229. [Referencia cruzada]
46. Carter, LR; Lee, RD Modelización y previsión de las diferencias de mortalidad por sexo en Estados Unidos. Int. J. Pronóstico. 1992, 8, 393–411. [Referencia cruzada]
47. Conde-Gutiérrez, R.; Colorado, D.; Hernández-Bautista, S. Comparación de una red neuronal artificial y un modelo de Gompertz para predecir la dinámica de muertes por COVID-19 en México. Dyn no lineal. 2021, 104, 4655–4669. [Referencia cruzada]
48. Mohamed, HS; Ali, MM; Yousof, HM El modelo de Lindley Gompertz para estimar las tasas de supervivencia: propiedades y Aplicaciones en Seguros. Ana. Ciencia de datos. 2023, 10, 1199–1216. [Referencia cruzada]

Descargo de responsabilidad/Nota del editor: Las declaraciones, opiniones y datos contenidos en todas las publicaciones son únicamente de los autores y contribuyentes individuales y no de MDPI ni de los editores. MDPI y/o los editores renuncian a toda responsabilidad por cualquier daño a personas o propiedad que resulte de cualquier idea, método, instrucción o producto mencionado en el contenido.

Machine Translated by Google

cálculo

MDPI

Artículo

Un análisis dinámico de un robot poliarticulado

Sorín Dumitru, Cristian Copilusi, Nicolae Dumitru * y Ionut Geonea

Facultad de Mecánica, Universidad de Craiova, 200512 Craiova, Rumania; sorin.dumitru@edu.ucv.ro (SD); cristian.copilusi@edu.ucv.ro (CC); ionut.geonea@edu.ucv.ro (IG)
* Correspondencia: nicolae.dumitru@edu.ucv.ro

Resumen: Este artículo estudia la cinemática y dinámica de un robot poliarticulado. El robot se puede utilizar en lugares de difícil acceso y entornos especiales. El robot poliarticulado incluye dos partes principales: una unidad flexible y una unidad de actuación. La unidad flexible consta de tres módulos especialmente diseñados para funcionar en un espacio de trabajo 3D complejo. Cada módulo tiene vértebras flexibles y discos rígidos. La simulación del robot poliarticulado se logra con el software MSC Adams 2012 y ANSYS R14.5. Así, pretendemos determinar si las leyes de variación dependen del tiempo de los parámetros cinemáticos de cada parte en un movimiento específico, considerando que cada parte tiene que actuar como un cuerpo rígido o como un cuerpo deformable. Utilizando el método de elementos finitos, se calculan las tensiones y deformaciones para las posiciones normal y crítica del robot poliarticulado. Para validar los modelos de simulación diseñados en esta investigación, se desarrolla un análisis experimental del robot poliarticulado propuesto . La unidad de comando y control fue equipada con sensores de movimiento que permiten identificar la posición de cada módulo de la unidad flexible.

Palabras clave: dinámica; simulación; robot poliarticulado

1. Introducción

Hoy en día, los robots poliarticulados se utilizan ampliamente en ámbitos como el industrial, médico , militar y aeroespacial, debido a su diseño específico para realizar tareas en un espacio de trabajo complejo.

Su diseño conceptual está inspirado en trompas de elefantes, serpientes e incluso tentáculos de pulpo como los de [1–6]. Estos se caracterizan por una gran cantidad de DOF debido a su estructura altamente articulada. Por lo tanto, al considerar los dominios fundamentales mencionados anteriormente, estos robots son muy adecuados para operaciones de exploración en entornos altamente restringidos.

El gran DOF está determinado por el uso de una serie de enlaces conectados en serie y juntas accionadas, como [7,8], al diseñar dichos robots.

Una tarea de diseño importante, específica de los utilizados en el ámbito médico, es tener un tamaño de estructura miniaturizado para su uso en endoscopia [9] o colecistectomía [10]. Por lo tanto, esta tarea de diseño generará nuevos problemas a resolver, como rigidez, mayor destreza y guía de control precisa [11].

A pesar de las tareas impuestas, estos robots deben pasar por varias etapas de diseño que implican complejos análisis cinemáticos y dinámicos de la estructura poliarticulada. Por otro lado, la unidad de mando y control debe tener una arquitectura de diseño específica para poder funcionar perfectamente con una estructura poliarticulada como las de [12,13].

Al considerar conceptos de diseño similares a los de [14-17], se puede observar un objetivo de diseño importante y común impuesto para la estructura del robot poliarticulado. Este objetivo de diseño es obtener una trayectoria espacial en forma de S desarrollada por la estructura poliarticulada en un sistema de coordenadas cartesiano.

Otro argumento de esta tarea de diseño es tener una trayectoria espacial parametrizada en forma de S. Esto implicará análisis dinámicos complejos, como los realizados en [18-20].

check for updates

Cita: Dumitru, S.; Copilusi, C.; Dumitru, N.; Geonea, I. Un análisis dinámico de un robot poliarticulado. Computación 2024, 12, 156. https:// doi.org/ 10.3390/computation12080156

Editor académico: Demos T. Tsahalis

Recibido: 12 de junio de 2024
Revisado: 18 de julio de 2024
Aceptado: 26 de julio de 2024
Publicado: 2 de agosto de 2024

Copyright: © 2024 por los autores. Licenciatario MDPI, Basilea, Suiza. Este artículo es un artículo de acceso abierto. distribuido bajo los términos y condiciones de los Creative Commons Licencia de atribución (CC BY) (https:// creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

Machine Translated by Google

Además, esto se puede lograr diseñando un concepto de robot continuo caracterizado por combinar cuerpos rígidos con cuerpos flexibles como [21-23].

Teniendo a la vista los presentados en [20-22], nuestro objetivo de investigación es diseñar un robot con una estructura poliarticulada que pueda desarrollar una trayectoria espacial parametrizada en forma de S mediante el uso de una combinación de cuerpos rígidos con otros flexibles.

Por tanto, nuestra contribución a este campo de investigación es desarrollar, diseñar y probar un prototipo capaz de cumplir los objetivos deseados. Otra peculiaridad de la investigación es lograr los objetivos propuestos mediante el uso de técnicas y software de diseño modernos, como MSC Adams y ANSYS. Así, el núcleo de la investigación se basa en el método Craig-Bampton, presentado en [23], para elaborar los modelos matemáticos utilizados en análisis cinemáticos y dinámicos.

Otra aportación original es la arquitectura, aunque se pueden encontrar robots poliarticulados similares a los de [24-26].

Para lograr los objetivos mencionados, esta investigación se organiza de la siguiente manera. A partir de nuestra propia contribución original, elaboramos un principio de diseño de robot caracterizado por nueve grados de libertad, que combina cuerpos rígidos con cuerpos flexibles. Con base en este principio, se diseñarán y probarán experimentalmente dos unidades flexibles diferentes, una cilíndrica y otra troncónica. Esto se presenta en la segunda parte de la investigación, junto con el principio de funcionamiento.

La novedad aportada por esta investigación destaca un elaborado prototipo caracterizado por la simplicidad constructiva de la unidad flexible, el diseño de una unidad flexible en forma modular que se puede combinar en cualquier momento (bajando o aumentando el DoF), y una nueva forma de la unidad flexible, concretamente una forma troncoónica de ésta, que contribuirá a la mejora y control de una rigidez variable. Al tener a la vista los modelos virtuales procesados, se mencionarán varios parámetros para la configuración de simulaciones virtuales, que son valiosos para otras investigaciones futuras.

Como se mencionó anteriormente, el núcleo de la investigación se centra en un análisis dinámico de la unidad poliarticulada propuesta, y el enfoque consiste en elaborar un modelo matemático basado en el método Craig-Bampton de [23], presentado en la tercera parte de esta investigación. Este modelo matemático representa la base para simulaciones virtuales del robot poliarticulado y procesamiento numérico en condiciones dinámicas con la ayuda del software MSC Adams y ANSYS.

Para validar el concepto poliarticulado elaborado se han realizado varias simulaciones virtuales en diferentes entornos. Uno se realizará en MSC Adams, donde se importó la unidad poliarticulada y se definió adecuadamente la combinación entre cuerpos flexibles y rígidos. Esto se presenta en la cuarta parte de la investigación, donde se obtuvieron resultados significativos al considerar restricciones impuestas similares a la realidad.

Se creó otra interfaz en el entorno ANSYS y se realizarán varias simulaciones virtuales en condiciones dinámicas para estudiar el contacto entre los componentes unitarios del robot poliarticulado. Este caso será presentado en la quinta parte de la investigación, donde se prestará más atención a la definición de contacto durante simulaciones virtuales para lograr un buen comportamiento de todo el sistema robótico y validar el concepto propuesto.

A partir de los importantes resultados que se habrán obtenido, la última parte de la investigación presentará el prototipo y una serie de pruebas experimentales demostrarán la eficacia de los análisis dinámicos realizados con la ayuda del método Craig-Bampton, combinado con técnicas modernas.

2. Creación de prototipos virtuales del robot poliarticulado

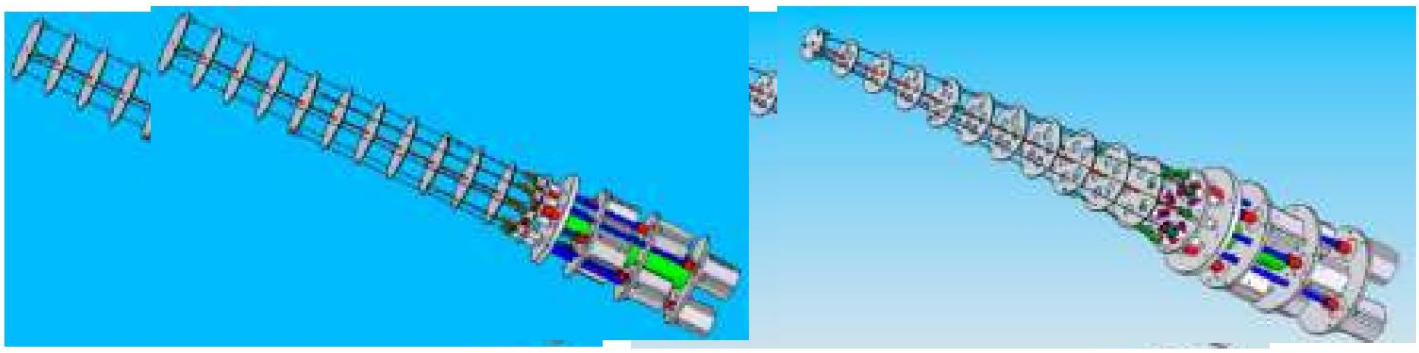
Se diseñó un sistema robótico poliarticulado que consta de dos unidades principales: una unidad flexible y una unidad de actuación.

La estructura de la unidad flexible tiene tres módulos y cada módulo contiene tres vértebras flexibles y discos rígidos. Estos módulos están conectados a través de un elemento central flexible. Así, toda la unidad flexible tiene nueve vértebras flexibles que se accionan a través de nueve

Machine Translated by Google

motores eléctricos. Estos motores eléctricos representan la unidad de accionamiento y el movimiento de traslación se garantiza mediante transmisiones por tornillo y tuerca.

Se diseñaron dos tipos de unidades flexibles, una cilíndrica y otra troncoónica. Esta última, es decir, la forma troncoónica, tiene una gran ventaja, que consiste en un control fácil y preciso de la rigidez de la unidad flexible en los tres módulos. El concepto tronconico ff de la unidad flexible asegura una rigidez variable a lo largo de su propia longitud, y esto asegurará una mayor flexibilidad en el módulo distal, según la Figura 1.



(a) (b)

Figura 1. Tipos de unidades flexibles propuestos a través de esta investigación: (a) unidad flexible con arquitectura cilíndrica , y (b) unidad flexible con forma troncal.

La forma cilíndrica de la unidad flexible implica facilidades tecnológicas, por lo que los procesos de fabricación son mucho más sencillos que en el caso de la forma troncoónica, y también se vio que esto se puede hacer con bajos costos.

El espacio de trabajo del robot estuvo definido por los límites de movilidad de la unidad flexible, y esta se diseñó de forma modular para tener un control simplificado de la configuración del robot y su espacio de trabajo evaluado. La forma deformada de la unidad flexible parece ser una forma de serpiente y, por lo tanto, el término "robot con forma de serpiente" puede asignarse a todo el sistema diseñado.

La estructura mecánica del robot está diseñada para que se puedan ajustar los desplazamientos axiales, lo que garantiza la precisión cinemática del robot. En particular, la unidad flexible fue diseñada para dos tipos: uno con estructura cilíndrica y otro con estructura cónica. Las piezas mecánicas del robot se construyeron en los laboratorios de la Facultad de Mecánica y la unidad de mando y control se diseñó en la Facultad de Automática, Computación y Electrónica de la Universidad de Craiova [21].

Así, el robot poliarticulado fue diseñado de acuerdo al modelo 3D presentado en la Figura 2. La Figura 3 muestra una vista explosionada con una adecuada identificación de los componentes del modelo 3D del sistema robótico poliarticulado.

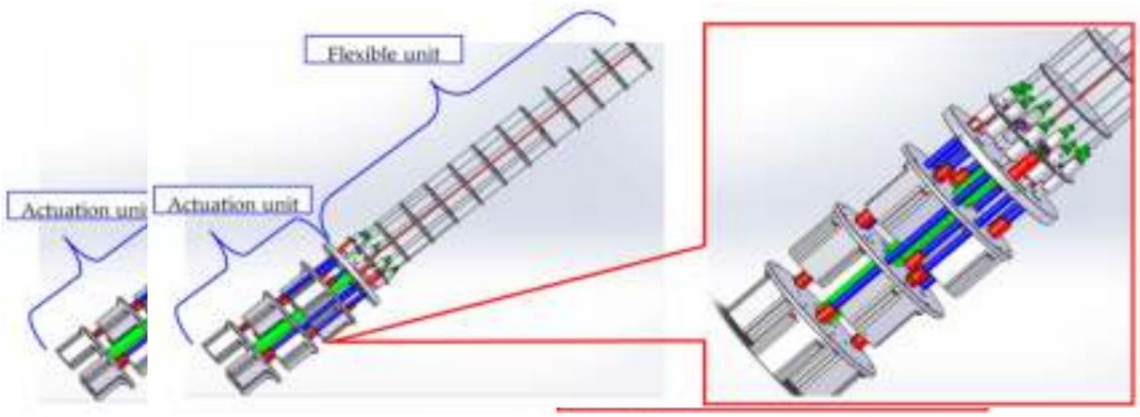


Figura 2. Modelo virtual del robot poliarticulado de forma parametrizada.

Machine Translated by Google

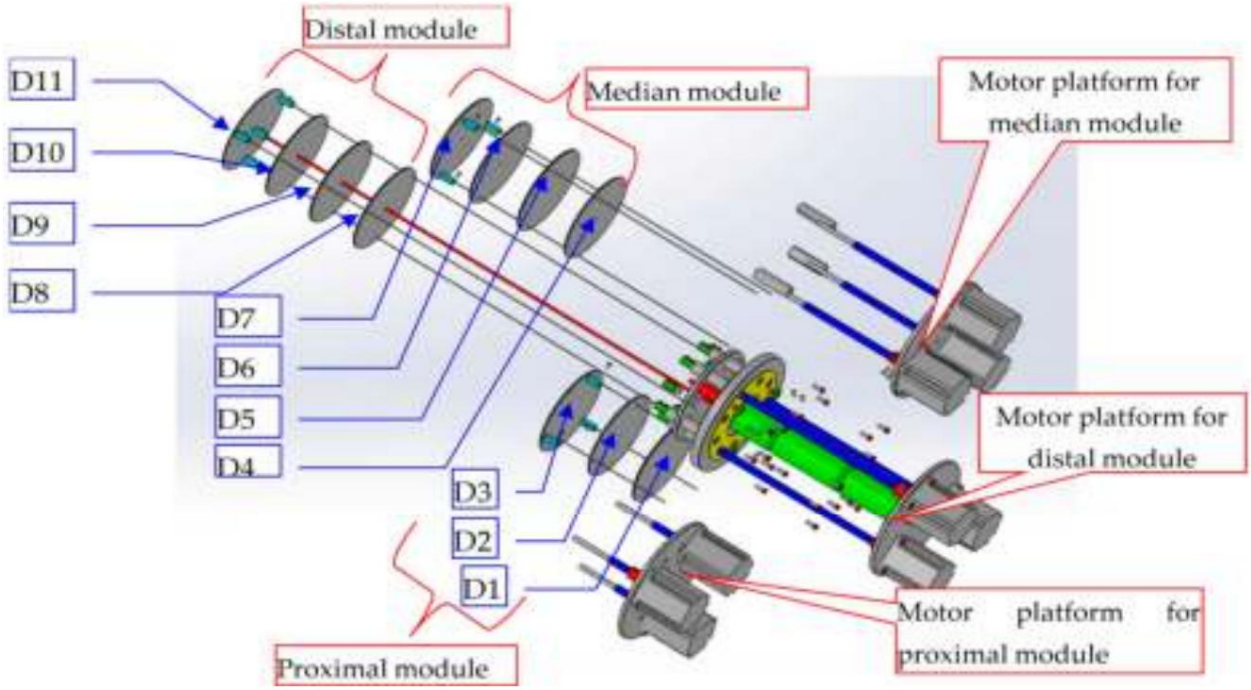
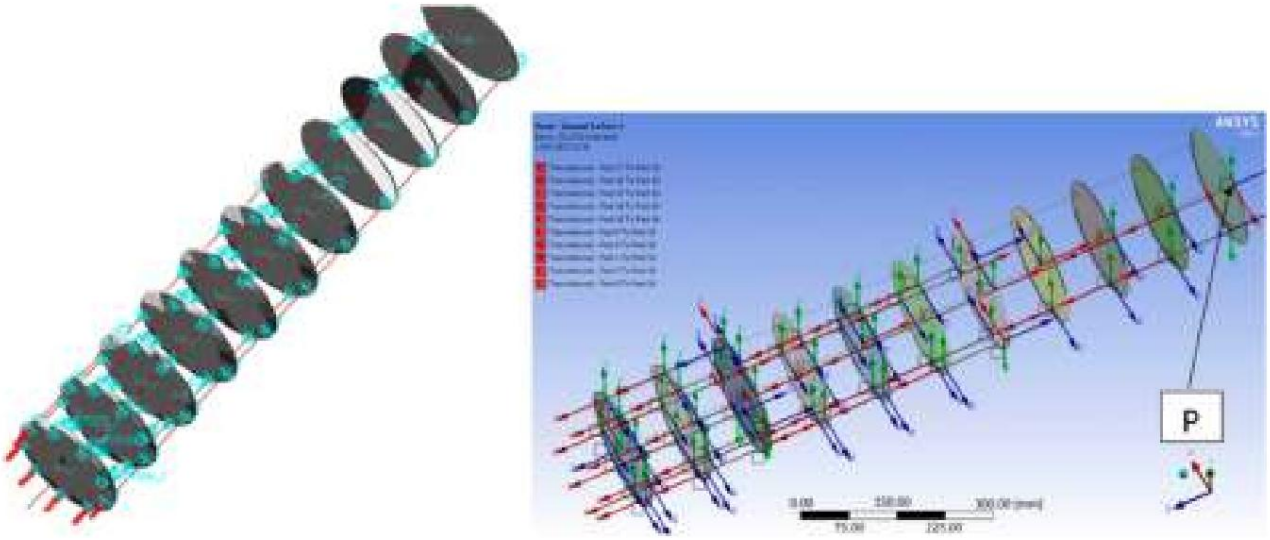


Figura 3. Un modelo virtual del robot poliarticulado: vista ampliada.

El principio de funcionamiento del robot depende del control de actuación del motor, que en este caso está representado por los nueve motores paso a paso. La arquitectura del robot consta de tres módulos (proximal, mediano y distal), y cada módulo es accionado por tres motores paso a paso para desarrollar movimientos combinados en un espacio de trabajo 3D. Los motores paso a paso están conectados directamente a transmisiones de tornillo de potencia, que tirarán o soltarán los cables de actuación. Por lo tanto, las transmisiones de tornillo de potencia transformarán el movimiento de rotación del eje del motor paso a paso en un movimiento de traslación impuesto sobre el componente de tuerca conectado a un cable de accionamiento. Así, el movimiento se basa en atornillar y desenroscar las transmisiones de potencia, lo que determinará el acortamiento o prolongación del movimiento continuo del robot. De esta forma, la curvatura del tentáculo irá cambiando con la variación de los cables de actuación.

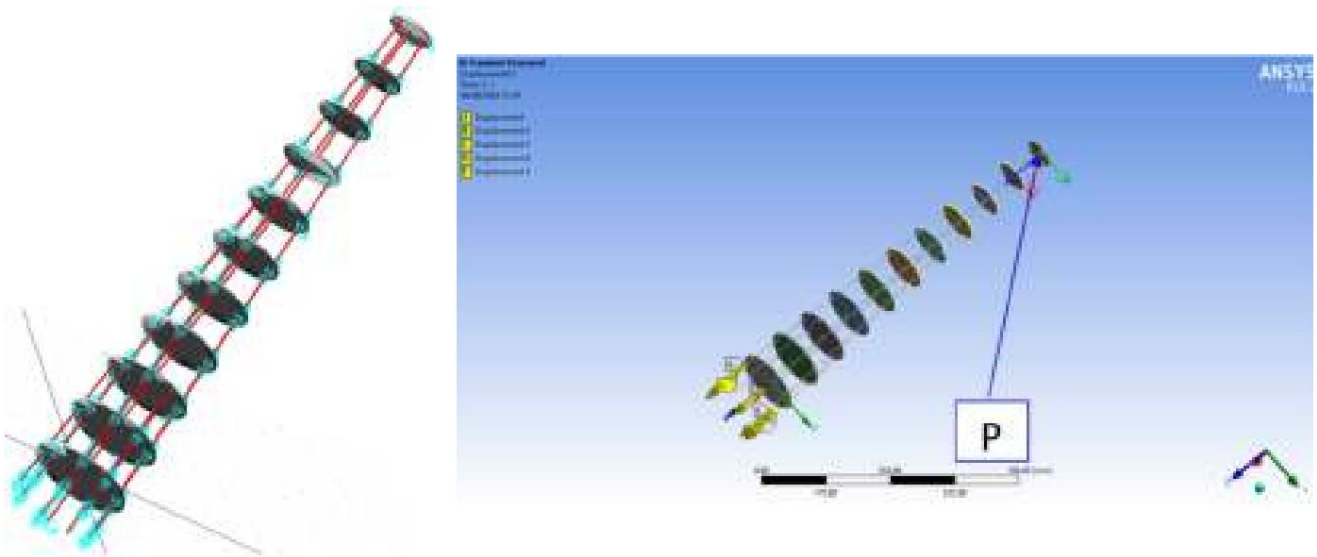
La Figura 3 muestra la columna vertebral del tentáculo, el componente central marcado en rojo, que representa una varilla elástica fabricada en acero, que sostiene toda la estructura y permite la secuencia de flexión. Por lo tanto, el principio de funcionamiento depende de qué cable se acorta o se extiende, y el tentáculo se dobla en diferentes planos. Cada cable contribuirá a realizar un movimiento con diferentes ángulos, dependiendo del marco de coordenadas inicial adjunto al segmento del manipulador, permitiendo por ejemplo un movimiento 3D. Así, en la Figura 1 se muestran ambos modelos de unidades flexibles, y se puede observar que utilizan el mismo número de componentes, estando la única diferencia dada por la forma de los discos. Este fue diseñado de forma parametrizada, considerando la definición de las condiciones precisas del contorno. El modelo obtenido respeta las condiciones cinemáticas y también fue diseñado en dos variantes, compatibles con el software MSC Adams 2012 y ANSYS R 14.5. Estos se muestran en las Figuras 4 y 5.

Machine Translated by Google



(a) (b)

Figura 4. Modelos cinemáticos de robots cilíndricos poliarticulados utilizando (a) MSC Adams y (b) software ANSYS.



(a) (b)

Figura 5. Modelos cinemáticos de robots tronconicos poliarticulados utilizando (a) MSC Adams y (b) software ANSYS.

3. Modelos matemáticos

En el caso del análisis del robot del software MSC Adams, el modelo matemático es basado en el método de Craig-Bampton. El principio del método se presenta en [23] y asume las siguientes consideraciones teóricas: al transformar un cuerpo rígido en un flexible, un procedimiento se caracteriza por tener en cuenta sólo la pequeña deformación lineal del organismo propuesto, dependiendo de un sistema de coordenadas de referencia local; la propuesta El cuerpo rígido se mallará en elementos finitos. De esta manera, un número finito de grados de libertad ser identificado.

Los desplazamientos nodales se pueden expresar como una combinación lineal entre una pequeña número de vectores propios, denominados formas modales y asignados a un parámetro Ø´ . por un cuerpo deformable “i”, estos están representados por

øø

Machine Translated by Google

$$tu = \sum_{i=1}^{METRO} j \cdot qj \quad (1)$$

$$= \sum .$$

donde u—desplazamientos nodales; M: número de formas modales; qj: coordenadas modales.

La ecuación (1) también representa la conexión entre un amplio conjunto de coordenadas físicas y un pequeño conjunto de coordenadas modales, a saber, qj .

El método Craig-Bampton permite optimizar la base modal obtenida considerando dos conjuntos de grados de libertad, es decir, grados de libertad de contorno uB, que se utilizan para aplicaciones de carga o para conectar un cuerpo flexible a uno rígido; grados de libertad internos ul , es decir, los grados de libertad internos del elemento flexible, que se pueden condensar utilizando técnicas de superelementos.

Para el análisis cinemático de un cuerpo flexible (elemento), dos sistemas de coordenadas de referencia Se considerarán tems los siguientes: T a un $'_i$ (xi , yi , zi): el sistema de coordenadas de referencia adjunto cuerpo flexible; T0 (X,Y,Z): el sistema de coordenadas de referencia global.

Algunos nodos de interés se pueden identificar entrelazando el cuerpo flexible en elementos finitos. Se pueden colocar marcadores con sistemas de coordenadas de referencia locales adecuados en los nodos de interés identificados.

Por lo tanto, se puede asignar un marcador "Pi" a un cuerpo flexible y su posición se puede definir en un sistema de referencia de coordenadas global de la siguiente manera:

$$\vec{r}_{pi} = \vec{ri} + pi\,\vec{s} \quad \vec{upi} \quad (2)$$

donde $\vec{r}$ i: el vector de posición de la T $'_i$ origen del sistema de coordenadas local, dependiendo del T0 sistema de referencia global; $\vec{S}$ pi: vector de posición del marcador Pi (posición no deformada), dependiendo del sistema de coordenadas local T ; $\vec{U}$pi: el vector de posición de P $'$yo—marcador, dependiendo del sistema de referencia TPi, que está centrado en el marcador Pi.

En la Figura 6 se muestra un esquema de la posición del sistema de coordenadas colocado en un modelo simplificado. Las matrices de transformación de coordenadas se identificarán teniendo en cuenta la Ecuación (2), y se obtendrán los siguientes resultados:

$$rPi = ri + AOi \cdot S'Pi + AOi \cdot U'Pi \quad (3)$$

$$rPi = ri + AOi \cdot (S'Pi + U'Pi) \quad (4)$$

donde representa [x, y, z] ^{t} posición de origen de la T dependiendo del sistema de $'_i$ sistema de referencia local, referencia global TO .

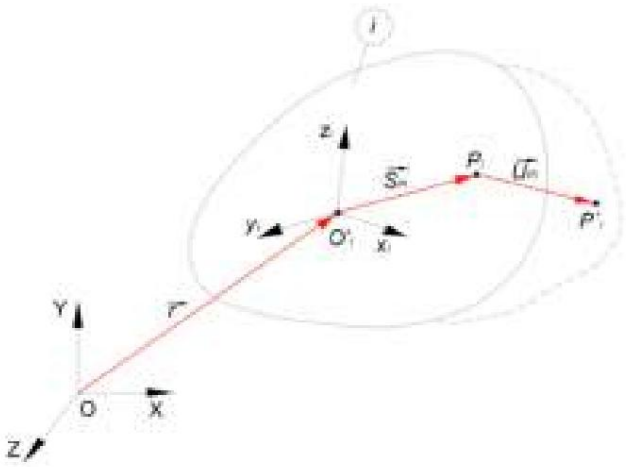


Figura 6. Ubicación de sistemas de coordenadas en un cuerpo flexible para el método Craig-Bampton.

Machine Translated by Google

Por tanto, el vector del sistema de coordenadas generalizado del cuerpo flexible en una situación no deformada es

$$qri = [xi , yi , zi , \psi i , \theta i , \quad i]^{t} \tag{5}$$

donde xi , yi , zi (las coordenadas del sistema de referencia móvil original, concretamente T zi), fijas, $'_{yo}$ (xi , yi , con un cuerpo deformable: i; ψi , θi y i—ángulos de Euler que describen la orientación espacial del i—cuerpo; A0i: matriz de la transformación de coordenadas creada a partir de los cosenos directores del sistema de referencia local T , dependiendo$_{i,}$de la referencia global T0 sistema; U′Pi: vector de deformación expresado en T $'_{i}$ sistema de referencia local.

El vector de desplazamiento de deformación se puede expresar como una superposición modal en forma matricial como

$$UPi = \varphi Pi \cdot qi \tag{6}$$

donde φPi—es parte de la matriz modal que corresponde a Pi—DOF traslacional del marcador. Esta matriz tiene una dimensión de 3xM , donde M representa el número de formas modales; qi: vector de coordenadas generalizadas modales.

Utilizando las ecuaciones anteriores, el vector de coordenadas generalizado se puede definir para un cuerpo flexible de la siguiente manera:

$$\xi = [xi , yi , zi , \psi i , \theta i , \quad i , qi]^{t} ; yo = 1 \ldots METRO \tag{7}$$

La ecuación (7) muestra las coordenadas modales qi (i = 1... M), que caracterizan las coordenadas generalizadas del elemento flexible.

La deformación angular de un elemento flexible se puede obtener mediante una superposición modal:

$$\theta Pi = \Phi \quad Pi \cdot qi \tag{8}$$

donde Φ es parte de la matriz modal que corresponde a los grados de libertad de rotación pi para el nodo Pi. Tiene una dimensión de 3 × M , donde M es el número de moda.

Se analiza el movimiento sólido-deformable para un marcador Ki que realiza rotaciones con ángulos pequeños, dependiendo de su sistema de referencia local.

Cada marcador se define a través de un sistema de coordenadas adecuado. En el caso de la orientación del marcador Ki , dependiendo del sistema de referencia global T0 , se proporcionó una matriz de transformación de coordenadas, concretamente A0Ki, donde

$$A0Ki = A0i \cdot AiPi \cdot APiKi \tag{9}$$

donde A0i es la matriz de transformación obtenida al cruzar del sistema de referencia local al cuerpo i , es decir, T al sistema de referencia globa$'_{l,}$T0; AiPi es la matriz de transformación que resulta del cambio de orientación debido a la deformación del nodo Pi; APiKi es la matriz de transformación constante que se definió cuando se colocó el marcador en el cuerpo flexible. Los elementos presentados representan datos de entrada para el procedimiento utilizado para transformar un cuerpo rígido en uno deformable, con la ayuda del software MSC Adams.

4. Modelado dinámico con MSC Adams

La unidad flexible fue analizada con el software MSC Adams 2012. Por lo tanto, se creó como una interfaz flexible para importar la geometría CAD de la unidad flexible en 2D y 3D en MSC Adams. Se definieron las propiedades de los materiales para los componentes correspondientes (acero para las vértebras y aluminio para los discos), y además, se asignarán sistemas de referencia locales para cada componente de la unidad flexible. Se definieron uniones cinemáticas junto con los sistemas de referencia adjuntos. Estos constan de 21 elementos cinemáticos, a saber, 10 elementos flexibles y 11 elementos rígidos representados por los discos, según la Figura 2. Los vínculos entre estos elementos cinemáticos fueron proporcionados por 75 juntas cinemáticas, a saber, 21 juntas fijas y 54 juntas traslacionales con un solo DOF. . Esta unidad fue accionada a través de 6 motores conjuntos. La figura 7 muestra la definición de la articulación motora. El movimiento está representado por los vectores MOTION_1, MOTION_2 y MOTION_3 (Figura 7). El desplazamiento Uy,

Machine Translated by Google

en la Figura 7 representa el movimiento a lo largo del eje central que se muestra en la Figura 3. La secuencia de movimiento es la siguiente: IF (tiempo—1: 0, 0, —2 × tiempo)—movimiento_1—módulo proximal; IF (tiempo—1:0, 0, —1,5 × tiempo)—movimiento_2—módulo mediano; IF (tiempo—2:—2 × tiempo, 0, 0) —movimiento_3—módulo distal.

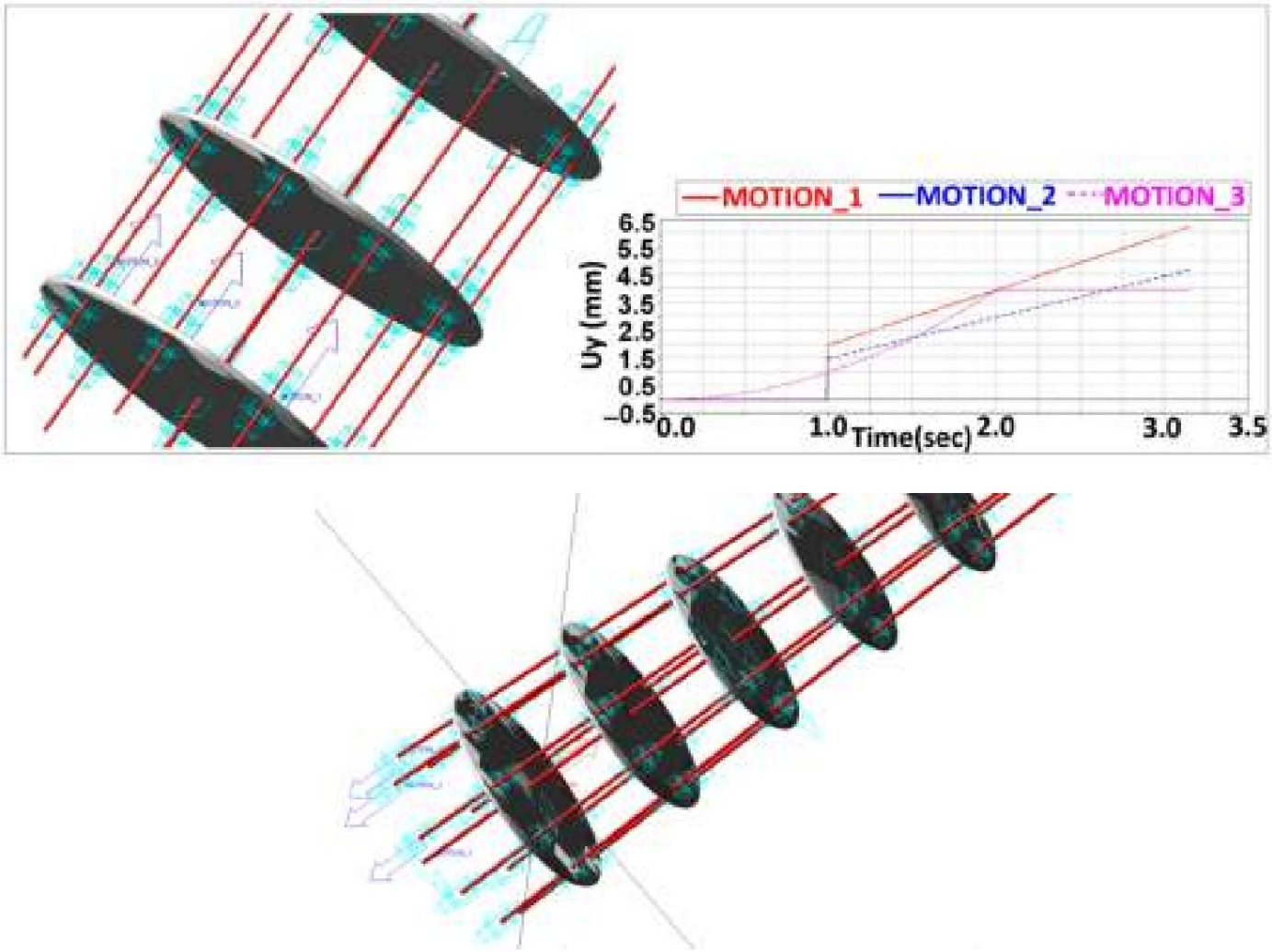


Figura 7. Configuración del desplazamiento de la junta del motor en un intervalo de tiempo de 3 s para ambas unidades flexibles analizadas.

Para ello será posible un análisis del movimiento del robot en modo cinemático o dinámico considerando la unidad flexible como un mecanismo con elementos deformables. Considerando los modelos matemáticos elaborados de Craig y Bampton [9,20], el software ADAMS 2012 permitirá realizar un análisis dinámico modal de cualquier sistema mecánico flexible superponiendo el movimiento rígido-sólido a uno sólido deformable.

Se transformaron nueve vértebras de actuación de cuerpos rígidos a cuerpos flexibles de la siguiente manera: cada cuerpo se mezcló en elementos finitos (tipo de elemento: sólido, forma de elemento: tetraédrico, orden de elementos: cuadrático y forma de borde: mixto); Se definieron las condiciones de conexión con otros elementos mediante un procedimiento que consiste en la identificación de nodos tipo maestro-esclavo.

Los elementos flexibles, denominados genéricamente vértebras elásticas, estaban entrelazados en elementos finitos tetraédricos. El análisis dinámico modal se realizó para 77 formas modale

Luego de esto, se determinaron las frecuencias naturales y los modos propios de vibración, y de esta manera, se crearon las condiciones adecuadas para aplicar el método de superposición modal (Craig-Bampton) para lograr el análisis dinámico del mecanismo.

Machine Translated by Google

f

Para resolver el sistema de ecuaciones diferenciales se utilizó el módulo de integración WSTIFF, con formulaciones SI2 y un paso integrador fijado en 0,01.

El contacto de las juntas de traslación era un conjunto de tipo sólido rígido-sólido deformable.

Durante las simulaciones virtuales, se identificaron leyes de movimiento de parámetros cinemáticos en el caso del nodo ubicado en el extremo de la vértebra central, dependiendo del sistema de coordenadas de referencia ubicado en el centro de masa del primer disco, que se consideró fijo en el espacio para el unidad de actuación.

La Figura 8 muestra algunas formas flexibles deformadas en unidades en un espacio de trabajo 3D, lo que resultó

ff

durante la actuación de la articulación del motor en diferentes modos de actuación.

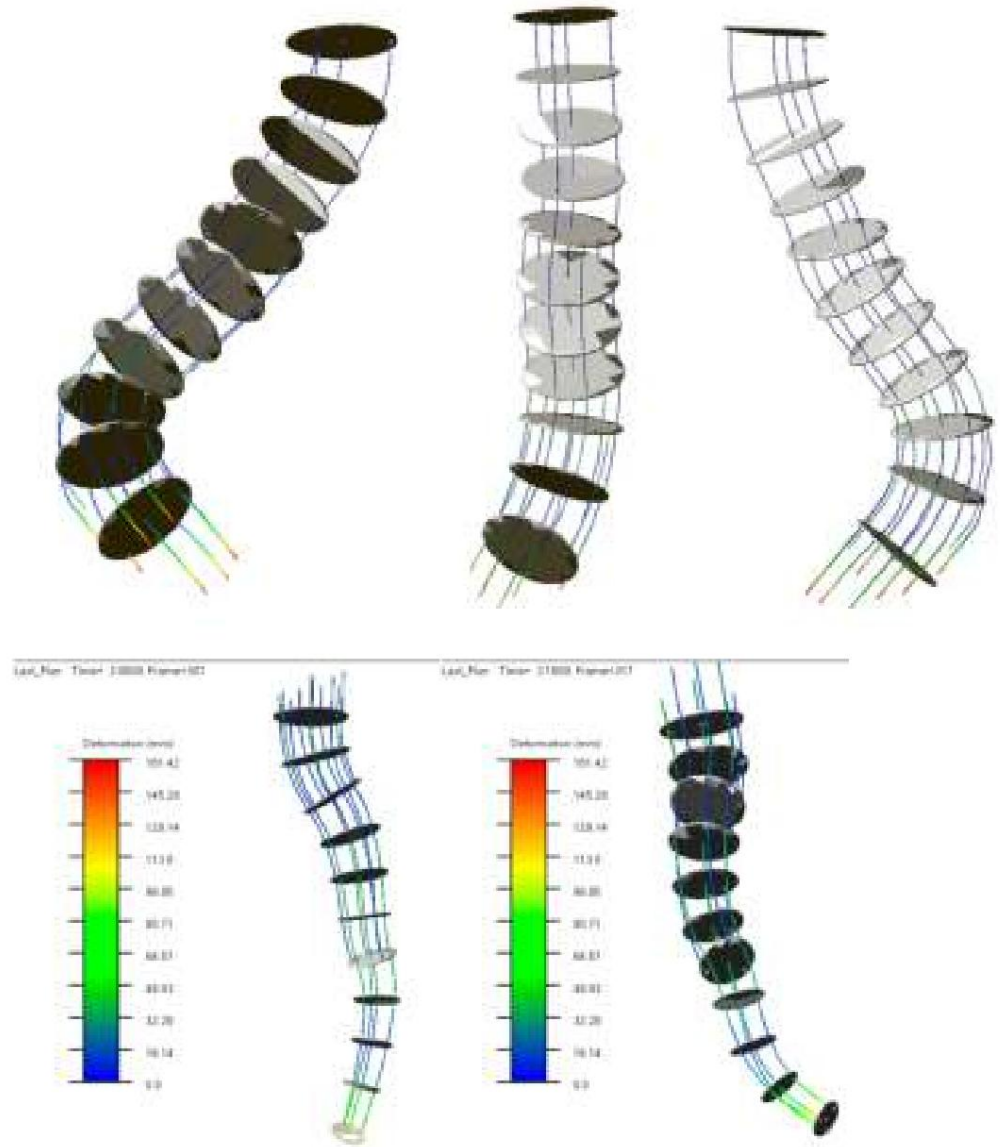


Figura 8. Formas deformadas de la unidad flexible para ambas formas analizadas procesadas bajo el entorno MSC Adams.

Los resultados obtenidos están representados por los componentes de desplazamiento del disco terminal (D11) para el módulo distal no.2 y el disco terminal (D7) para el módulo mediano no.1, según la Figura 2. Algunos nodos ubicados en el centro de masa del sistema propuesto Los discos se consideraron para la medición durante la simulación virtual del sólido deformable.

La Figura 9 representa la deformación traslacional nodal para el nodo no. 14405 colocado en el centro de masa del disco final D11 a través del módulo distal. Se puede observar que el

Machine Translated by Google

Los valores máximos de desplazamiento se registran en un plano transversal definido por los ejes x e y del sistema de referencia local.ff

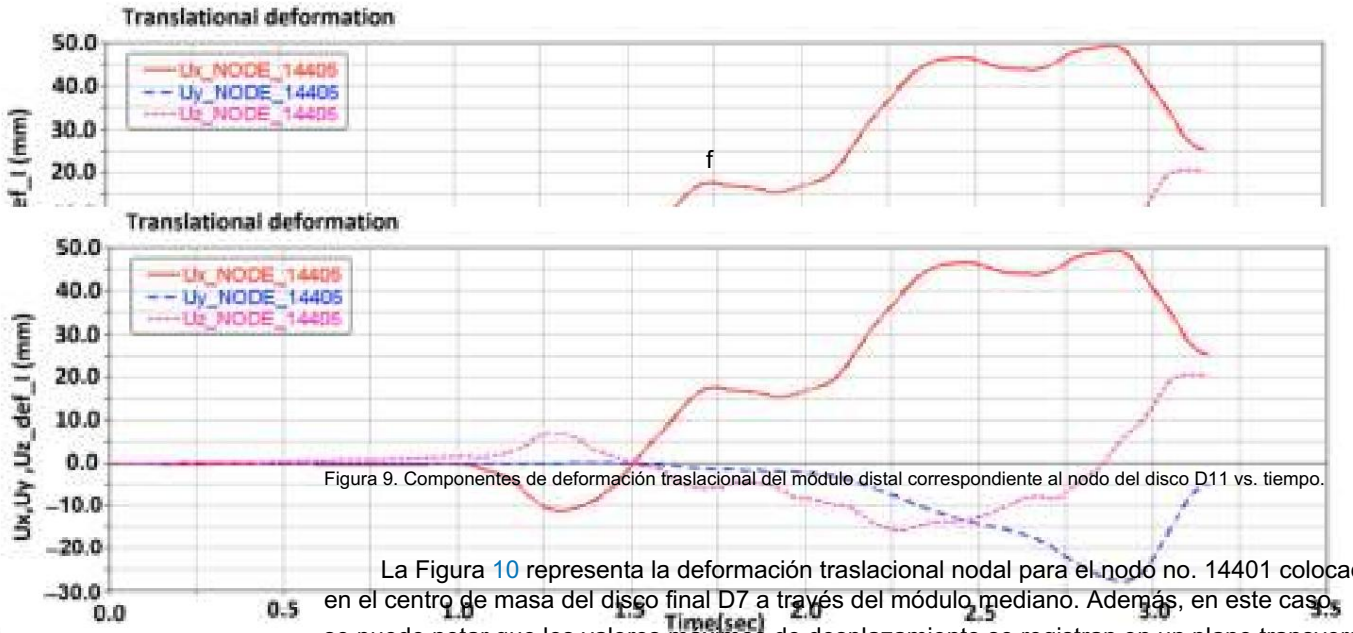


Figura 9. Componentes de deformación traslacional del módulo distal correspondiente al nodo del disco D11 vs. tiempo.

La Figura 10 representa la deformación traslacional nodal para el nodo no. 14401 colocado en el centro de masa del disco final D7 a través del módulo mediano. Además, en este caso, se puede notar que los valores máximos de desplazamiento se registran en un plano transversal de la unidad flexible, pero estos valores son menores a los reportados en la Figura 7. Esto es causado por la rigidez mediana del módulo, que es mayor que el del módulo distal.

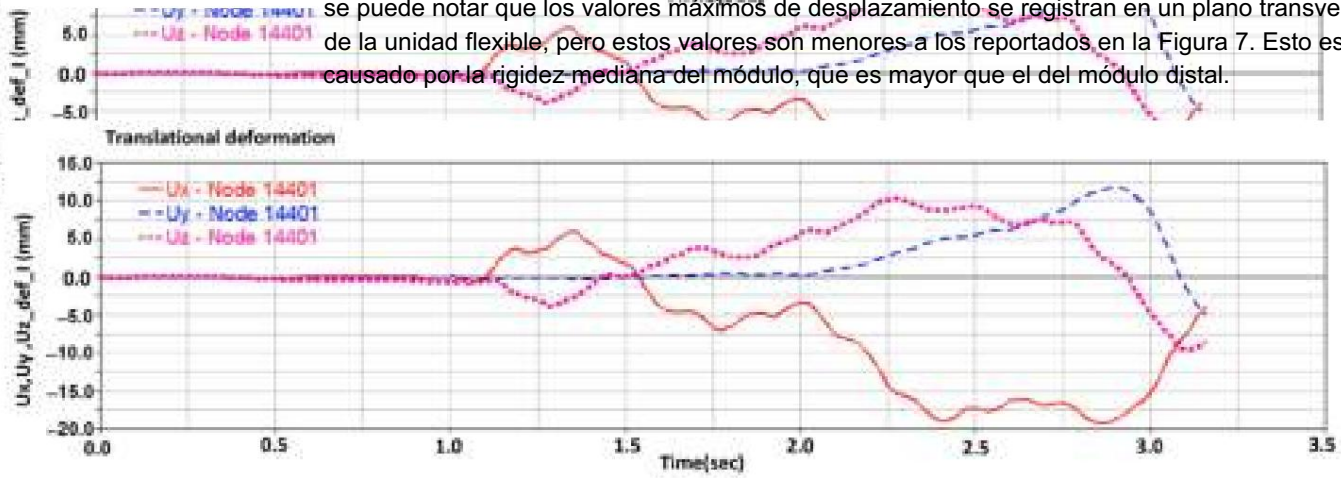


Figura 10. Componentes de deformación traslacional del módulo distal correspondiente al nodo del disco D7 vs. tiempo.

5. Modelado dinámico con ANSYS

En este caso se consideró el sistema robótico de la Figura 2 y, para ello, se realizó un análisis dinámico con el paquete ANSYS R14.5 [8]. En primer lugar se importó el modelo geométrico y el segundo paso fue mallarlo en elementos finitos, como se puede observar en la Figura 9. El tercer paso fue definir el contacto entre discos y vértebras y se establecieron las condiciones de contorno en su extremo. fin.

Los enlaces cinemáticos se consideraron flexibles y se ha dedicado mayor atención a la red de elementos finitos en las áreas de contacto donde estos fueron redimensionados, según la Figura 11. Así, este marco de investigación presenta, como ejemplo detallado, el caso de la unidad flexible caracterizada por una forma cilíndrica. En el otro caso, es decir, la forma troncal de la unidad flexible, se implementó un enfoque similar, con resultados similares.

Machine Translated by Google

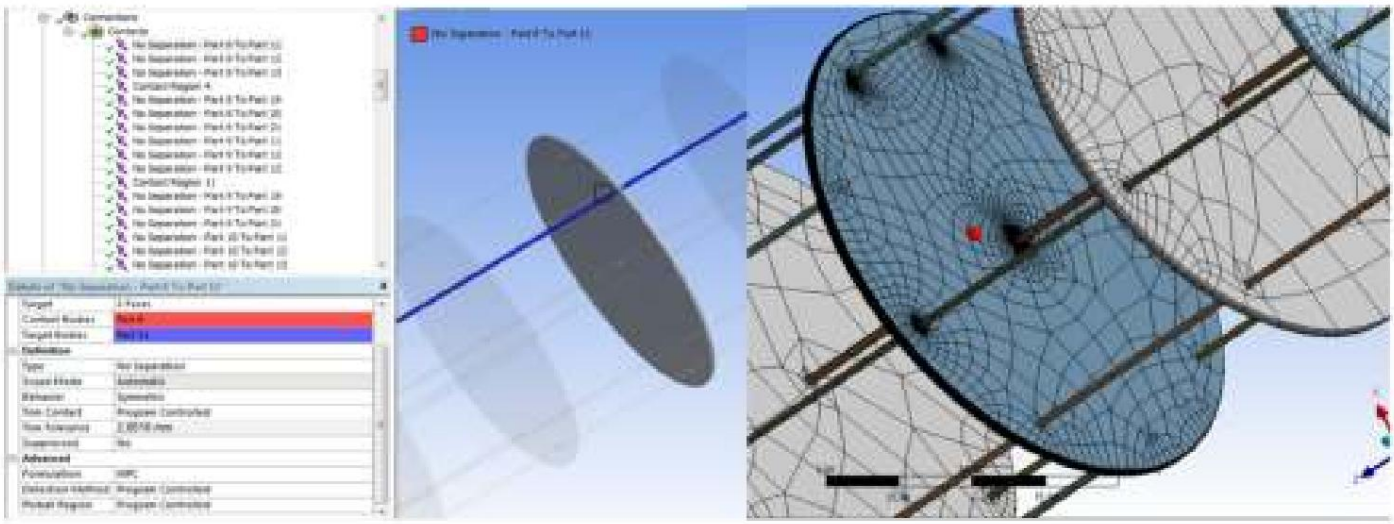


Figura 11. Definición de contacto entre vértebras elásticas y discos unitarios flexibles.

Respecto a la configuración inicial del análisis, se definieron los modelos de contacto. parámetros, el tipo de solucionador y el tiempo para la configuración de la secuencia del procesamiento virtual adecuado. Así, para el tipo de solucionador y la configuración del tiempo, definimos los siguientes parámetros: Número de pasos: 3; Paso de tiempo inicial: 0,1 s; Paso de tiempo mínimo: 0,001; Paso de tiempo máximo: 0,002; Tipo de solucionador: Directo; Volcado numérico: 0,1. En el caso del modelado de contactos, hay Se definieron parámetros de contacto en el caso del modelado de juntas específicas, respectivamente, el nueve vértebras y discos actuadores de la siguiente manera: Tipo de contacto: sin separación; Comportamiento: Simétrico; Formulación: MPC; Método de detección: Nodal-normal al objetivo. el contacto entre los discos y el elemento flexible central se realizó de la siguiente manera: Tipo: Acotado; Comportamiento: Simétrico; Formulación: Penal Puro; Método de detección: Nodal-Normal a Objetivo. Según la Figura 2, el disco D1 estaba fijo en el espacio.

En el cuarto paso se definieron los parámetros del motor, como se puede observar en Figura 12.

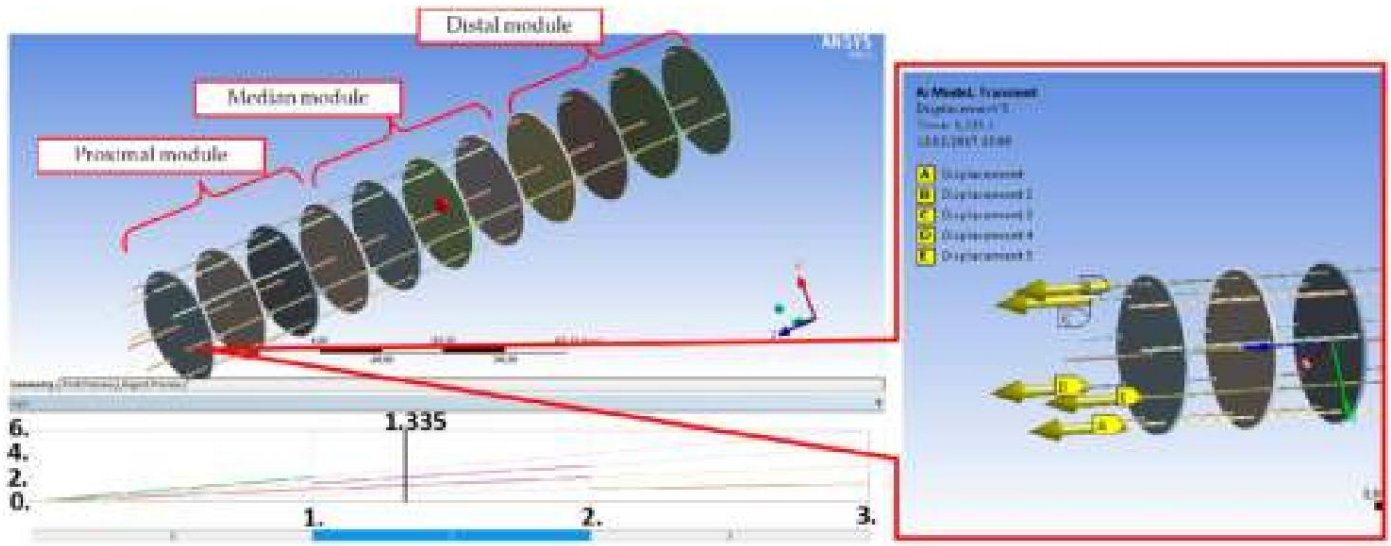


Figura 12. Definición de los elementos motores unitarios flexibles en el caso de la forma cilíndrica.

Se realizó una configuración de simulación para el modo de actuación durante la secuencia de tiempo. para todos los módulos de unidades flexibles según la Figura 12, con movimientos propios: módulo mediano, uz1 = t (t ≤ 2); módulo distal (final) uz2 = 2t (t ≤ 1); módulo proximal (base) uz3 = 0,5t ≤ ≤ ≤ ≤ ≤

Machine Translated by Google

(1≤t≤2) ; módulo distal (final) uz4 = 1,5t (1 ≤ t ≤ 2); módulo distal (final) uz5 = 0,5t (2 ≤ t ≤ 3).

Después de procesar todos los datos de entrada, se prestó mayor atención al movimiento de los componentes del sistema robótico, según dos sistemas de referencia, es decir, un sistema de coordenadas global y uno local ubicado en el centro del disco base. Así, se identificaron las leyes de variación en el movimiento de los parámetros cinemáticos, dependiendo del tiempo de los marcadores elegidos, es decir, los colocados en los centros de los discos de referencia para los módulos proximal, medial y distal. El movimiento desarrollado por estos marcadores se analizó después de tres componentes del sistema de coordenadas adecuado.

Los discos de referencia son los accionados directamente por las vértebras motoras (discos finales de cada módulo). Así, se obtuvieron varios resultados, que se muestran en los diagramas de las Figuras 13 a 15, y representan los componentes de desplazamiento en los ejes X y Z para el marcador colocado en el sistema de coordenadas local adjunto al disco final del módulo proximal.

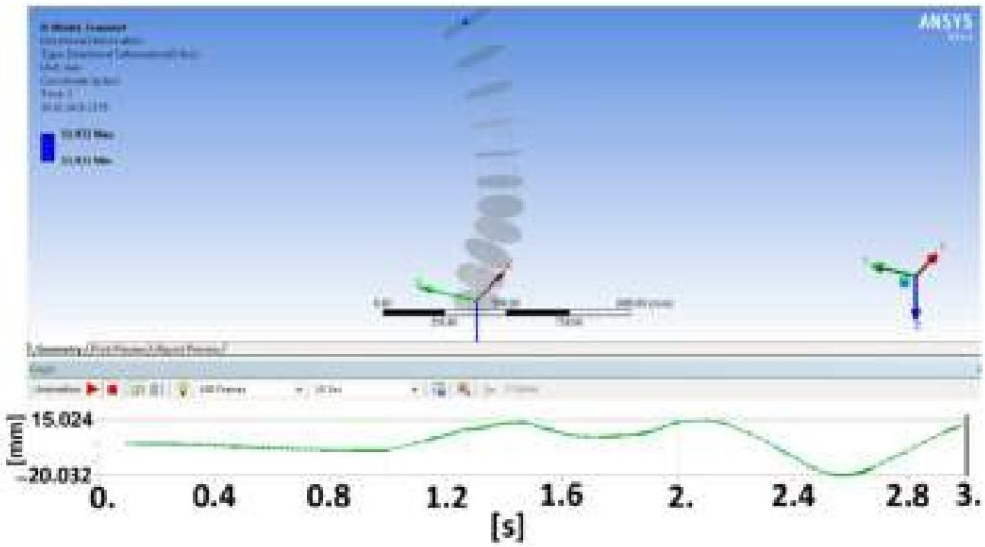


Figura 13. Variación del componente de desplazamiento en el eje X para el disco final del módulo distal en un sistema de coordenadas local versus tiempo.

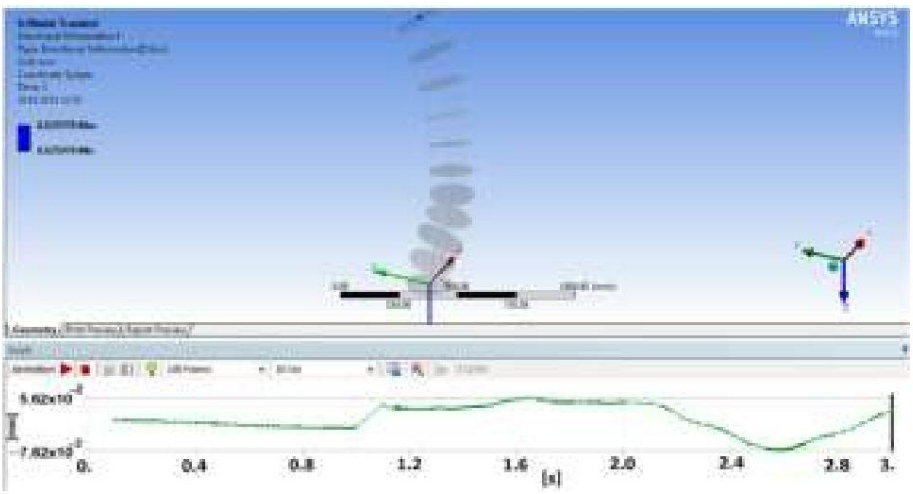


Figura 14. Variación del componente de desplazamiento en el eje Z para el disco final del módulo distal en un sistema de coordenadas local versus tiempo.

Machine Translated by Google

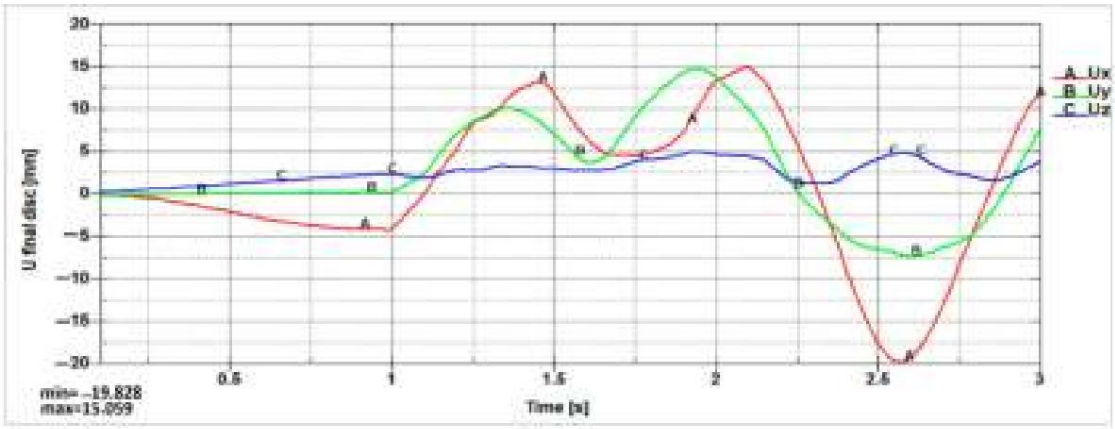


Figura 15. Variación del desplazamiento elástico del marcador de disco final desde el módulo proximal frente al tiempo.

Cada módulo se acciona sucesivamente o simultáneamente con los otros dos, según a la configuración deseada del sistema robótico descrito en el espacio de trabajo propuesto.

Los ejes que definen el plano transversal de la unidad flexible analizada son X e Y. Así, la Figura 13 muestra una forma deformada de la unidad flexible analizada, en función del tiempo correspondiente a la componente del eje X para el centro de masa del disco final D11 del distal. módulo. Esta variación se calculó según un sistema de referencia local colocado en el disco base D7. Se registró hasta alcanzar un valor de 15.059 mm. De manera similar, calculamos el desplazamiento para la variación del eje Z, dependiendo del tiempo para el disco final del centro de masa D11 del módulo distal. Esto se muestra en la Figura 14, y se obtuvo un valor máximo de 0,056298 mm.

La Figura 15 muestra un desplazamiento total que va desde un valor mínimo de −19,828 mm hasta un máximo de 15,059 mm. De este modo, se obtuvo una amplitud de desplazamiento total de aproximadamente 35 mm.

La Figura 16 describe la forma deformada de la unidad flexible y la variación del desplazamiento en el eje Y.

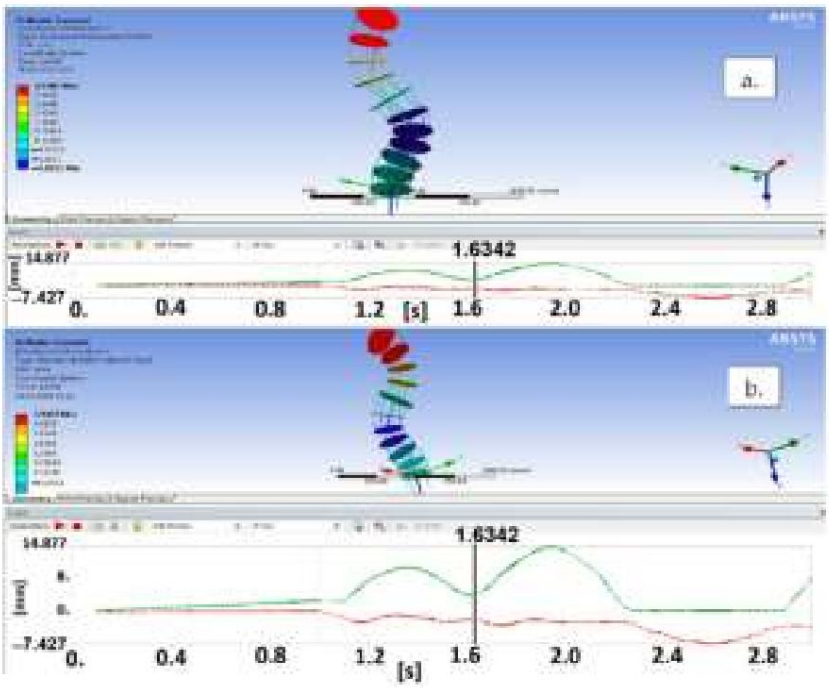


Figura 16. La variación de la forma deformada de la unidad flexible a lo largo del eje Y del sistema de coordenadas local a lo largo del tiempo ((a): vista isométrica; (b): vista rotada en el plano X–Y).

Machine Translated by Google

Con base en este resultado, se puede observar que los desplazamientos transversales son compatibles con la forma deformada de la unidad flexible. Además, la forma deformada se puede evaluar considerando las vértebras elásticas de la estructura unitaria flexible, concretamente la Figura 17, donde se muestra la variación de desplazamiento resultante para dos vértebras, concretamente una motora y una vértebra impulsada.

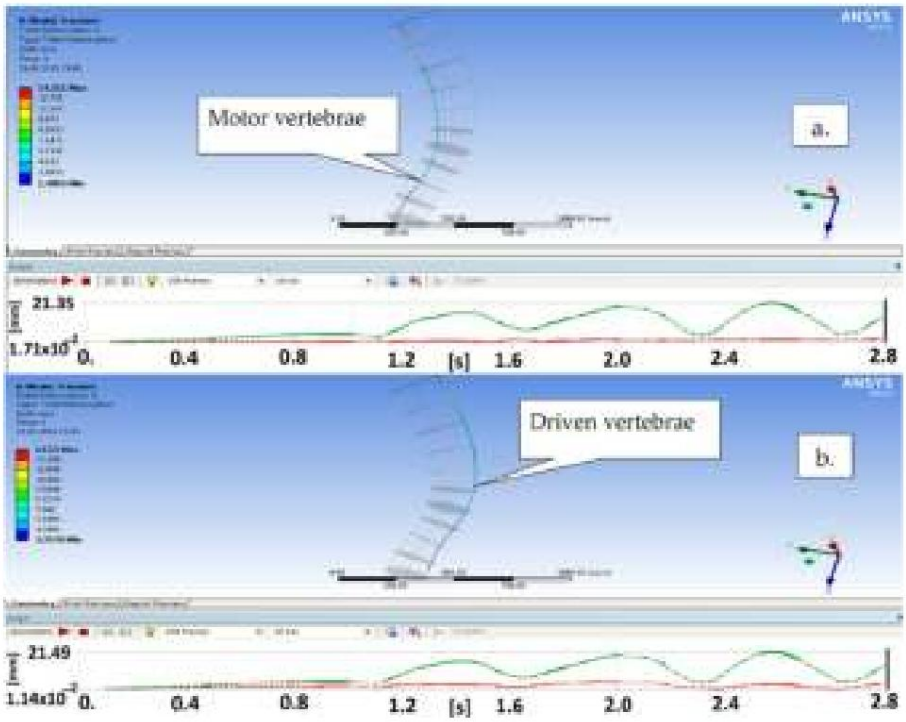


Figura 17. La variación del desplazamiento resultante para las vértebras en un sistema de coordenadas global versus el tiempo ((a)—vértebras motoras; (b)—vértebras impulsadas).

Finalmente, en la Figura 17 se analizaron las variaciones de desplazamiento para las vértebras del módulo distal.

Además, se obtuvieron las deformaciones, desplazamientos y tensiones de von Mises en el caso de cada vértebra para dos casos distintivos: cuando ésta era un elemento motor y cuando era un elemento conducido.

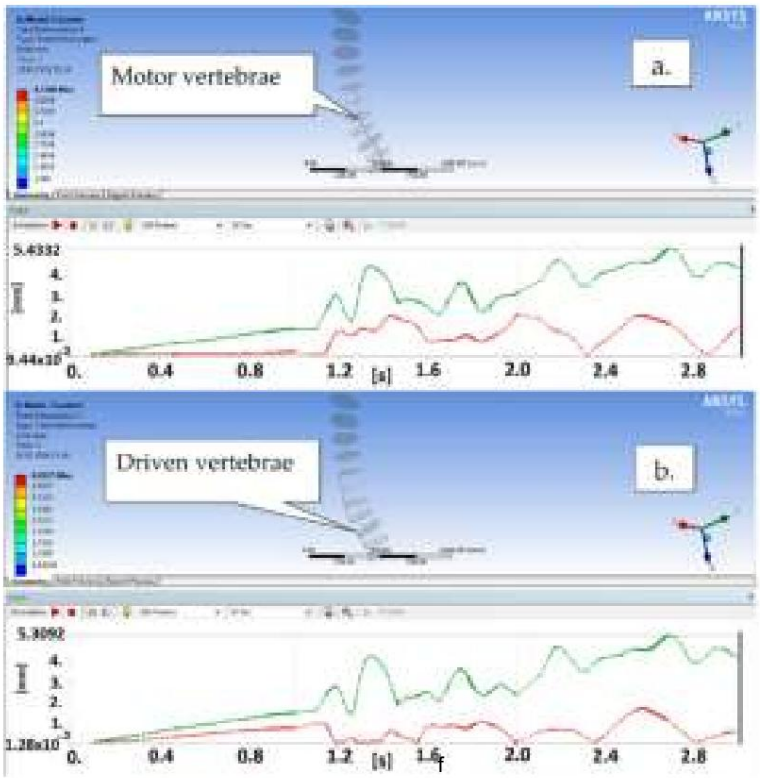
Así, en la Figura 18, podemos ver los desplazamientos resultantes para las vértebras del módulo mediano durante un intervalo de tiempo de 3 s. Tras el procesamiento numérico se obtuvieron valores de 4,3 mm para la vértebra motora y 4,1 mm para la vértebra conducida.

La amplitud de oscilación está correlacionada con la rigidez de todos los módulos de la unidad flexible y también con la configuración de los comandos de actuación.

Según la Figura 19, los desplazamientos de vértebras resultantes del accionamiento del módulo proximal se caracterizan por curvas de desplazamiento máximo que son casi idénticas y alcanzan valores de alrededor de 2,288 mm. Además, se obtuvieron diferentes valores de desplazamiento para todos los módulos durante el procesamiento numérico. Esto ocurre debido a la rigidez que se incrementará al pasar del módulo distal al mediano y luego al módulo proximal, que tiene una rigidez mayor que los otros dos.

Otros resultados, como los desplazamientos elásticos resultantes para toda la unidad flexible en diferentes momentos temporales, se reportan en la Figura 20. Así, en la Figura 20, podemos observar la forma deformada que es compatible con las variaciones registradas en el caso de la desplazamientos elásticos resultantes. Además, la deformación elástica total tiene un valor máximo de 21,83 mm, y su variación de forma es compatible con la forma flexible deformada.

Machine Translated by Google



f

f

Figura 18. La variación del desplazamiento resultante para las vértebras del módulo mediano en el sistema de coordenadas global versus el tiempo ((a)—vértebras motoras; (b)—vértebras impulsadas). f

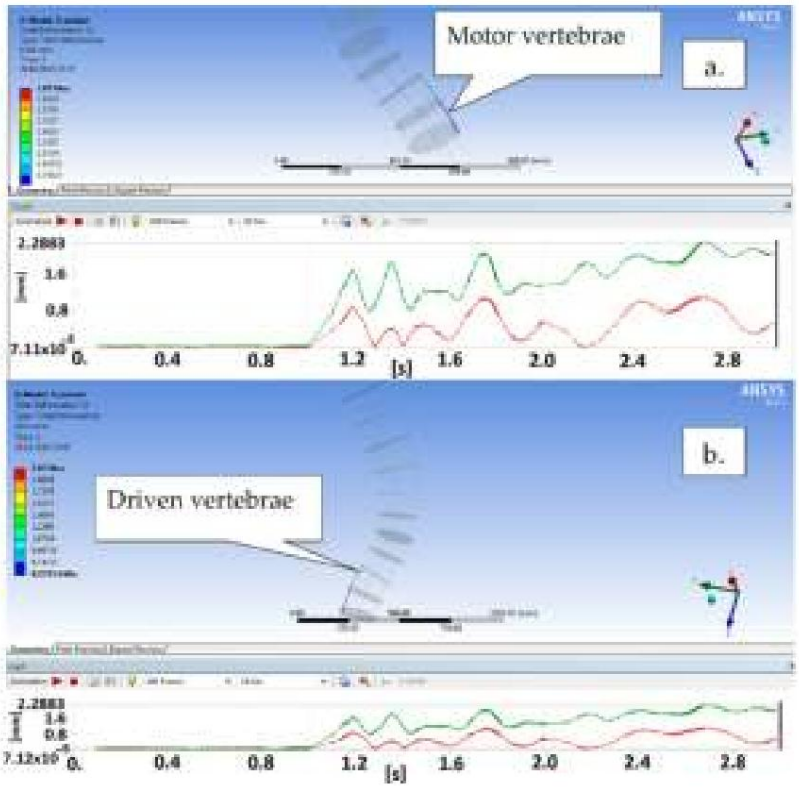


Figura 19. La variación del desplazamiento resultante para las vértebras del módulo proximal en el sistema de coordenadas global versus el tiempo ((a)—vértebras motoras; (b)—vértebras impulsadas).

f

Machine Translated by Google

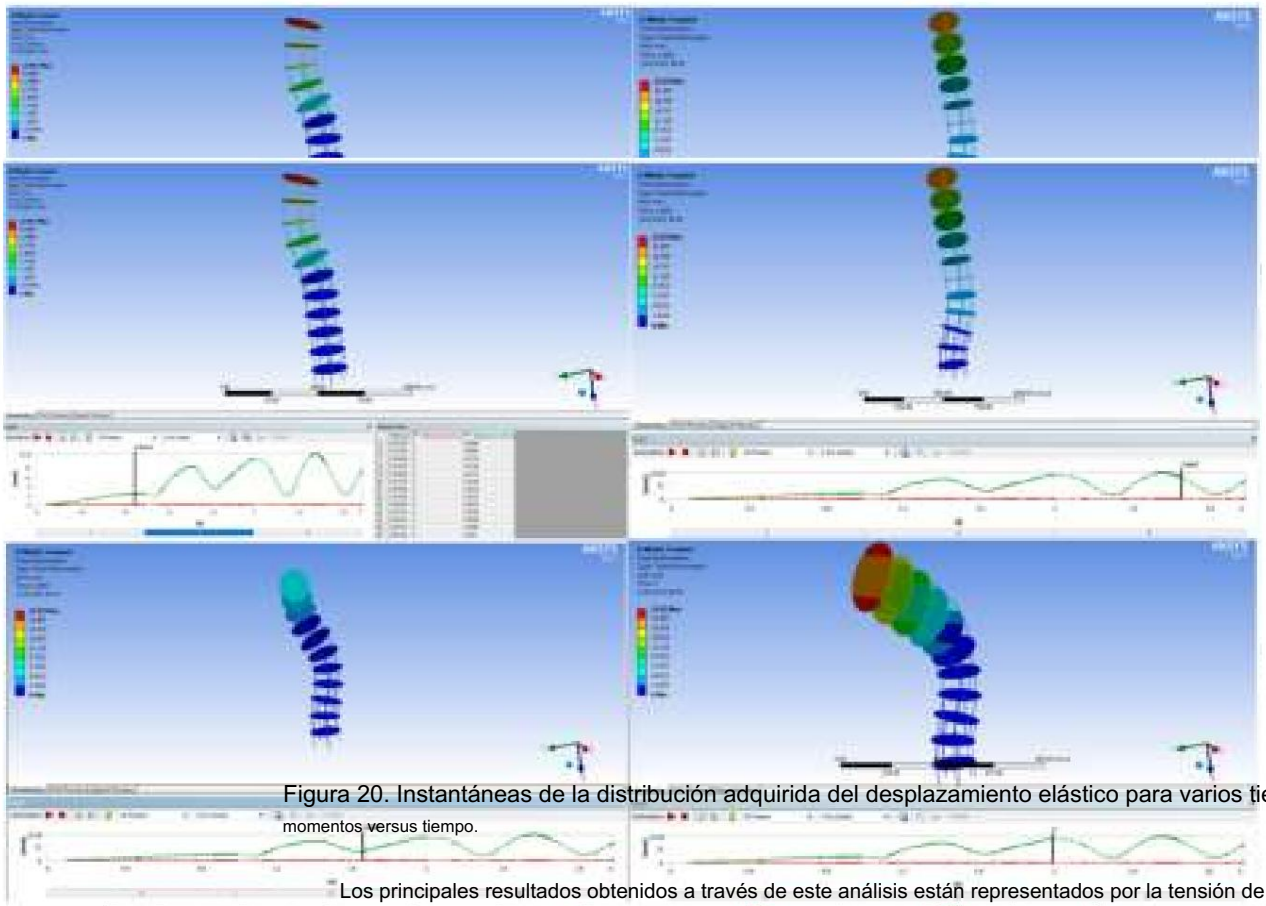


Figura 20. Instantáneas de la distribución adquirida del desplazamiento elástico para varios tiempos momentos versus tiempo.

Los principales resultados obtenidos a través de este análisis están representados por la tensión de von Mises y las deformaciones de la unidad flexible en el caso de los marcadores de interés asignados en el disco final de cada módulo. Estos se presentan en las Figuras 21 a 23.

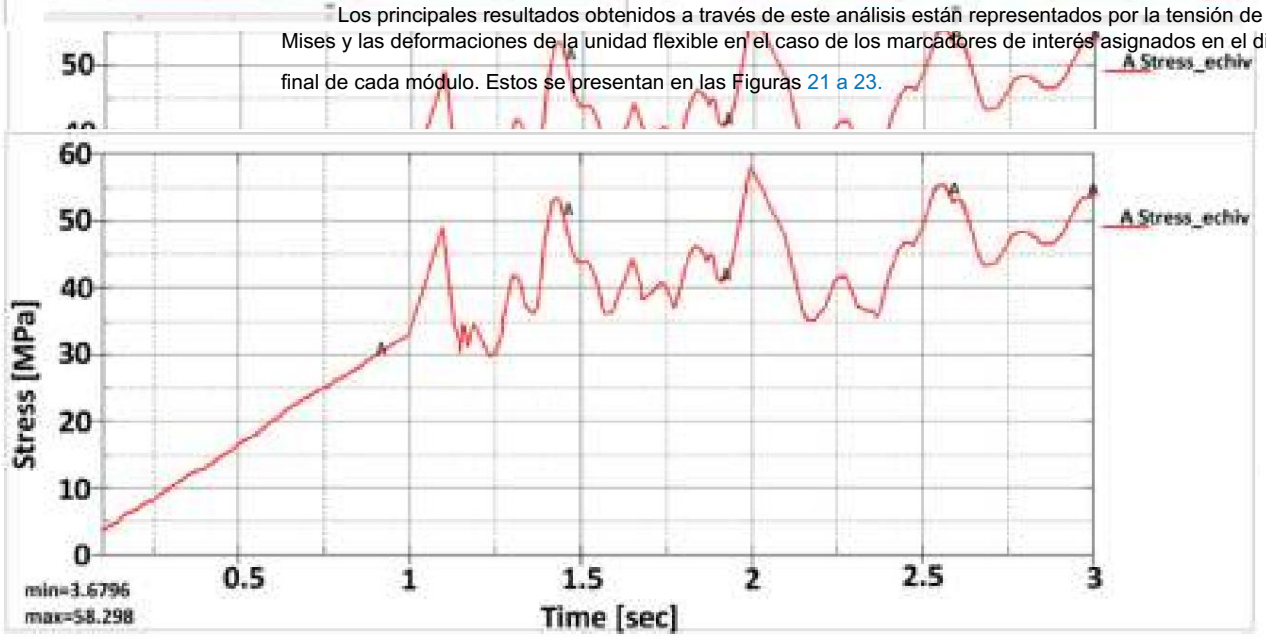


Figura 21. Distribución de tensión equivalente de von Mises frente al tiempo.

Para los resultados de la tensión de von Mises, el valor máximo fue 58,298 MPa, y la distribución de la tensión también estuvo influenciada por la configuración de actuación y la rigidez de todos los módulos de la estructura de la unidad flexible. Así, la Figura 22 muestra una suave evolución lineal. Para el intervalo del primer paso según la Figura 21, en un rango de 32 MPa, la evolución de la tensión de von Mises equivalente tendrá un comportamiento desequilibrado entre 32 MPa y 58,298 MPa. Otro aspecto particular es que la tensión equivalente de von Mises parte de un valor mínimo de

Machine Translated by Google

3,67 MPa. Este valor resulta de una rigidez inicial del conjunto poliarticulado, incluso cuando no está accionado.

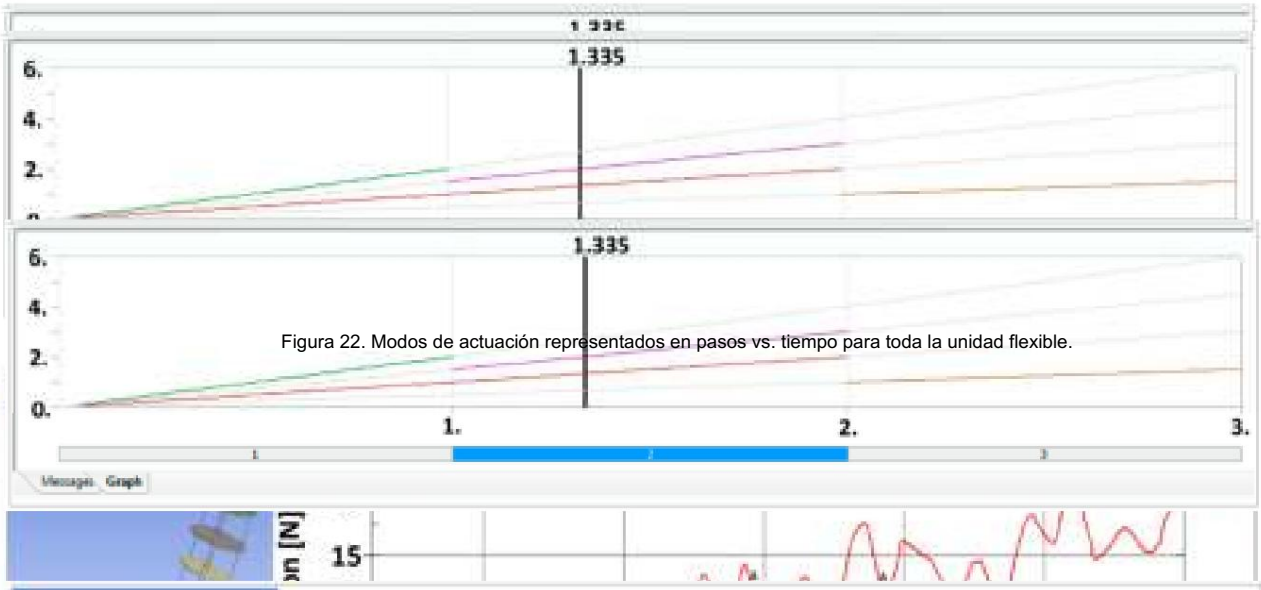


Figura 22. Modos de actuación representados en pasos vs. tiempo para toda la unidad flexible.

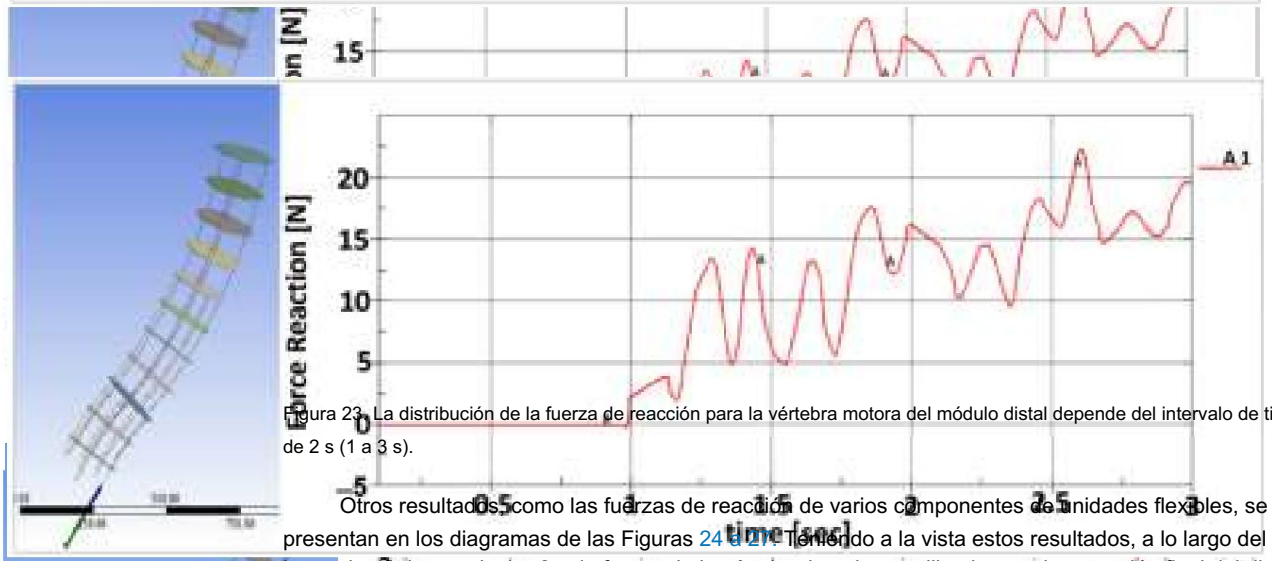


Figura 23. La distribución de la fuerza de reacción para la vértebra motora del módulo distal depende del intervalo de tiempo de 2 s (1 a 3 s).

Otros resultados como las fuerzas de reacción de varios componentes de unidades flexibles, se presentan en los diagramas de las Figuras 24 a 27. Teniendo a la vista estos resultados, a lo largo del intervalo de tiempo de 1 a 3 s, la fuerza de la vértebra impulsora utilizada para la actuación final del disco desde el módulo distal, es decir, D11, alcanza un valor de 25 N, como se muestra en la Figura 23.

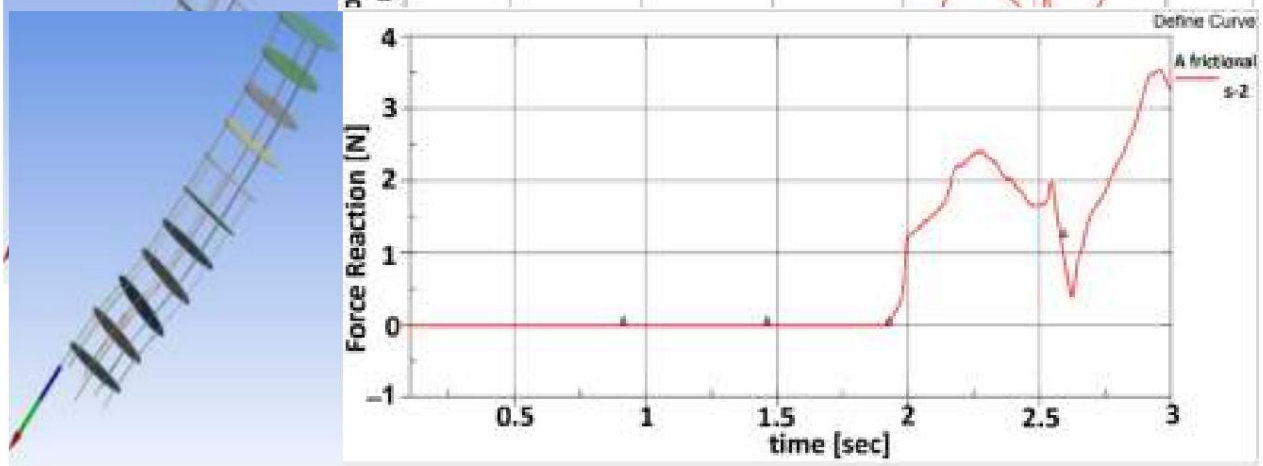


Figura 24. La distribución de la fuerza de reacción para una vértebra impulsada del módulo distal depende del intervalo de tiempo de 1 s.

Machine Translated by Google

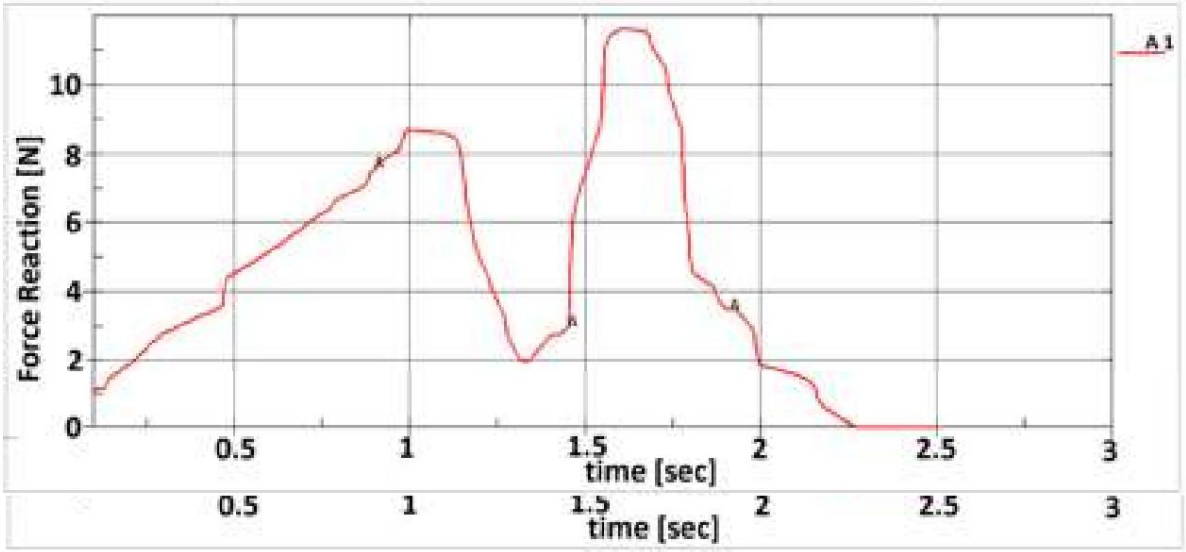


Figura 25. La distribución de la fuerza de reacción para la vértebra motora del módulo mediano depende del intervalo de tiempo de 2 s.

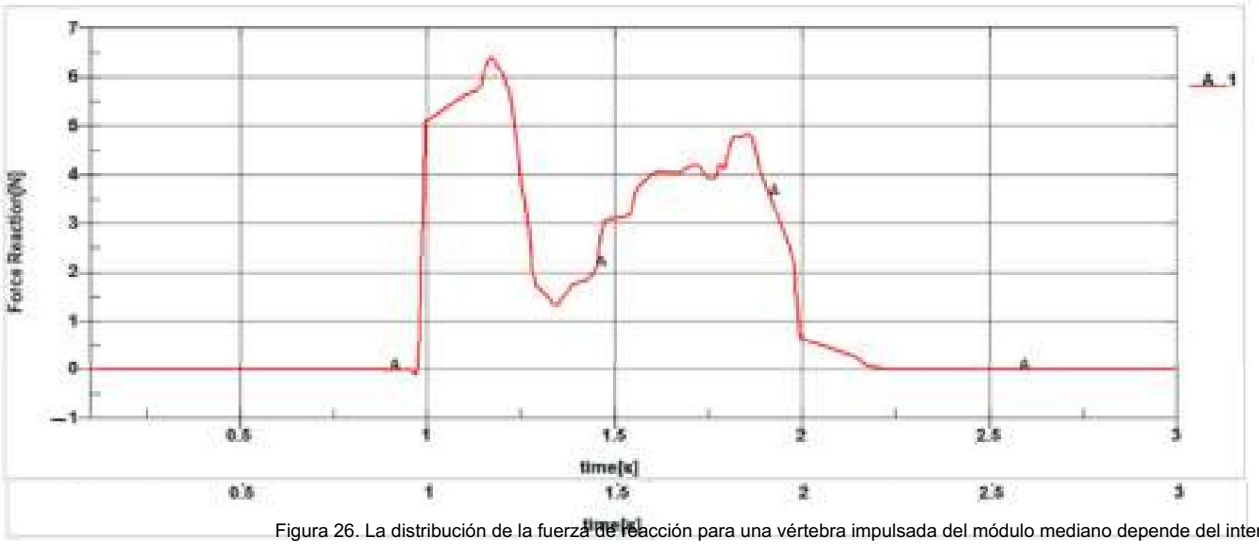


Figura 26. La distribución de la fuerza de reacción para una vértebra impulsada del módulo mediano depende del intervalo de tiempo de 1 s.

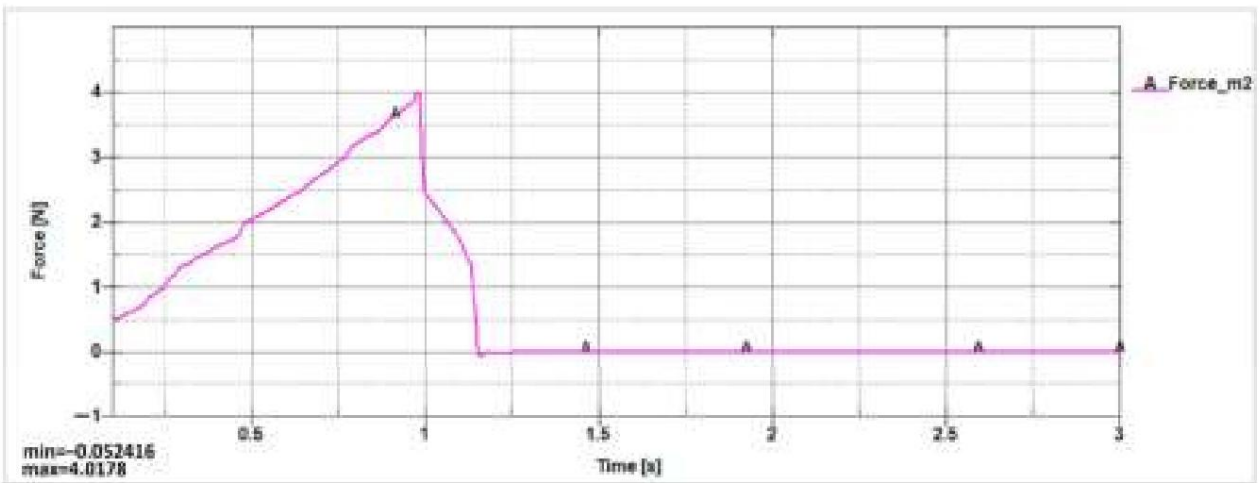


Figura 27. La distribución de la fuerza de reacción para una vértebra impulsada del módulo proximal depende de un intervalo de tiempo de 1 s.

Machine Translated by Google

En la Figura 24, la fuerza de reacción obtenida para la vértebra impulsada durante el accionamiento del módulo distal tiene una variación que oscila entre 0 y 3,5 N. Esto sucede en un intervalo de tiempo de 2 a 3 s.

Para el accionamiento del módulo distal, la fuerza de accionamiento de la vértebra impulsora registra una variación de tiempo casi lineal, como se puede observar en la Figura 25. Esta se produjo en un período de 0 a 2 s y alcanzó un valor máximo de 11,8 N.

La fuerza de reacción de la vértebra media impulsada por el módulo se activó durante la período de 1 a 2 s y alcanzó valores que oscilan entre 0 y 6.5 N, según Figura 26.

La Figura 27 muestra una fuerza de reacción en el primer intervalo de tiempo que oscila entre 0 y 2 s. Éste alcanza un valor máximo de 4 N al final del período de actuación. Este también tiene una suave evolución lineal y comienza a partir de 0,5 N, cuando se accionará toda la unidad poliarticulada .

Se analizó la distribución de los resultados de los parámetros de contacto para un disco intermedio y las vértebras centrales. Los resultados obtenidos estuvieron representados por el esfuerzo de fricción, el factor de penetración y la presión de contacto durante un intervalo de tiempo de 3 s. Estos resultados se muestran en las Figuras 28 y 30.

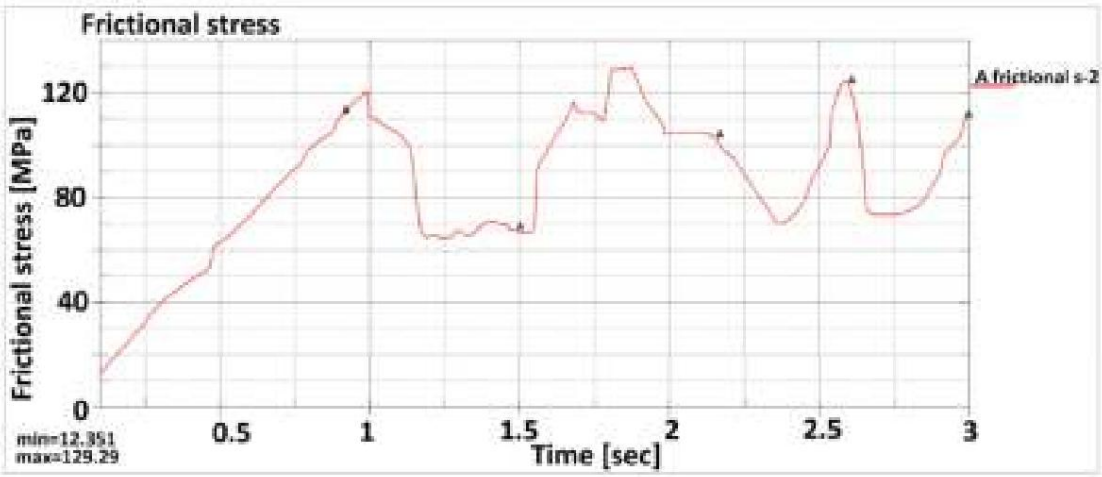


Figura 28. La distribución de la tensión de fricción depende del tiempo.

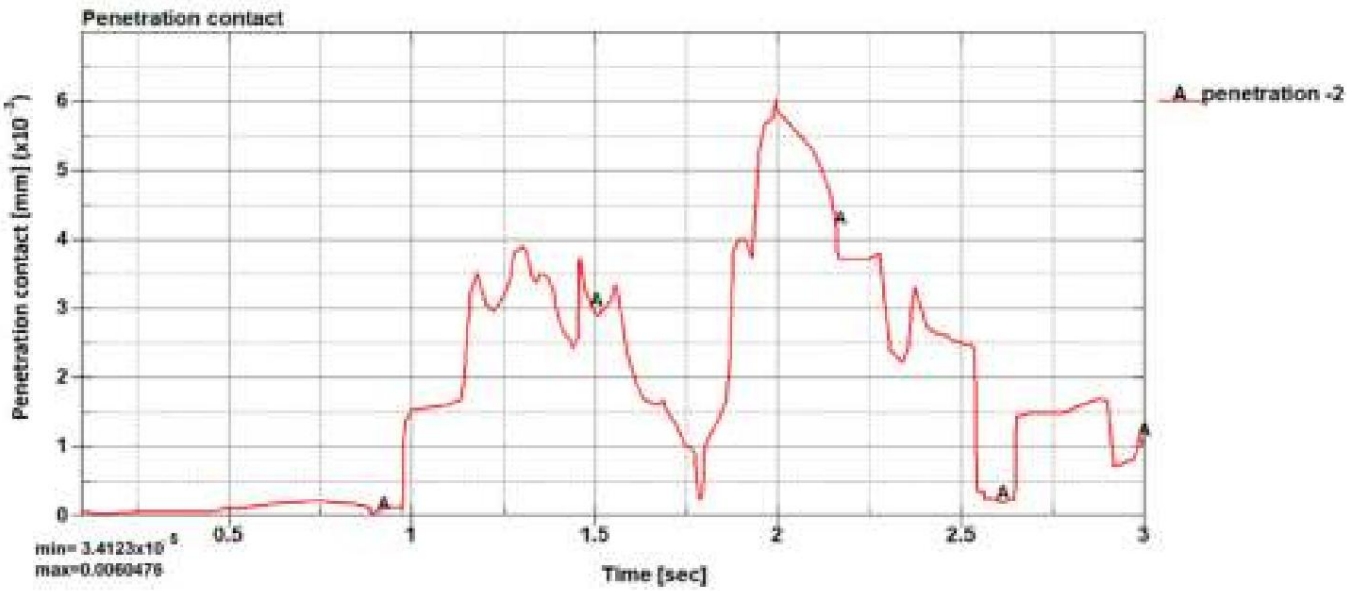


Figura 29. La variación del contacto de penetración para la definición de contacto del sistema mecánico versus el tiempo.

Machine Translated by Google

(a) (b)

Figura 30. Prototipo de sistema robótico poliarticulado equipado con dos formas de unidad flexible: (a) forma cilíndrica y (b) forma troncónica.

La Figura 29 muestra que el factor de penetración entre las superficies de contacto y las superficies objetivo es muy pequeño y puede despreciarse. Según la Figura 29, este alcanza un valor máximo de 0,0060476 mm. Durante el accionamiento, el esfuerzo de fricción alcanza un valor de casi 130 MPa, y tiene un comportamiento desequilibrado debido a la fricción entre elementos y al contacto recto, como se puede observar en la Figura 28. Durante las simulaciones, se puede notar una distribución de presión simétrica cuando un se activa un módulo y se libera otro. Las oscilaciones, que ocurren durante las simulaciones virtuales que se pueden observar en las curvas de variación de las Figuras 25 a 29, son causadas principalmente por la configuración de los parámetros de definición de contacto, el tipo de contacto, el paso y método de integración, correlacionados con el intervalo de tiempo para monitorear el movimiento del sistema.

6. Prototipo del Sistema Robótico Poliarticulado El

prototipo experimental fue creado de acuerdo a los parámetros de diseño impuestos por el modelo virtual 3D, pero este también fue validado a través de los resultados de la simulación virtual. Este tiene dos unidades principales, una para el accionamiento del sistema robótico y la otra representada por la unidad flexible. El movimiento de traslación se transformó y transmitió desde los motores de rotación a través de nueve transmisiones mecánicas de tuerca-tornillo al módulo considerado desde la unidad flexible. La unidad de accionamiento también dispone de dispositivos mecánicos que se utilizan para la compensación del desplazamiento axial. Los prototipos diseñados para ambas formas de unidad flexible, es decir, la cilíndrica y la troncónica, se muestran en la Figura 30. La unidad de actuación, que es común a ambas soluciones, se muestra en las Figuras 31 y 32.

Figura 31. La unidad de actuación robótica poliarticulada.

Machine Translated by Google

Figura 32. Sistemas de guiado de las transmisiones mecánicas tuerca-tornillo.

7. Análisis Experimental del Movimiento

Ambos prototipos fueron evaluados experimentalmente mediante varias pruebas en condiciones dinámicas. El objetivo de este análisis es validar el prototipo experimental y también analizar los protocolos de mando y control. Para lograr los objetivos propuestos se utilizó el equipo de video motion CONTEMPLAS [27]. El principio de este análisis se muestra en la Figura 33. Así, los resultados de las pruebas experimentales del sistema robótico evaluado se presentan para una solución, es decir, la que tiene forma troncal.

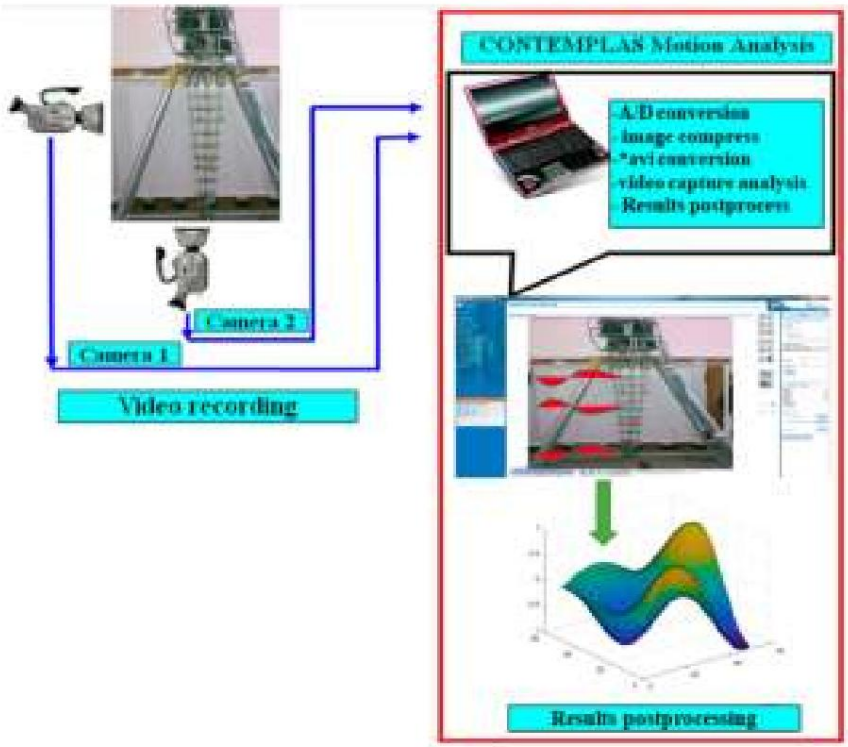


Figura 33. Flujo de trabajo de análisis de movimiento CONTEMPLAS.

Este equipo cuenta con dos cámaras que pueden grabar secuencias de vídeo de hasta 350 fotogramas/segundo. La grabación de video se realizó manteniendo las mismas condiciones impuestas a través de simulaciones virtuales , es decir, período y modos de actuación de trabajo para todos los módulos. El primer paso del análisis experimental propuesto fue realizar un setup del equipo y también del sistema robótico poliarticulado con el fin de evaluar su espacio de trabajo. Esto se muestra en la Figura 34. Las cámaras de video se colocaron en un ángulo de 90 grados entre ellas y a una distancia de 2,5 m del prototipo analizado, como se puede observar en la Figura 34.

Machine Translated by Google

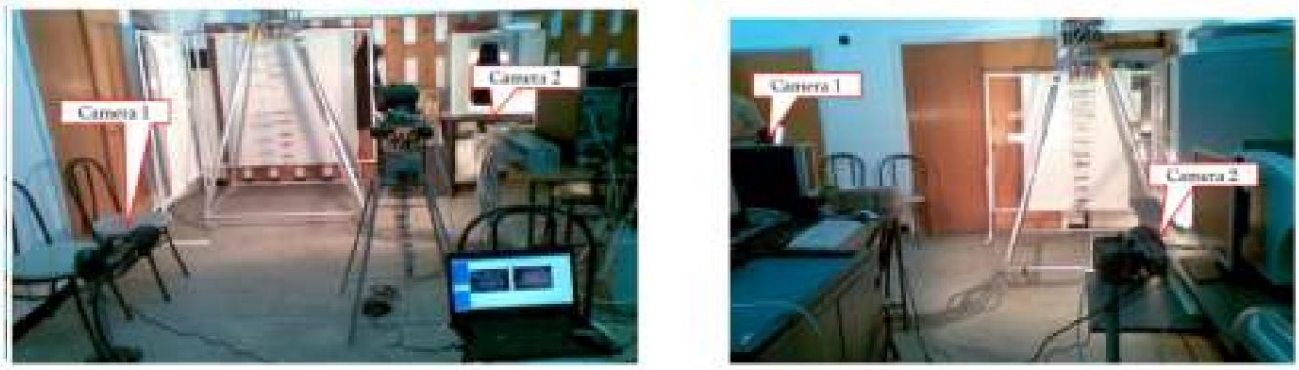


Figura 34. Configuración de análisis experimental para el sistema robótico analizado.

Se colocaron doce marcadores reflexivos en el sistema robótico poliarticulado para evaluar el espacio de trabajo, que se caracterizaba por las trayectorias experimentales desarrolladas. El hardware del equipo y el software Templo Plus V2010 pueden identificar la posición del marcador en cada secuencia de la secuencia de video grabada. En este caso, la tarea de los marcadores analizados adheridos a las vértebras centrales fue la variación de trayectoria, según la Figura 3 Algunas instantáneas durante la evaluación de la trayectoria se pueden observar en la Figura 36.

Figura 35. Accesorio del marcador en el sistema robótico poliarticulado.

Teniendo a la vista las pruebas de análisis experimentales obtenidas, se realizó un estudio comparativo con base en los resultados obtenidos mediante simulaciones virtuales y los de pruebas experimentales. Este análisis se realizó con el software LS-Dyna R7.1 para establecer la precisión del movimiento realizado. Así, los resultados más importantes se representan a través de la deformación total de todo el sistema robótico poliarticulado. Este estudio comparativo se centrará en monitorear la posición del marcador central situado en el disco final del módulo distal. Estos resultados se muestran en las Figuras 37 a 39, donde el comportamiento de los componentes de deformación representa la prueba de validación del prototipo del sistema robótico poliarticulado .

Machine Translated by Google

Figura 36. Algunas instantáneas durante las pruebas experimentales para la evaluación de trayectorias.

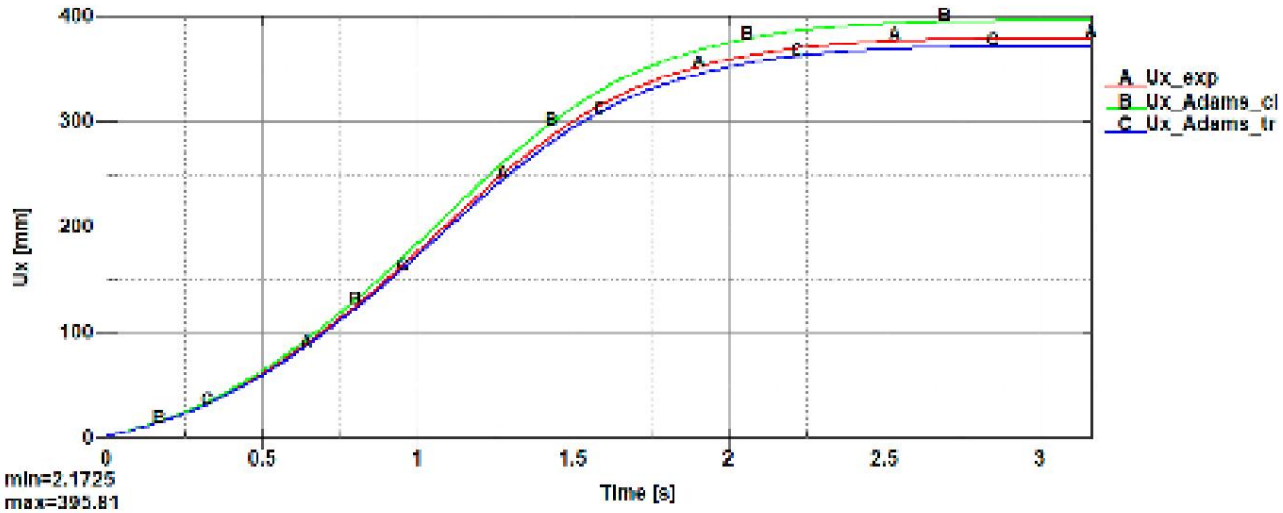


Figura 37. Desplazamiento total en el eje X del sistema robótico poliarticulado vs tiempo: A— Modelo tronconico experimental; B: modelo virtual de Adams con una unidad flexible cilíndrica; C—Modelo virtual de Adams con forma troncónica de la unidad flexible.

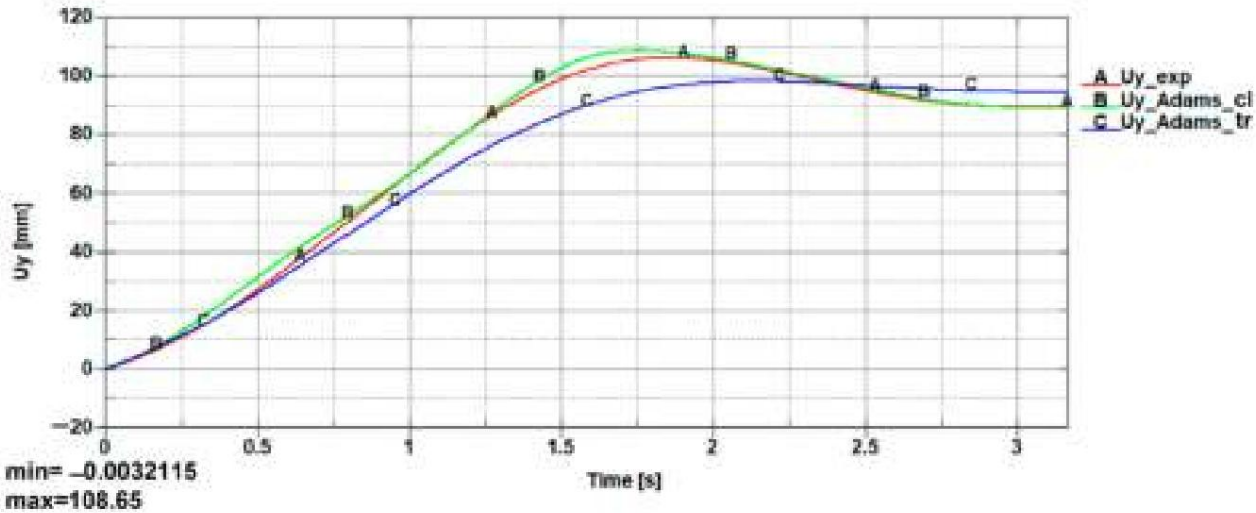


Figura 38. Desplazamiento total en el eje Y del sistema robótico poliarticulado vs tiempo: A— Modelo tronconico experimental; B: modelo virtual de Adams con una unidad flexible cilíndrica; C—Modelo virtual de Adams con forma troncónica de la unidad flexible.

Machine Translated by Google

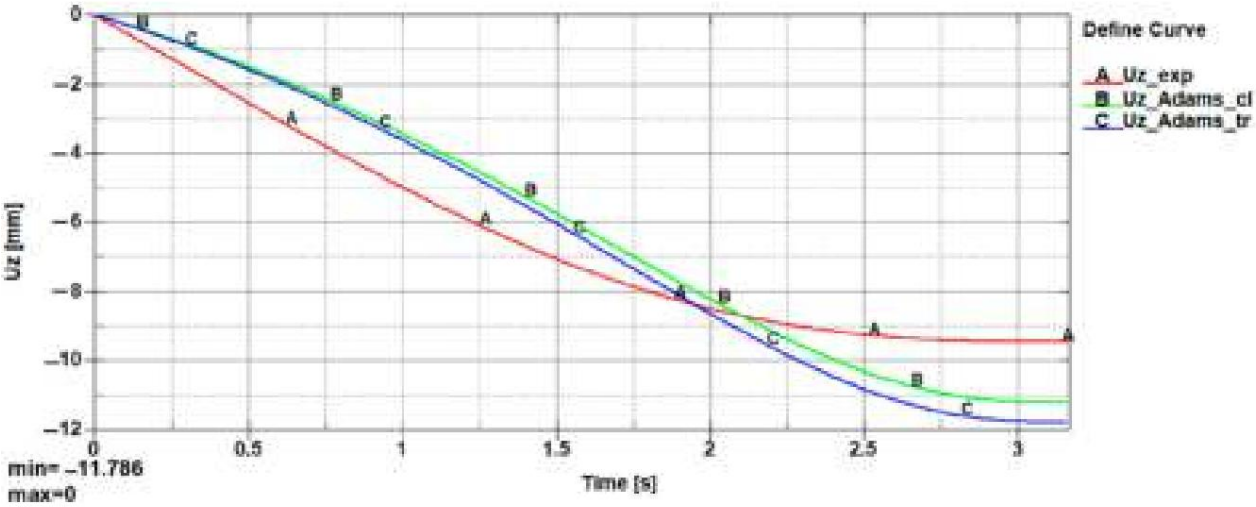


Figura 39. Desplazamiento total en el eje Z del sistema robótico poliarticulado vs tiempo: A— Modelo tronconico experimental; B: modelo virtual de Adams con una unidad flexible cilíndrica; C—Modelo virtual de Adams con forma troncónica de la unidad flexible.

Así, la Figura 37 muestra un diagrama del desplazamiento total en la dirección X para el prototipo obtenido, respectivamente, simulaciones virtuales realizadas con el software MSC Adams. De esto se puede observar que todos los modelos tienen la misma trayectoria, variando desde 0 hasta un valor máximo de 398,22 mm obtenido para el modelo virtual de robot poliarticulado con forma cilíndrica de la unidad flexible. En el caso del prototipo experimental, este alcanza un valor de 382,31 mm y se acerca mucho más al tercero, respectivamente, al caracterizado por una unidad flexible con forma troncal. El tercero alcanza un valor de 380,77 mm. Por tanto, la precisión ronda el 4,188%.

Al tener a la vista el gráfico reportado en la Figura 38, se puede observar que todas las trayectorias de los modelos analizados tienen una trayectoria adecuada en el caso del desplazamiento total del eje Y , registrándose un valor máximo de 109.63 mm, el cual Corresponde al modelo virtual de robot poliarticulado caracterizado por una unidad flexible con forma cilíndrica.

En el caso del prototipo analizado durante las pruebas experimentales, el valor máximo registrado fue de 106,32 mm. En el tercer caso, el modelo virtual caracterizado por la forma tronconica, alcanza un valor máximo de 99,64 mm. En este caso se estableció una precisión del 6,064%.

Se realizó un análisis comparativo similar en el caso del desplazamiento total en el eje Z, como se muestra en el diagrama de la Figura 39. En este caso, todas las trayectorias tienen trayectorias apropiadas , pero se registraron valores diferentes para los modelos analizados. Al tener a la vista el modelo virtual poliarticulado simulado con MSC Adams, con forma troncal de la unidad flexible, se puede observar un valor mínimo de –11.774 mm, pero para el análisis experimental se registró un valor mínimo de –9.678 mm. El prototipo de robot poliarticulado. En el último caso, es decir, en el modelo virtual del sistema robótico con forma cilíndrica de la unidad flexible, se registró un valor mínimo de –11,33 milímetros, lo que da como resultado una precisión del 8,783%.

8. Conclusiones

En esta investigación se validó un prototipo de sistema robótico poliarticulado. Este robot se puede utilizar en varios ámbitos fundamentales como la industria automotriz, la medicina, la defensa militar e incluso la arquitectura. El prototipo virtual del sistema robótico se desarrolló con MSC Adams. Se definió una interfaz para importar el modelo CAD propuesto con todos los componentes del mecanismo considerados como subconjuntos y también considerando las condiciones de contorno impuestas. Se construyó un modelo cinemático equivalente del sistema mecánico propuesto teniendo a la vista las uniones cinemáticas y algunos sistemas de referencia locales ubicados en los centros de masa de los eslabones unitarios flexibles, respectivamente, en la unión.

Machine Translated by Google

centros. Las articulaciones del motor se definieron de acuerdo con las leyes de movimiento establecidas para todos los actuadores en un intervalo de tiempo de 3 s. Se identificó un procedimiento para transformar los cuerpos sólidos en deformables engranándolos en elementos finitos tetraédricos. Esto se hizo teniendo en cuenta el tipo de conexión entre elementos y la definición de la configuración del nodo en modo maestro y esclavo.

Se realizó un análisis dinámico elástico, lo que implica cruzar dos etapas: un análisis modal para evaluar las frecuencias naturales y las formas modales para los elementos cinemáticos flexibles y un análisis dinámico de la unidad flexible basado en el método de Craig-Bampton para establecer la Variación de los parámetros cinemáticos en función del tiempo.

El núcleo de validación del prototipo se centra en el movimiento de las vértebras centrales como cuerpo rígido pero también como cuerpo deformable. El análisis de movimiento se realizó en nodos/marcadores específicos, dependiendo del sistema de referencia global y de otros sistemas de referencia locales.

El movimiento de un cuerpo rígido se define a través de un conjunto de sistemas de coordenadas generalizados que representan la identificación del origen del sistema de referencia móvil según el sistema de referencia global y su orientación a través de ángulos de Euler. El movimiento del cuerpo deformable se definió mediante un conjunto de coordenadas modales basado en el método de Craig-Bampton.

Las variaciones de deformación elástica se determinaron dependiendo del tiempo de desplazamiento angular y lineal del nodo terminal ubicado en las vértebras centrales. Es importante señalar que los resultados de los diagramas representados a través de valores numéricos y trayectorias de curvas de simulaciones virtuales son similares a los obtenidos en el análisis experimental para el prototipo del sistema robótico diseñado.

El prototipado virtual creado con Ansys tiene un carácter complejo, utilizando la caracterización dinámica de los modelos de contacto creados entre elementos deformables y discos.
El análisis dinámico realizado tiene un comportamiento no lineal.

Para la definición del contacto, se tuvieron en cuenta las siguientes condiciones: el movimiento de traslación entre las vértebras de actuación y los discos, la red de elementos finitos al nivel de las áreas de contacto, los fenómenos de penetración entre las superficies de contacto y las objetivo y ecuaciones diferenciales entre el tipo de contacto y método de integración.
El modelo procesado evaluado con el software Ansys es completamente diferente al analizado con MSC Adams, porque todos los elementos están en contacto, y estos son considerados deformables.

A través de este análisis se identificaron leyes de variación de los parámetros cinemáticos, dependiendo del tiempo y la tensión, las deformaciones, la tensión y las fuerzas de actuación resultantes de los elementos de accionamiento. Las formas deformadas de las unidades flexibles se obtuvieron mediante simulaciones numéricas. Estas formas definen el espacio de trabajo del sistema robótico y están influenciadas por la configuración de tiempo para el procedimiento de comando y control. El comportamiento de deformación de las vértebras centrales se mantuvo a la vista mediante diagramas de variación temporal.

El mayor aporte que aporta esta investigación está representado por el desarrollo de un modelo de contacto con posibilidades de control de vertimientos; la profundidad de penetración entre diferentes tipos de superficies, como contacto y objetivo; el factor de rigidez normal para las pruebas y la elección de las adecuadas entre las formulaciones permitidas por ANSYS (penalización pura, MPC, Lagrange aumentada y Lagrange normal). Así, el modelo geométrico unitario flexible obtenido fue analizado y parametrizado con la ayuda del módulo DesignModeller del software ANSYS R14.5, con vistas a prever futuras investigaciones como procesos de optimización de los componentes en modo dinámico.

Los modelos virtuales de la unidad flexible logrados en MSC Adams 2012 y el software ANSYS R14.5 están parametrizados, con posibilidades de optimización en condiciones cinemáticas y dinámicas específicas.

La arquitectura del sistema robótico, que incluye el sistema de actuación, es decir, la unidad de comando y control, representa la base fundamental del diseño conceptual de un sistema robótico para un futuro sistema robótico miniaturizado especialmente diseñado para procedimientos de cirugía mínimamente invasivos como [17].

Machine Translated by Google

Contribuciones de los autores: Conceptualización, ND y SD; metodología, SD y ND; software, IG; validación, CC, SD y ND; análisis formal, IG; investigación, CC; recursos, SD; curación de datos , SD e IG; redacción: preparación del borrador original, CC; redacción: revisión y edición, CC y ND; visualización, ND; supervisión, CC y ND; administración de proyectos, ND; adquisición de financiación , ND Todos los autores han leído y aceptado la versión publicada del manuscrito.

Financiamiento: Esta investigación no recibió financiamiento externo.

Declaración de disponibilidad de datos: todos los datos generados en la investigación actual se presentan en el manuscrito.

Conflictos de intereses: Los autores declaran no tener conflictos de intereses.

Referencias

1. Bajo, A.; Simaan, N. Control híbrido de fuerza y movimiento de robots multiesqueleto. Int. J. Robot. Res. 2015, 35, 1–13. [Referencia cruzada]
2. Hannan, M.; Walker, I. El manipulador, diseño e implementación de la 'trompa de elefante'. En Actas de la Conferencia Internacional IEEE/ASME sobre Mecatrónica Inteligente Avanzada (AIM), Como, Italia, 8 a 12 de julio de 2001; págs. 14-19.
3. Hirose, S. Robots de inspiración biológica: locomotores y manipuladores con forma de serpiente; Revisiones de Mecánica Aplicada; Oxford University Press: Oxford, Reino Unido, 1995; Volumen 48, pág. 27.
4. Kim, Y.; Cheng, S.; Kim, S.; Iagnemma, K. Diseño de un manipulador tubular en forma de serpiente con capacidad de refuerzo mediante interferencia de capas. En Actas de la Conferencia Internacional IEEE/RSJ de 2012 sobre Robots y Sistemas Inteligentes, Vilamoura, Portugal, 7 a 12 de octubre de 2012.
5. Roppenecker, DB; Schuster, L.; Coy, JA; Traeger, MF; Entsfellner, K.; Lueth, TC Cuerpo modular del robot con forma de serpiente de brazos múltiples. En Actas de la Conferencia Internacional sobre Robótica y Biomimética, Bali, Indonesia, 5 a 10 de diciembre de 2014.
6. Gu, X.; Ren, H. Un estudio de los mecanismos robóticos transorales: destreza distal, rigidez variable y triangulación. Cíborg biónico Sistema. 2023, 4, 0007. [Referencia cruzada] [PubMed]
7. Shi, L.; Mamá, Z.; Yan, S.; Zhou, Y. Cucker: comportamiento de agrupación de pequeños hombres para redes multiagente con interacciones de cooperación y retrasos en la comunicación. Traducción IEEE. Sistema. Hombre Cibernético. Sistema. 2024, 1–10. [Referencia cruzada]
8. Shi, L.; Mamá, Z.; Yan, S.; Ao, T. Dinámica de bandada para redes de múltiples agentes de cooperación-antagonismo sujetas a recursos de comunicación limitados. Traducción IEEE. Sistema de circuitos. Yo regulo. Papilla. 2024, 71, 1396–1405. [Referencia cruzada]
9. Kim, S.-H.; Choi, HS; Keum, B.; Chun, H.-J. Robótica en Endoscopia Gastrointestinal. Aplica. Ciencia. 2021, 11, 11351. [Referencia cruzada]
10. Clark, AB; Mathivanan, V.; Rojas, N. Un manipulador continuo para investigación y uso compartido de robótica quirúrgica de código abierto Desarrollo. Traducción IEEE. Medicina. Robot. Biónica 2021, 3, 277–280. [Referencia cruzada]
11. Ivanescu, M.; Cojocaru, D.; Bizdoaca, N.; Florescu, M.; Popescu, N.; Popescu, D.; Dumitru, S. Control de límites por límites Observador de robots hiperredundantes. Int. J. Computación. Comunitario. Control 2010, 5, 755–767. [Referencia cruzada]
12. Xu, S.; Él, B.; Zhou, Y.; Wang, Z.; Zhang, C. Un método híbrido de control de posición/fuerza para un robot continuo con robótica y Cumplimiento ambiental. Acceso IEEE 2019, 7, 100467–100479. [Referencia cruzada]
13. Wooten, MB; Walker, ID Interacción ambiental con robots Continuum que explotan el impacto. Robot IEEE. Automático. Letón. 2022, 7, 10136–10143. [Referencia cruzada]
14. Chen, Y.; Wang, L.; Galloway, K.; Godage, yo; Simaan, N.; Barth, E. Cinemática basada en modales y detección de contacto de robots blandos. Robot blando. 2020, 8, 298–309. [Referencia cruzada]
15. Liu, H.; Farvardin, A.; Pedram, SA; Iordachita, I.; Taylor, RH; Armand, M. Detección de forma de gran desviación de un manipulador continuo para cirugía mínimamente invasiva. En Actas de la Conferencia Internacional IEEE sobre Robótica y Automatización ICRA, Seattle, WA, EE. UU., 26 a 30 de mayo de 2015; págs. 201–206.
16. Desai, JP; Sheng, J.; Cheng, SS; Wang, X.; Deaton, Nueva Jersey; Rahman, N. Hacia sistemas robóticos impresos en 3D específicos para pacientes para Intervenciones Quirúrgicas. Traducción IEEE. Medicina. Robot. Biónica 2019, 1, 77–87. [Referencia cruzada] [PubMed]
17. Dumitru, N.; Ciurezu-Gherghe, L.; Copilusi, C.; Geonea, I.; Dumitru, S. Métodos de estudio teórico y experimental de un sistema robótico con elementos deformables utilizados en cirugía mínimamente invasiva. Mec. Mach. Teoría 2022, 167, 104459. [CrossRef]
18. Zhang, Z.; Dequidt, J.; Atrás, J.; Liu, H.; Duriez, C. Control de movimiento de un robot de catéter continuo accionado por cable a través de contactos. Robot IEEE. Automático. Letón. 2019, 4, 1852–1859. [Referencia cruzada]
19. Oliver-Butler, K.; Hasta, J.; Rucker, rigidez del robot DC Continuum bajo cargas externas y desplazamientos de tendones prescritos. IEEE Trans. Robot. 2019, 35, 403–419. [Referencia cruzada]
20. Goldman, RE; Bajo, A.; Simaan, N. Control de movimiento compatible para robots continuos multisegmentos con detección de fuerza de actuación. Traducción IEEE. Robot. 2014, 30, 890–902. [Referencia cruzada]
21. Dumitru, S.; Cojocaru, D.; Marghitu, D. Diseño asistido por computadora de un manipulador hiperredundante. Adv. eléctrico. Computadora. Ing. 2013, 13, 51–56. [Referencia cruzada]
22. Grazioso, S.; Di Girónimo, G.; Siciliano, B. Un modelo geométricamente exacto para robots continuos blandos: la formulación del espacio de deformación de elementos finitos. Robot blando. 2019, 6, 790–811. [Referencia cruzada]
23. Craig, RR; Bampton, CC Acoplamiento de subestructuras para análisis dinámicos. AIAA J. 1998, 6, 1313–1319. [Referencia cruzada]
24. Duan, J.; Zhang, K.; Qian, K.; Hao, J.; Zhang, Z.; Shi, C. Un controlador de rigidez operativa para el robot médico continuo Basado en Control de Impedancia. Sistema biónico Cyborg. 2024, 8, 0110. [Referencia cruzada] [PubMed] [PubMed Central]

Machine Translated by Google

25. Zhang, S.; Li, F.; Pelo.; Li, H.; Zou, S.; Hombre.; Qu, S.; Li, J. Un robot de agarre continuo versátil con una pinza oculta.
Sistema biónico Cyborg. 2023, 4, 0003. [Referencia cruzada]
26. Chirikjian, GS; Burdick, JW Un enfoque modal para la cinemática del manipulador hiperredundante. Traducción IEEE. Robot. Automático. 1994,
10, 343–353. [Referencia cruzada]
27. Manual de Usuario CONTEMPLAS. Disponible en línea: www.contemplas.com (consultado el 23 de julio de 2018).

Descargo de responsabilidad/Nota del editor: Las declaraciones, opiniones y datos contenidos en todas las publicaciones son únicamente de los autores y contribuyentes individuales y no de MDPI ni de los editores. MDPI y/o los editores renuncian a toda responsabilidad por cualquier daño a personas o propiedad que resulte de cualquier idea, método, instrucción o producto mencionado en el contenido.

Machine Translated by Google

cálculo

MDPI

Artículo

Un nuevo puerto de dimensiones finitas/infinitas mixtas: hamiltoniano Modelo de ventilador mecánico

Milka CI Madahana 1,*, John ED Ekoru [2] y Otis TC Nyandoro [2]

[1] Escuela de Ingeniería de Minas, Universidad de Witwatersrand, segundo piso, edificio ARM, 1 de enero de Smuts Avenue, Braamfontein, Johannesburgo 2017,
[2] Escuela de Ingeniería Eléctrica y de la Información de Sudáfrica , Universidad de Witwatersrand, 2.° piso, edificio ARM, 1 de enero de Smuts Avenue , Braamfontein, Johannesburgo 2017, Sudáfrica; john.ekoru@wits.ac.za (JEDE); otis.nyandoro@wits.ac.za (OTCN)
* Correspondencia: milka.madahana@wits.ac.za

Resumen: La ventilación mecánica es un tratamiento que salva vidas para pacientes críticamente enfermos que tienen dificultades para respirar de forma independiente debido a una lesión o enfermedad. A nivel mundial, cada año, siempre ha habido una gran cantidad de personas que han requerido ventilación mecánica. La pandemia de COVID-19 sacó a la luz la importancia de la ventilación mecánica, que desempeñó un papel importante en el mantenimiento de pacientes críticamente enfermos infectados por COVID-19 que no podían respirar por sí solos. La pandemia llamó la atención del mundo sobre la escasez de ventiladores a nivel mundial. Algunos de los desafíos para proporcionar una cantidad adecuada de ventiladores incluyen: mayor demanda de ventiladores, interrupciones en la cadena de suministro, limitaciones de fabricación, desigualdades en la distribución, limitaciones financieras, dificultades de mantenimiento y logística , escasez de capacitación y experiencia, y la falta de diseño y desarrollo de ventiladores asequibles. ventiladores mecánicos que cumplan con los requisitos estipulados. Este trabajo de investigación presenta la formulación de un modelo detallado de Port-Hamilton de un ventilador mecánico integrado con el sistema respiratorio humano. También se presentan las condiciones de interconexión y acoplamiento para los diversos subsistemas dentro del ventilador mecánico y el acoplamiento entre el ventilador mecánico y el sistema respiratorio humano . La discretización que preserva la estructura se proporciona junto con simulaciones numéricas y resultados. Se considera que los resultados obtenidos son comparables a los resultados presentados en la literatura. El trabajo futuro incluirá el diseño de controladore

Palabras clave: ventilador mecánico; Puerto-Hamiltoniano; sistema respiratorio humano; estructura de dirac

check for updates

Cita: Madahana, MCI; Ekoru, JED; Nyandoro, OTC Una novela Mixto de dimensiones finitas/infinitas Modelo Port-Hamiltoniano de un Ventilador Mecánico. Computación 2024, 12, 155. https://doi.org/10.3390/computation12080155

Editor académico: Simone Brogi

Recibido: 3 de mayo de 2024
Revisado: 23 de julio de 2024
Aceptado: 25 de julio de 2024
Publicado: 31 de julio de 2024

Copyright: © 2024 por los autores. Licenciatario MDPI, Basilea, Suiza. Este artículo es un artículo de acceso abierto. distribuido bajo los términos y condiciones de los Creative Commons Licencia de atribución (CC BY) (https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

1. Introducción

La Organización Mundial de la Salud (OMS) tiene en su lista modelo el “acceso al oxígeno” como uno de los elementos esenciales que requiere un individuo, especialmente cuando se encuentra en un estado crítico de salud y no puede respirar por sí solo. El oxígeno es el único medicamento incluido en la lista que no tiene sustituto. El acceso al oxígeno, incluso después de la pandemia mundial, sigue siendo un dilema importante en los países de ingresos medios y bajos [1]. Un ventilador mecánico es un dispositivo médico que se emplea para ayudar a los pacientes en los casos en que su sistema respiratorio no funciona bien y, por lo tanto, el paciente tiene dificultades para respirar o dificultad para respirar . También se puede utilizar un ventilador mecánico en los casos en que un paciente ha sido sedado y está siendo sometido a una cirugía.

El funcionamiento básico de un ventilador mecánico es controlar una región de alta presión durante la etapa de inspiración. En la etapa de inspiración, el ventilador mecánico se pausa. Durante la espiración, el aire sale debido al retroceso natural de los pulmones, lo que crea una mayor presión en los alvéolos. Debido a la gran demanda de ventiladores mecánicos tanto en el pasado como en la actualidad, es imperativo que se investiguen, modelen, diseñen e implementen ventiladores mecánicos eficientes y asequibles. Para garantizar el diseño de ventiladores mecánicos robustos, es importante formular nuevos modelos que puedan utilizarse en las etapas de investigación y prueba de ventiladores mecánicos.

Machine Translated by Google

1.1. Modelos matemáticos del sistema respiratorio

Las formulaciones matemáticas sólidas de la física subyacente del sistema respiratorio son muy importantes para comprender la anatomía y fisiología de los órganos. Las metodologías de modelado clásicas que emplean una perspectiva fisiológica o clínica se han utilizado anteriormente principalmente para el ajuste de datos para parámetros de modelos de un solo compartimento: por ejemplo, [2]. Por lo general, se considera matemáticamente que los pulmones humanos están formados por intrincadas redes ramificadas de tubos flexibles que abarcan una amplia gama de escalas y regímenes de flujo. El flujo puede ser un flujo altamente pulsátil o un proceso casi laminar dominado por la difusión. El flujo ingresa a una microestructura de tejido pulmonar similar a una esponja desde las ramas terminales de las vías respiratorias. El comportamiento del material del tejido pulmonar es muy no lineal y, para un intercambio gaseoso eficiente, la topología se optimiza con pequeños vasos sanguíneos incrustados. Los desarrollos actuales de la investigación en el modelado mecánico y matemático de los pulmones se han centrado principalmente en el estudio de efectos aislados que son difíciles de comprender y evaluar in vivo. Estos estudios buscan mejorar las imágenes médicas y el diagnóstico funcional y ayudar con la planificación y optimización del tratamiento específico del paciente. Bates [3] utilizó un enfoque de identificación de sistemas para proporcionar una descripción matemática de la mecánica pulmonar, con complejidades cambiantes en las formulaciones matemáticas. Esto iba desde compartimentos lineales únicos hasta modelos multicompartimentales generalizados. Maury [4] desarrolló aún más el concepto propuesto por Bates [3] y describió el pulmón como un árbol resistivo. Se han propuesto varios niveles de descripción , incluidos modelos agrupados con un pequeño número de parámetros descritos mediante ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO) hasta modelos de dimensión infinita basados en ecuaciones diferenciales parciales (EDD). También se han presentado las redes resistivas y cómo se pueden utilizar para investigar la dependencia de la resistencia pulmonar de las características geométricas . Se han proporcionado análisis de los distintos modelos desde una perspectiva teórica . Las técnicas de solución aproximada que se han proporcionado han mostrado una buena correlación con las mediciones experimentales. Otros investigadores que han propuesto trabajos similares son Burrowes et al. [5], Tawhai et al. [6], y Berger et al. [7]. Roth et al. también han realizado investigaciones . [8] utilizando ecuaciones de Navier-Stokes para el flujo de fluidos desde una perspectiva muy matemática. Este trabajo de investigación también proporciona representaciones de fluidos integrales y completamente resueltas computacionalmente de modelos respiratorios humanos o partes de los mismos. También se han formulado soluciones de las ecuaciones tridimensionales de Navier-Stokes en geometrías rígidas . La información de las imágenes médicas junto con el dominio de los fluidos se ha utilizado para formular efectos reales de interacción fluido-estructura [8]. Como enfoque para replicar los efectos reales de la estructura del fluido, se han desarrollado y publicado técnicas que demuestran este concepto en el dominio de los fluidos mediante la aplicación de datos de información de imágenes médicas. Para cuantificar la deposición de partículas o la administración de fármacos en las vías respiratorias superiores e inferiores y para investigar patrones en los pulmones, como chorros o vórtices, se puede utilizar un modelo de fluido completamente resuelto. Estos modelos son muy complejos y, en la mayoría de los casos, sólo se investigan partes del sistema respiratorio humano, eliminando así el importante impacto de todo el órgano. Un modelo holístico del sistema respiratorio humano requiere una representación consistente y fisiológicamente realista de la mecánica respiratoria, además de los aspectos puramente mecánicos o estructurales, porque la física básica de la mecánica respiratoria se rige por la interacción del fluido con la anatomía. El funcionamiento normal del pulmón es posible debido a la deformación de los músculos asociados, el árbol de las vías respiratorias y el tejido pulmonar. De hecho, las propiedades de los tejidos influyen en el flujo de aire y en los procesos que ocurren durante el transporte aéreo: por ejemplo, durante el intercambio gaseoso o el transporte de aerosoles.

1.2. Trabajos relacionados

Tran et al. [9] realizaron un trabajo de investigación con el objetivo principal de diseñar, controlar, modelar y simular un ventilador mecánico que sea liviano, portátil y adecuado para su uso en el hogar. Tran et al. [9] modelaron un ventilador mecánico como fuente de voltaje.
El-Hadj et al. [10] aplicaron la interacción fluido-estructura (FSI) para acoplar la dinámica de fluidos computacional utilizada para el flujo de fluidos con el análisis de elementos finitos para el dominio sólido. Esto facilitó la investigación del comportamiento de los fluidos, el comportamiento estructural y las interacciones. Dos

Machine Translated by Google

Se propusieron diseños para el ventilador mecánico. Se informó que el primer diseño era incontrolable y el segundo considera la dinámica de fluidos computacional (CDF) con un límite móvil aplicado a un ventilador basado en un cilindro de pistón. Tharton et al. [11] diseñaron y desarrollaron un prototipo de ventilador para ser utilizado por profesionales en emergencias médicas y en cualquier otro contexto donde el ventilador habitual no esté disponible. Se modeló un ventilador mecánico utilizando un mecanismo de manivela basculante para cumplir con los requisitos específicos del diseño de un ventilador mecánico. Pivk y col. [12] desarrollaron un modelo empírico para un ventilador mecánico de bajo costo observando la respuesta de cada uno de los subsistemas del ventilador. Los avances actuales realizados a nivel mundial en el desarrollo de diseños asequibles y eficaces son importantes. Sin embargo, la investigación sobre el desarrollo de ventiladores mecánicos carece de desarrollo de modelos. El enfoque de Port-Hamilton aplicado en este trabajo de investigación actúa como plantilla de modelado para el futuro modelado y diseño de ventiladores mecánicos basados en energía. El modelado lagrangiano y el enfoque de Kane no enfatizan el enrutamiento de energía en el sistema a través de una estructura de Dirac. El método de Kane también está limitado con respecto al modelado de la interacción de fluidos entre el ventilador mecánico y el sistema respiratorio humano. Es importante desarrollar diseños que se basen en una comprensión sólida de un aspecto importante del diseño. Naggar [13] desarrolló un modelo por partes de un ventilador mecánico que describe el comportamiento artificial de un ventilador mecánico.

Se creó y simuló un ventilador controlado por presión. El ventilador mecánico se modeló utilizando una función periódica con desigualdades para controlar el inicio de los períodos de inspiración y espiración. Shi et al. [14] desarrollaron un modelo matemático de ventilación mecánica controlada por volumen. El modelo se considera un sistema neumático en el que el ventilador se considera un compresor de aire. La válvula de exhalación se considera un acelerador. El compresor y el contenedor representan el ventilador. Naggar et al. [15] propusieron un modelo matemático integrado del ventilador mecánico y el pulmón.
Se utilizaron ecuaciones lineales cuadráticas y exponenciales para modelar el sistema. El modelo integrado se utilizó para simular la ventilación artificial controlada por volumen. Giri et al. [16] propusieron un diseño simplificado de un ventilador mecánico para reducir costos y automatizar el proceso de ventilación mecánica. El diseño propuesto fue simulado en la plataforma MATLAB. Hannon et al. [17] revisó el progreso en el modelado matemático y la simulación de la anatomía, fisiología y fisiopatología humanas utilizando computadoras en el contexto de la ventilación mecánica. Este estudio enfatizó las aplicaciones clínicas de simulaciones por computadora en diversos estados patológicos. El trabajo de investigación analizó más a fondo las limitaciones actuales y la posibilidad de realizar modelos in silico. Actualmente no existen modelos Port-Hamiltonianos
de ventiladores mecánicos.

1.3. Aplicaciones de los modelos de ventilador mecánico integrado y sistema pulmonar humano

Se pueden utilizar modelos integrados de ventilador mecánico y sistema pulmonar humano para simular el comportamiento del sistema respiratorio y estudiar los efectos de la ventilación mecánica sobre la función pulmonar. Estos modelos tienen varias aplicaciones en la investigación, la educación y la práctica clínica. En general, los modelos integrados de ventilador mecánico y sistema pulmonar humano proporcionan una herramienta valiosa para comprender el comportamiento del sistema respiratorio bajo ventilación mecánica y para desarrollar estrategias mejoradas para el diagnóstico y tratamiento de trastornos respiratorios. Las subsecciones siguientes proporcionan ejemplos de aplicaciones de modelos integrados del ventilador mecánico-sistema respiratorio. En Mehedi et al. [18], el sistema respiratorio se modeló como una combinación del sistema del paciente con manguera y ventilador con distensibilidad pulmonar no lineal. Actualmente existen muy pocos estudios que hayan realizado simulaciones durante la espiración ya que durante la espiración se requiere la disponibilidad de almacenamiento para el volumen inhalado .

1.4. Motivación del enfoque Port-Hamiltoniano

Tanto el ventilador mecánico como el sistema respiratorio humano son de naturaleza multifísica (contienen componentes de diversos dominios de la física). Como tal, un enfoque más adecuado para comprender la manera en que funcionan estos sistemas, el acoplamiento entre

Machine Translated by Google

ellos, etc., y, además, mejorar la eficiencia de la ventilación mecánica, es utilizar modelos que representen mejor estos sistemas. Por lo tanto, un enfoque de modelado más representativo sería tener en cuenta la naturaleza multifísica de estos sistemas [19,20].

El enfoque de Port-Hamilton para modelar sistemas integrados tiene varios beneficios, entre ellos [19,20]: 1. El enfoque de Port-

Hamilton es modular y se basa en la topología del ventilador mecánico y el sistema respiratorio humano. Por lo tanto, se pueden simular/probar numéricamente varios tipos de ventiladores mecánicos y sistemas respiratorios humanos con diferentes estructuras/topologías en diversas condiciones operativas para analizar el rendimiento, etc. [19,20].

2. La naturaleza modular del método Port-Hamilton, junto con su base en la teoría de grafos, significa que se puede proceder a desarrollar software para automatizar el modelado de varios tipos de topologías de ventilador mecánico/sistema respiratorio humano [19,20].
3. Propiedades como la pasividad del ventilador mecánico integrado-respiración humana. El sistema estadístico puede mostrarse y estudiarse [19,20].

Actualmente, no existen modelos de sistemas MT-paciente basados en energía que puedan usarse en sistemas que tengan disipación de energía desde los puertos. Los sistemas dinámicos complejos se pueden modelar y controlar en el marco de Port-Hamilton porque el marco proporciona una herramienta poderosa para el análisis, modelado y control de dichos sistemas. Los atributos clave del marco Port-Hamiltoniano (pH) son: En primer lugar, se basa en el método de modelado de gráficos de enlaces multidominio, que conecta varios elementos físicos a través de puertos. La interconexión en el método Port-Hamiltoniano es tal que existe conservación de energía. En segundo lugar, se asigna importancia a las variables de energía, así como a la energía total almacenada, lo que también se conoce como hamiltoniano y es la base para el modelado de sistemas multifísicos. El enfoque de Port-Hamilton proporciona la base para comprender la transferencia de energía en los diversos dominios físicos que gobiernan el sistema respiratorio. Se pueden obtener datos muestreados cuando se explota y preserva la estructura de Port-Hamilton en discretización. Este trabajo de investigación aplica el enfoque del sistema Port-Hamiltoniano para modelar el sistema respiratorio humano MV. El modelo resultante muestra explícitamente el almacenamiento de energía, la disipación de energía y la interconexión subyacente al sistema. El modelo Port-Hamiltoniano obtenido tiene numerosas aplicaciones: por ejemplo, puede aplicarse en el diseño de diversos dispositivos médicos y para el diagnóstico de enfermedades respiratorias.

La principal contribución de este trabajo de investigación es el desarrollo de una representación integrada del modelo Port-Hamiltoniano de un ventilador mecánico- sistema respiratorio humano. El modelo consta de componentes electromecánicos y electromagnéticos modelados en una representación de dimensión finita e interconectados con componentes fluidos en una representación de dimensión infinita. Como resultado, este modelo de Port-Hamilton es de naturaleza mixta de dimensiones finitas/infinitas. El resto de este artículo está estructurado de la siguiente manera: los materiales y métodos se describen en la Sección 2, las Secciones 3 y 4 presentan el modelo Port-Hamiltoniano detallado de un ventilador mecánico y el subsistema de válvula solenoide. Las secciones 5 y 6 brindan la topología de la red modelo y la interconexión del modelo con condiciones de acoplamiento. Las secciones 7 y 8 muestran la discretización, los resultados y la discusión que preservan la estructura. Finalmente, las conclusiones y recomendaciones se presentan en la Sección 9.

2. Materiales y Método

Esta sección presenta los preliminares matemáticos del enfoque de Port-Hamilton que se siguen en secciones posteriores. Estas definiciones son definiciones estándar de la literatura y en su mayoría se derivan de las siguientes referencias: [21-23].

Machine Translated by Google

Definición 1. (Estructura de Dirac):
Una estructura de Dirac (DS) es un par de elementos, f $\overset{n}{R}$ y mi R $\overset{n}{}$, que satisface el conjunto:

$$D \quad \{(f, e) \quad D, (f, \hat{e}) \quad D \quad e^{T\hat{f}} \quad -\hat{e}^{t} f\}.$$

El DS es un subconjunto D F × E, donde F y E representan los flujos y esfuerzos, respectivamente.

El DS en circuitos eléctricos se puede representar como:

Proposición 1. El subespacio

$$re \quad r \overset{n}{} \times R \overset{n}{},$$

se llama DS si y sólo si existe A, B R $\overset{n\times n}{}$ tal que

$$ABT + ABT \quad 0 \text{ y rango}(AB) \quad n,$$

satisfaciendo la condición

$$re \quad \{(f, e) \quad R \overset{n}{} \times R \overset{n}{} \quad Af \quad -Be\}.$$

Definición 2. (Relación Resistiva).
Cualquier relación R $R^{n} \times R^{n}$ se dice que es resistivo si $(fR, eR) \quad R$,

$$\overset{te}{R} fR \leq 0,$$

está satisfecho.

Definición 3. (Sistema Port-Hamiltoniano (pH)): El
conjunto (D, L, R) define un sistema de pH donde:

• D (FL × FR × FP) × (EL × ER × EP) es un DS; • L FL ×
EL es un LS; • R FR × ER
una relación resistiva.

Los elementos de los

conjuntos: • FL R nL y EL R nL se conocen como flujos y
esfuerzos; • FR R nR y ER R nR se conocen como flujos y esfuerzos
resistivos; • FP R nP y EP R nP se conocen como flujos y esfuerzos externos,

respectivamente. donde nL, nR y nP N0.

La dinámica del sistema de pH está dada por la inclusión diferencial:

$$\left(-\frac{d}{dt} x(t), fR(t), fP(t), eL(t), eR(t), eP(t)\right) \quad D,$$

donde (x(t), eL(t)) L, (fR(t), eR(t)) R, y (fP(t), eP(t)) P.

Definición 4. (Interconexión de n sistemas de pH):
Sea (Di , Li , Ri) el espacio del i-ésimo sistema de pH en un conjunto de n sistemas de pH que se van a interconectar. El espacio de flujos se divide en una parte externa y una parte a vincular y está dado por

$$Fi \quad FLi \times FRi \times FPi \times FPlink.$$

De igual forma, el espacio de esfuerzos se divide en una parte externa y una parte a vincular y se expresa como:

$$Ei \quad FLi \times ERi \times EPi \times EPenlace.$$

Machine Translated by Google

La interconexión de dos sistemas de pH (D1, L1, R1) y (D2, L2, R2) respecto al enlace (FPlink, EPlink) da como resultado un nuevo sistema de pH interconectado: (D, L, R). Este sistema interconectado viene dado por la expresión:

(D1, L1, R1) • (D2, L2, R2) (D, L, R).

Definición 5. (Gráfico dirigido): Un gráfico dirigido es un cuádruple G (V, E, l, r), donde 1. V es un conjunto de vértices; 2. E es un conjunto de aristas; 3. l E → V asigna cada arista, e, a un vértice inicial; 4. r E → V asigna cada arista, e, a un vértice terminal.

Definición 6. (Gráfico dirigido sin bucles): Si G es un gráfico dirigido, entonces se dice que G es libre de bucles si para todo e E,

$$l(mi) \neq r(mi).$$

Definición 7. (Subgrafos). Dados los gráficos G (V, E, l, r) y G E y V′ ′ (V′, mi′, l, r), luego G′ se dice que es un subgrafo de G′ si ′ V. Además, E 1. Se dice que un subgrafo es un subgrafo inducido en V′ si E′ E 2. Se dice que un subgrafo se ′V ; extiende si V′ V; 3. Se dice que un subgrafo es un subgrafo propio si E′ ≠ E; Si tanto V como E son finitos, entonces se dice que G 4. es finito.

Definición 8. (Trayectos, conectividad y ciclos): Sea G (V, E, l,r) un grafo finito dirigido.

1. Una n-tupla e (e1, . . . ,en) (E −E) n se llama camino de u a si l(e1), . . . , l(en) son distintos;
   (a) r(ei) l(ei+1) para todo i {1, . . . ,
   (b) norte - 1}; l(e1) u r(en) .
   (c)
2. Un camino de u a u se llama ciclo.
3. Se dice que dos vértices, u y , están conectados si existe un camino de u a .
4. La existencia de caminos desde los vértices da una relación de equivalencia en el conjunto de vértices.
5. Un subgrafo es un componente del gráfico.
6. Se dice que un gráfico con un solo componente es conexo.

Definición 9. (Matriz de incidencia): Sea G (V, E, l,r) un grafo dirigido, finito y sin bucles tal que E e1, . . . ,em y V u1, . . . , un. Entonces la j-ésima fila y la k-ésima columna de la matriz de incidencia A0 R de G están dadas por $n \times m$

$$a_{jk} = \begin{cases} 1 & l(ek) = uj, \\ -1 & r(ek) = uj, \\ 0 & \text{en caso contrario.} \end{cases}$$

Si rango(A0) n − k, entonces el gráfico G tiene k N componentes, de modo que se pueden eliminar k filas de A0, lo que da como resultado una matriz con el mismo rango.

Machine Translated by Google

Definición 10. (Estructura de Kirchhoff-Dirac, subvariedad de Kirchhoff-Lagrange): Por tanto, la estructura de Kirchhoff-Dirac de G puede definirse mediante el conjunto

$$D^{S}_{k}(G) \quad \{(j, i, , u) \quad R^{n-S} \times R^{\text{metro}} \times R^{n-S} \times R^{m} \; 0 \; [A(ji) + [IA(0\,0u]) \quad 0\}, \tag{1}$$

donde i y u son las corrientes y voltajes, respectivamente, en los bordes del gráfico, mientras que q y son las cargas y potenciales, respectivamente, en los vértices del gráfico, respectivamente.

Suponiendo que S {v1, . . . , v S }, la subvariedad de Kirchhoff-Lagrange de G con respecto a S se define como

$$I^{S}_{k}(G) \quad 0 \times R^{n-S} \quad R^{n-S} \times R^{n-S}, \tag{2}$$

donde G (V, E, I, r) es un grafo dirigido que es finito; 1. 2.

No tiene bucles; 3. Tiene una matriz de incidencia A0 R n×m.

Si G1, . . . ,Gk son los componentes de G con sus correspondientes vértices V1, . . . , Vk V de modo que exista un subconjunto S V tal que S contenga como máximo un vértice de cada componente, , (n−k)×m S, i ≤ k Vi v, w , entonces A R puede construirse mediante eliminando es decir, s,s las filas correspondientes a los vértices S de A0 R n×m.

Observación 1. Según la Proposición 1, las Ecuaciones (1) y (2) indican que DS (G) es$_k$ (G) es un DS y I^{S}_{k} un LS en el espacio R n− S × R n− S .

La definición 10 se refiere a la introducción de un sistema de pH $_k$ (G), L^{S}_{k} (G), {0}) con (dinámica DS :

$$d(-\overline{q}(t), i(t), \quad (t), u(t)) \quad D\,dt \quad {}^{S}_{k\,(\text{GRAMO}),} \tag{3}$$

donde (q(t), (t)) $L^{S}_{k\,(\text{GRAMO}),}$

Usando la equivalencia de (q(t), (t)) L^{S}_{k} (G) a q(t) 0 y (t) R n− S, vemos eso La ecuación (3) se cumple si y sólo si esta condición se cumple:

$$q(t) \quad 0 \quad Ai(t) \quad 0 \quad A^{T} \quad 2(t) \quad -u(t).$$

$$\text{ajl} \begin{cases} 1 & \text{el Cj con orientaciones que coinciden,} \\ -1 & \text{el Cj con orientaciones que no coinciden,} \\ 0 & \text{en caso contrario.} \end{cases}$$

Sobre esta base, se puede definir un DS

$$D'_{k}(G) \quad \{(j, i, , u) \quad R^{n-S} \times R^{\text{metro}} \times R^{n-S} \times R^{m} \; 0 \; [A(ji) + [IA(0\,0u]) \quad 0\},$$

con dinámica

$$\left(-\frac{d}{dt}\psi(t), i(t), \imath(t), u(t)\right) \quad D' \quad {}_{k\,(\text{GRAMO}),}$$

y un LS

$$I'_{k\,(\text{GRAMO})} \quad \{0\} \times R^{n-m+k},$$

Machine Translated by Google

con dinámica

$$(\psi(t), \imath(t)) \quad L \quad {}'_{k}{}^{(GRAMO).}$$

Juntos forman un sistema de pH definido por el conjunto $(D' \quad {}_{k}(G), L \quad {}'_{k}(G), \{0\})$.

Estructura de Dirac

Una característica clave de una estructura Dirac es el hecho de que la composición estándar de dos estructuras Dirac es nuevamente una estructura Dirac. La implicación de esta afirmación es que cualquier interconexión de un sistema Port-Hamiltoniano que conserve energía es también un sistema Port-Hamiltoniano en sí mismo. Esto constituye la característica fundamental del enfoque de Port-Hamilton para el modelado, la simulación y el control de sistemas físicos complejos. La intrincada estructura de Dirac es la guía para las restricciones algebraicas del sistema interconectado, así como para sus funciones de Casimir [23]. Las funciones de Casimir son importantes para la regulación del punto de ajuste de los sistemas Port-Hamiltonianos. El marco del enfoque Port-Hamiltoniano permite la modelización basada en puertos. El modelado basado en puertos significa que estamos interconectando muchos elementos diferentes a través de puertos. Las estructuras de Dirac son las herramientas que se utilizan para conectar múltiples elementos. Estos diversos elementos son elementos que almacenan energía, elementos que disipan energía y elementos externos que pueden suministrar energía. En la Figura 1 [23] se muestra un diagrama para demostrar la estructura de conexión .

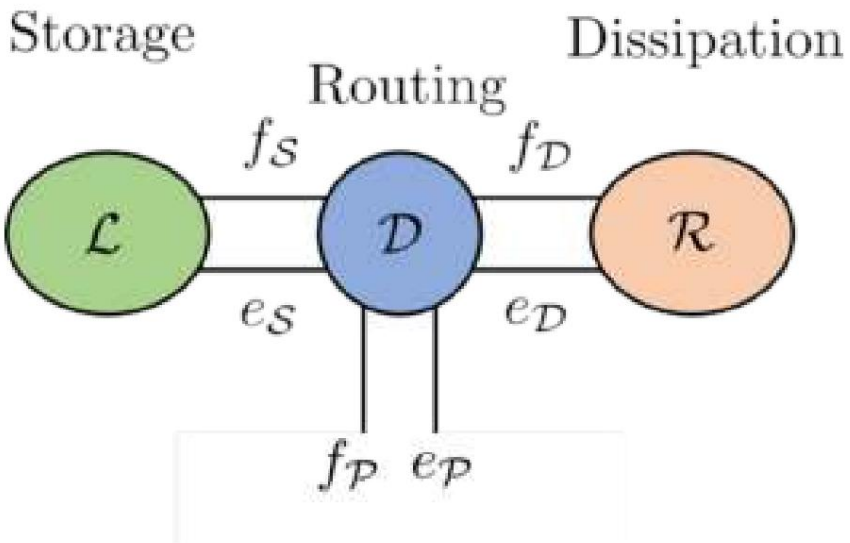


Figura 1. Almacenamiento, enrutamiento y disipación de energía.

3. Modelo Port-Hamiltoniano detallado de un ventilador mecánico 3.1. Descripción

del sistema

El diagrama general del sistema de ventilación mecánica se proporciona en la Figura 2. Todo el sistema consta de varios subsistemas. En este trabajo de investigación se discute el principal subsistema que contribuye al flujo de aire y, en consecuencia, a la presión del aire. Por lo tanto, se discutirán los siguientes subsistemas principales: el subsistema de motor de corriente continua, el subsistema de bomba de turbina/soplador, el subsistema de eje de bomba/impulsor y el subsistema de válvula solenoide.

Machine Translated by Google

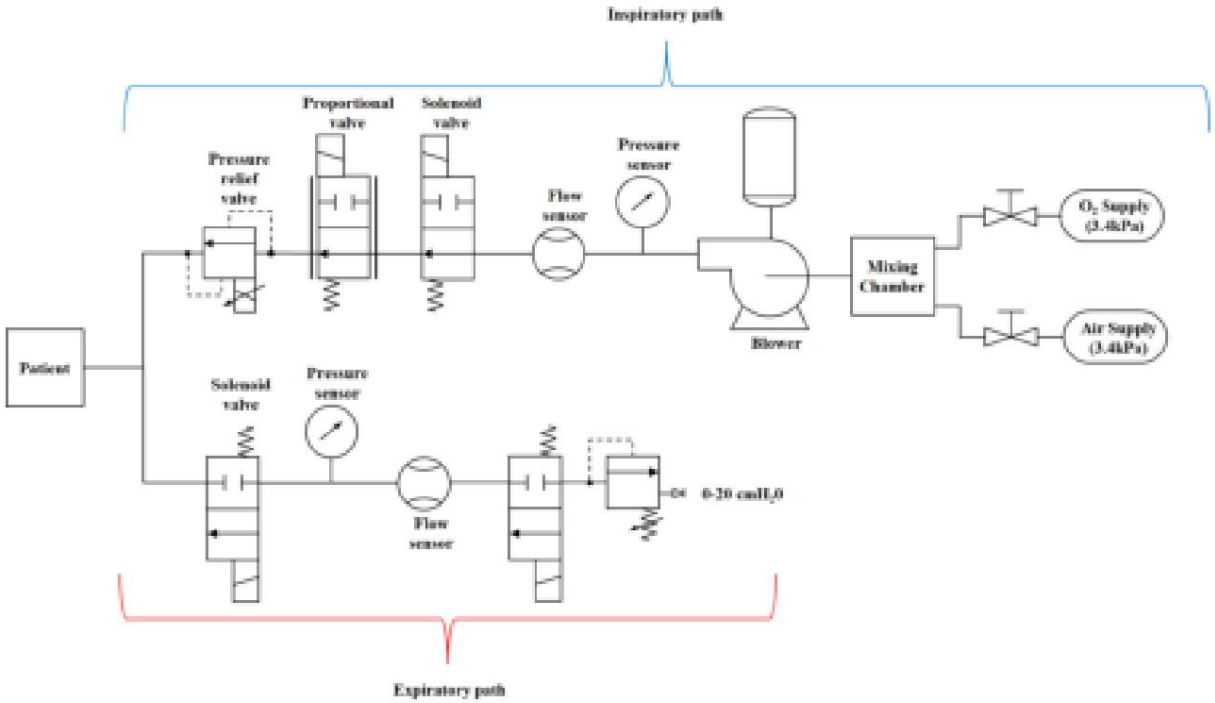


Figura 2. Diagrama esquemático de un ventilador mecánico.

3.2. Modelo de soplador

En esta sección, las ecuaciones del modelo de sistema dinámico para el modelo de soplador se presentan en el marco de Port-Hamilton. El modelo de soplador comprende tres subsistemas: a saber, un motor de CC que impulsa el eje del soplador/impulsor, un eje del soplador/impulsor que acopla el motor de CC al fluido utilizando el movimiento de rotación del motor para acelerar el fluido, y finalmente, el fluido que se impulsa.

Desde la perspectiva de Port-Hamilton, el vector de estado Xb R 4 está dada por:

$$Xb \quad [pm, \quad m, Pb , Qb] \quad , \tag{4}$$

donde pm R 1 y m R 1 son el momento angular y el flujo magnético de la CC y Qb motor, respectivamente, mientras que Pb 1 R son la presión y el caudal del R soplador, respectivamente.

La energía total del soplador viene dada por el hamiltoniano:

$$Hb \quad Xb \quad \frac{1}{2} \frac{2}{(pag \cdot oy} + \frac{2}{Lm} + CbP_b^2 + IbQ_b^2), \tag{5}$$

donde estoy R 1 + es la inercia y Lm R 1 + es la inductancia del motor DC, mientras que Cb R 1 + y lb R 1 + son la capacitancia hidráulica y la inertancia del aire en el soplador, respectivamente.

Por tanto, el modelo Port-Hamiltoniano de un soplador viene dado por

$$\dot{x}_b \quad (Jb - Rb) \quad Hb \quad Xb \quad + Gbub , b \tag{6}$$

$$Yb \quad G \quad Hb \quad Xb \quad , \tag{7}$$

Machine Translated by Google

dónde

$$Jb = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -(Ko\ pm)/Estoy \\ -Km & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/(Cb\ lb)\ 0 \\ (Ko\ pm)/Estoy\ 0 & -1/(Cb\ lb) & \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{4\times4},$$

$$Rb = diag([bm\ Rm\ 0\ (Rb\ pm)/(lb\ lm)]) \in \mathbb{R}^{4\times4},$$

$$Hb\ Xb = [pm/Im \quad m/Lm \quad CbPb \quad lbQb\ ] \in \mathbb{R}^{4\times1},$$

$$Gb = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & (1/libra) \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{4\times3},$$

$$ub = [\ Vm\ Qin\ Pin\ ] \in \mathbb{R}^{3\times1},$$

donde $Km \in \mathbb{R}^{+}$ es la constante de par del motor, $bm \in \mathbb{R}^{+}$ es el amortiguamiento viscoso, $Rm \in \mathbb{R}^{+}$ es es la resistencia del inducido y $Ko \in \mathbb{R}^{+}$ es la constante de acoplamiento de momento angular/presión del motor . Las entradas al sistema son el voltaje del motor de CC, el caudal volumétrico de entrada y la presión, que están dadas por $V \in \mathbb{R}$ y $Pin \in \mathbb{R}$ pueden mostrar fácilmente que Jm^{-1}, $Qin \in \mathbb{R}^{-1}$, respectivamente. Uno $_{metro}$ y $Rm \in \mathbb{R}_{metro}$

Tomando la derivada del tiempo del hamiltoniano se obtiene

$$\dot{H}_b = \chi_b\ ub\ Yb - Hb\ Xb\ (Rb\ Hb\ Xb\ ). \tag{8}$$

Este sistema tiene puertos de potencia y resistivos.

4. Subsistema de válvula solenoide

La Figura 3 muestra una válvula solenoide en las posiciones abierta y cerrada. Se supone que los entrehierros son lo suficientemente pequeños como para que el efecto de franja del flujo magnético sea insignificante. Considere un solenoide en el que la permeabilidad del núcleo y la longitud de la parte del circuito magnético dentro del núcleo se denotan por $\mu c \in \mathbb{R}^{+}$, y $lc \in \mathbb{R}^{+}$, respectivamente. La longitud equivalente del circuito magnético del solenoide $leq : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ depende del desplazamiento del carrete $qs \in \mathbb{R}$ y se puede escribir como:

$$leq(qs) = lc + (qstot - qs), \frac{\mu c}{\mu 0} \tag{9}$$

donde $\mu 0 \in \mathbb{R}^{+}$ es la permeabilidad del aire y $qstot \in \mathbb{R}^{+}$ es el entrehierro total. El sistema de coordenadas del solenoide se representa en la Figura 4. Por lo tanto, la inductancia del solenoide varía con el desplazamiento del carrete y, por lo tanto, puede expresarse mediante la función $Ls : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ dada por:

$$Ls(qs) = \frac{N2Ae\mu c}{leq(qs)}, \tag{10}$$

donde $norte \in \mathbb{R}^{+}$ es el número de vueltas de la bobina del solenoide, y $Ae \in \mathbb{R}^{+}$ es el área de la sección transversal efectiva de la trayectoria del flujo magnético. Por lo tanto, los subsistemas magnético y mecánico de la electroválvula están acoplados magnéticamente debido a la dependencia de la inductancia del desplazamiento del pistón.

Machine Translated by Google

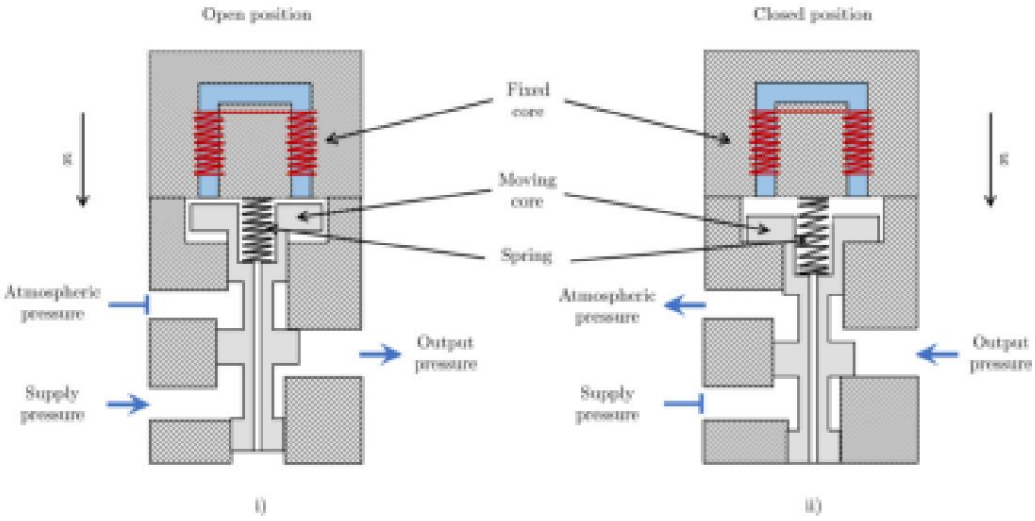


Figura 3. Diagrama de una válvula solenoide en (i) la posición abierta, que permite el flujo de fluido, y (ii) la posición cerrada, que detiene el flujo de fluido.

La energía total del solenoide viene dada por el hamiltoniano Hs R ^{3} → R, que es y una función del vector de estado Xs [s , ps , qs] ^{3} R se expresa como la suma de los energías magnética, cinética y potencial, que se denotan por Hmagnetic s , qs R ^{2} → R, Hkinetic ps R → R y Hpotential qs R → R, respectivamente. De este modo,

$$Hs\ Xs \quad Hmagnético \quad s , qs \quad + Hcinético \quad ps \quad + Hpotencial \quad qs \quad , \tag{11}$$

dado un flujo magnético s R.

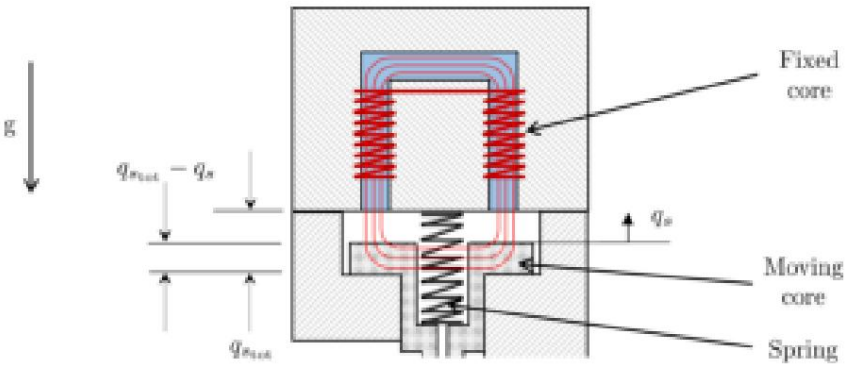


Figura 4. Sistema de coordenadas del solenoide.

Suponiendo que la pretensión del resorte se establece en q0 R, el hamiltoniano es

$$Hs\ Xs \quad \frac{1}{2}\left(\frac{2}{L}\frac{s}{qs} + \frac{2}{EM}\frac{pag}{s} + ks(qs + qs0)^{2}\right) + msqsg, \tag{12}$$

donde ps R es el momento del carrete, ms R la rigidez $^{1}_{+}$ es la masa del carrete, ks R es la $^{1}_{+}$ es el del resorte y g R $^{1}_{+}$ aceleración de la gravedad.

Por lo tanto, el estado del solenoide y la dinámica de salida se expresan en Port-Hamiltonian forma en las ecuaciones (13) y (14), respectivamente:

$$\dot{s} \quad (Js - Rs)\ Hs\ Xs + Gsus , \tag{13}$$

$$Ys\ G \quad s \quad . \tag{14}$$

Machine Translated by Google

dónde

$$J = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad Rs = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & bs & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad G = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & (As1 - As2) \\ 0 & (As3 - As4) \end{bmatrix},$$

$$\frac{\partial}{\partial s} = \begin{bmatrix} 0 & \frac{\partial}{\partial s} \\ \frac{\partial}{\partial s} & 0 \end{bmatrix}, \quad \frac{\partial}{\partial s} = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial s} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial s} \end{bmatrix}, \quad Hs = \begin{bmatrix} \frac{1}{AeN2\mu c(lc - \frac{PD}{EM})} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\mu c(qs-qstot)} \\ & \mu 0 \end{bmatrix},$$

$$Xs = \begin{bmatrix} \frac{AeN^2 \mu c \mu 0}{(\mu 0\, lc - \mu c(qs-qstot))^2} + ks(qs + qs0) + mensaje \\ qs \end{bmatrix},$$

donde $Rs = R^{+}$ es la resistencia de la bobina, $bs = R^{+}$ es la amortiguación viscosa que actúa sobre las distintas áreas de la sección transversal y $\frac{\partial}{\partial s}$ es el operador de gradiente. As1, As2 $= R^{+}$ de las superficies del carrete, y el vector de entrada $us = R^{2}$ consiste en el voltaje de entrada $Vs = R^{1}$ y la presión de suministro $ps = R^{1}$. Se puede ver que $Js = -J^{T}$ es $s = R^{3\times3}$ posee sesgo $R^{3\times3}$ semidefinido positivo.

Tomando la derivada temporal del hamiltoniano se obtiene:

$$H^{\cdot} = \chi s \quad us \quad Ys - Hs \quad Xs \quad (Rs \quad Hs \quad Xs). \tag{15}$$

Este sistema tiene puertos de potencia y resistivos.

4.1. Modelo de tubería

En esta sección se desarrolla un modelo Port-Hamiltoniano de un solo segmento de tubería. La base de estos desarrollos son las ecuaciones de Navier-Stokes para el flujo unidimensional no estacionario de gas en una tubería. Para simplificar el modelo se toman las siguientes suposiciones [24,25]: 1. La tubería se considera rígida (la sección transversal no se expande como resultado del flujo de fluido).

2. Se desprecian los efectos de fricción y gravitacionales (esto se suavizará en trabajos futuros en esta área de investigación).
3. Los parámetros del modelo del gas permanecen constantes a lo largo de la sección transversal de la tubería, pero varían con el tiempo a lo largo de la longitud de la tubería. Por tanto, se pueden promediar respecto de la sección transversal y, por tanto, el flujo de gas es unidimensional.
4. Se supone que las temperaturas de las paredes de la tubería son constantes e iguales a la temperatura ambiente. Por tanto, se ignoran los efectos de la temperatura.

Teniendo en cuenta estas suposiciones, el sistema de coordenadas adjunto a un segmento de tubería se ilustra en la Figura 5. Por lo tanto, para un intervalo de tiempo dado $ts \le t < tf$ con tiempo de inicio ts y tiempo de finalización tf, el sistema unidimensional de Euler normalizado en longitud ecuaciones para gases con densidad $\rho(t, z) \quad (ts, tf \quad \times (0, \ell) \to R$ a través de una tubería de longitud $\ell \quad R^{+}$ fluyendo a una velocidad $v(t, z) \quad (ts, tf \quad \times (0, \ell) \to R \quad R^{+}$ y área de sección transversal $Ap \quad R^{+}$ están dados por:

$$\partial t(\rho Ap) + \partial z(\rho Apv) \quad 0, \tag{16}$$

$$\partial t(\rho Apv) + \partial z(\rho Apv^{2} + pAp) \quad 0, \tag{17}$$

donde $p(t, z) \quad (ts, tf \quad \times (0, \ell) \to R$ es la presión, y $\partial i \quad \partial/\partial i$ es la derivada parcial con respecto a las variables temporales y espaciales dadas por los subíndices yo $\{t, z\}$.

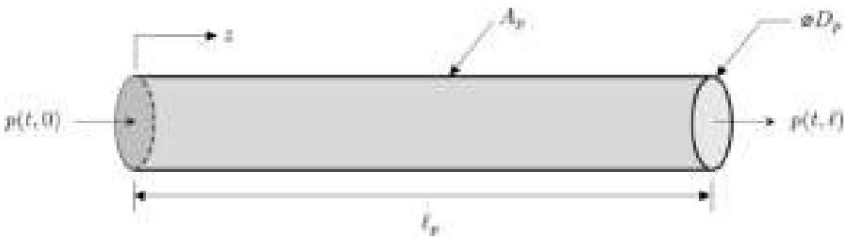


Figura 5. Sistema de coordenadas del segmento de tubería.

Machine Translated by Google

Formulación de Port-Hamilton del modelo de flujo en tuberías La

dinámica de fluidos se puede escribir en términos de masa por unidad de longitud, es decir, ρAp, como así como el momento del fluido, m v. Por lo tanto, las ecuaciones (16) y (17) se pueden expresar como

$$\partial t \quad -\partial zm, \tag{18}$$

$$\partial tm \quad -\partial z(\frac{m2}{} + pAp), \tag{19}$$

Definir el vector de estado del flujo de gas a través de un segmento de tubería como χp m], la energía de el gas se puede expresar en forma de hamiltoniano Hp[χp] R $^{2\,1\to R}$ dado por

$$Hp[\chi p] \quad \int_0^{\ell} Hp[\chi p]\,dx \quad \int_0^{\ell} (\frac{m2}{2} + \quad U[\quad /Ap])\,dx, \tag{20}$$

donde Hp $^{2\,1\to R}$ R es la densidad hamiltoniana y U $^{1\,1\to R}$ R es la energía interna del gas, que, en el caso de un fluido isentrópico, se puede expresar en función de la densidad.

La dinámica Port-Hamiltoniana toma la siguiente forma:

$$\partial t\chi p \quad J\,[\chi p]\delta\chi pHp[\chi p], \tag{21}$$

donde J [χp], que es el operador formalmente simétrico sesgado, y δχpH[χp], que es la derivada variacional de la densidad hamiltoniana, se expresan como

$$J\,[\chi p] \quad -[\,0\partial z\partial z0]\delta\chi pHp[\chi p] \qquad , \tag{22}$$

donde h es la entalpía y J [χp] es un operador formalmente simétrico sesgado.

La tasa de cambio del hamiltoniano se puede encontrar como

$$H^{\cdot}_{\text{arriba}} \quad pip, \tag{23}$$

dónde

$$\text{arriba} \quad WBRext[\,\delta\chi pHp\,{}_{\ell}\,]\ \text{yp} \quad WCRext[\quad \delta\chi pHp\,{}_{\ell}\,], \tag{24}$$

con componentes dados por

$$WB \quad \frac{1}{\sqrt{2}}[\,0\ 1\ 0\ 1\ 0\ 1\ 1\ 0], \text{ baño} \quad \frac{1}{\sqrt{2}}[\,0\ 1\ 1\ 0\ 1\ 0\ 0\ -1\,], \text{Rext} \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \qquad ,$$

y

$$\delta\chi pHp\,{}_{0} \quad \begin{pmatrix} (h - \frac{2}{2}) \\ (\overline{\text{metro}}) \end{pmatrix}_{0} \quad .$$

$$[\,\delta\chi pHp\,{}_{\ell}\,] \quad \begin{pmatrix} (h - \frac{2}{2}) \\ (\overline{\text{metro}}) \end{pmatrix}_{\ell}$$

Machine Translated by Google

Expandiéndose hacia arriba y yp da

$$\text{arriba} \quad \frac{(\overline{m})_{\ell}^{2}}{(h - \frac{\overline{metro}}{2}2)_0} \quad \text{y yp} \quad \frac{(h - \frac{\overline{metro}}{2}2)_{\ell}^{2}}{-(\overline{metro})_0} . \tag{25}$$

Por tanto, la tasa de cambio del hamiltoniano es

$$\dot{H}_{\text{pag}} \quad \frac{m2}{(h - \overline{2\ 2})_{\ell}} \frac{(\overline{m})_{\ell}}{-(\overline{metro})_0} \frac{m2}{(h - \overline{2\ 2})_0} . \tag{26}$$

4.2. Modelo de circuito eléctrico del pulmón.

En este artículo se presenta la formulación de Port-Hamilton para circuitos eléctricos no lineales. sección. Dado que el enfoque principal de este artículo es un modelo de ventilador mecánico, el modelo de pulmón se simplifica considerando una analogía de un circuito eléctrico. El modelo considerado es el de un paciente completamente sedado que depende completamente del ventilador mecánico para respirar. El modelo de circuito se muestra en la Figura 6. El circuito se puede representar en forma de Gráfico de red usando la teoría de grafos. La gráfica del circuito dada en la Figura 6 se da en Figura 7. El modelo tiene n V 7 vértices.

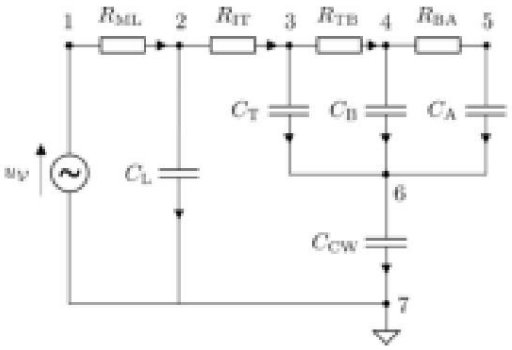


Figura 6. Diagrama de circuito de un modelo eléctrico de un pulmón de un paciente completamente sedado [26].

La gráfica completa del circuito, A0, es

$$\begin{array}{c} \\ \\ \\ \text{A0} \\ \\ \\ \\ \end{array} \begin{array}{c} \text{RML RIT RTB RBA CT CB CA CL CCW uV} \\ \left[\begin{array}{ccccc|c} 1 & 0 & 0\text{-}1 & 1 & 0 & 0\,0\,0\,0\,0\,0\,0\,0\,1 \\ -1 & 1 & 0 & 0 & & \\ 0 & -1 & 1 & 0 & & 1\,0\,0\,0\,0\,1\,0\,0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 & & \\ 0 & 0 & 0 & -1\,0 & 0\,1\,0 & -1\ -1\ -1\,0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & & 0\,0\,0\,-1\ -1 \end{array}\right] \end{array} \begin{array}{c} \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \end{array} \begin{array}{|c|} \hline 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \end{array} \begin{array}{|cc|} \hline & \\ 0 & 2 \\ 0\,3 & \\ 0\,4 & \\ 0 & 5 \\ 0 & 6 \\ 1 & 7 \\ \hline \end{array} \cdot \tag{27}$$

El voltaje de entrada del ventilador se representa como una fuente S (DS,LS, RS). el conjunto de fuentes es S {v7}, y la dimensión de la fuente es S 1. El circuito también consta de mC 5 capacitores (elementos de almacenamiento) que se representan como Ci (DCi , LCi , RCi), donde el El índice utilizado para distinguir entre los componentes es i {CL, CT, CB, CA, CCW}. Además, hay mR 4 resistencias (elementos disipativos) que se representan como Ri (DRi ,LRi , RRi), donde el índice i viene dado por i {RML, RIT, RTB, RBA}.

Machine Translated by Google

Seleccionando el nodo 7 como terreno, la matriz de incidencia reducida, A, viene dada por

$$A \quad [AR\ AC\ AS] \quad \left[\begin{array}{ccc|ccccc|c} 1&0&0&0&0&0&0&0&-1 \\ -1&1&0&0&0&0&0&1&0 \\ 0&0&-1&1&0&1&0&0&0 \\ 0&0&0&0&-1&-1&-1&0&1 \end{array}\right] \quad \begin{array}{c} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{array} \quad \left[\begin{array}{ccc|ccccc|c} 0&0&0&-1&0&0&0&1&0 \\ 0&0&0&0&-1&0&0&1&0 \\ 0&0&0&0&0&-1&0&1&0 \\ 0&0&0&0&0&0&-1&1&0 \end{array}\right] \quad , \tag{28}$$

Arkansas C.A. COMO

donde las dimensiones de los componentes de A son tenue(AR) (n − S) × mR 6 × 4, tenue(AC) (n − S) × mC 6 × 5 y tenue(AS) (n − S) × mS 6 × 1.

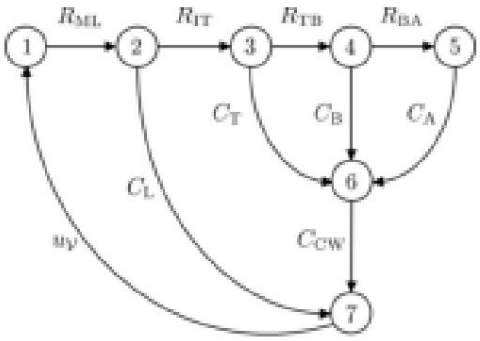


Figura 7. El gráfico asociado con el diagrama de circuito que se muestra en la Figura 6.

La energía total del circuito está dada por el hamiltoniano.

$$HC \quad \sum_{yo} HCi\ (qCi\ ) \quad \frac{1}{2}\ qCi \sum_{yo} \overline{Ci}\ , \tag{29}$$

donde qCi R^{1} es la carga del i-ésimo capacitor para i {CL, CT, CB, CA, CCW}. De este modo,

$$\begin{array}{l} I\ AC\ AR\ AS \\ OOOOO \\ OOOOO \\ OOOOO \end{array} \quad \begin{array}{c} -\frac{d}{dt}\,q \\ -\frac{}{d\ dt} \\ qC \\ -iR\ -iS \end{array} \quad \begin{array}{c} OOOOO \\ -Un_R \quad OIO \\ -Un \quad OIO \\ -A\ \frac{C}{S} \quad OI \end{array} \quad \begin{array}{c} UC \\ tu \\ a\ nosotros \end{array} \quad O\ , \tag{30}$$

donde I y O son matrices identidad y cero de tamaño apropiado, respectivamente, q 0, y es el potencial de nodo. La expansión de la ecuación (30) da

$$\frac{d}{\text{aire acondicionado}}\ qC + AR(A \quad R\ ) + COMO\ es \quad 0, \tag{31}$$

$$-Un_C \quad + uC \quad 0, \tag{32}$$

$$-Un_S \quad + nosotrosS \quad 0. \tag{33}$$

La estructura de Dirac viene dada por el conjunto con los siguientes atributos para (D,L, R):

$$(-\frac{d}{dtq}\ , -\ \frac{d}{dt}\ qC, -iR, -iS, \quad , uC, uR, uS) \quad D, (q, qC, \quad , uC) \quad L, \tag{34}$$

$$(-iR, eR) \quad R. \tag{35}$$

$$\tag{36}$$

Machine Translated by Google

5. Definición de topología de red

modelo 11. (Gráfico dirigido) [27]: Un gráfico dirigido G denota el par (V,A), donde V(D) y A(D) denotan el conjunto de vértices y arcos, respectivamente. Un arco es un par ordenado distinto de vértices.

El gráfico dirigido de un modelo de ventilador mecánico se compone de la unión disjunta de los vértices asociados al paciente así como de los miembros inspiratorio y espiratorio del ventilador, los cuales están dados por vO, VI y VE, respectivamente. De manera similar, los arcos del paciente, inspiratorio y espiratorio están dados por aO, AI y AE, respectivamente. Cada arco y vértice se puede subdividir además en aquellos asociados con los sopladores, válvulas, tuberías y circuitos eléctricos presentes en el ventilador mecánico. Así, la totalidad de vértices y arcos viene dada por

V(D) {vO} VI VE {vO} (VIb VIv VIp VIe) (VEb VEv VEp VEe)

y

A(D) {aO} AI AE {aO} (AIb AIv AIp AIe) (AEb AEv AEp AEe),

respectivamente, donde los subíndices i {O, p, b, v, p,e} se utilizan para indicar el paciente, sopladores, válvulas, tuberías y componentes del circuito eléctrico, respectivamente.

En la Figura 8 se muestra un gráfico simplificado del ventilador mecánico que se muestra en la Figura 2 . Este gráfico simplificado indica los elementos pertenecientes al paciente, así como los arcos y vértices inspiratorios pertenecientes al ventilador mecánico. Los arcos que pertenecen al paciente se denotan por AO21 AO, mientras que los vértices se denotan por {VO1 ,VO2 } VO. Los elementos de los arcos y vértices inspiratorio y espiratorio, dados por VI ,VE y AIO,AOE, respectivamente. En la Figura 9 se ofrece una representación más detallada del gráfico del ventilador mecánico de la Figura 8 .

La Figura 9 muestra un gráfico detallado del ventilador mecánico dado en la Figura 2 que indica el vértice VO del paciente y los arcos y vértices a lo largo del camino inspiratorio, dado por

AI {AIV12 , AIV23 , AIV3B , AIV23 , AIBV4 , AIV4S1 , AIBV5 , AIV5S2 }

y

VI {VIV1 ,VIV2 ,VIV3 ,VIB , VIV4 ,VIS1 ,VIV5 ,VIS2 },

respectivamente, así como los arcos y vértices a lo largo de la vía espiratoria, dados por

AE {AOEV1 ,AEV12 ,AEV23} y VE {VEV1 ,VEV2 ,VEV3 },

respectivamente.

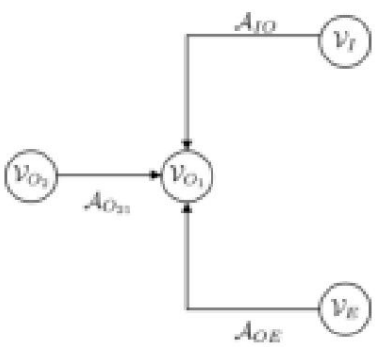


Figura 8. Gráfico simplificado del ventilador mecánico dado en la Figura 2 indicando los elementos pertenecientes al paciente, dado por los arcos AO21 AO y vértices {VO1 ,VO2 } VO, así como elementos de los arcos y vértices inspiratorio y espiratorio , dado por VI ,VE y AIO, AOE, respectivamente.

Machine Translated by Google

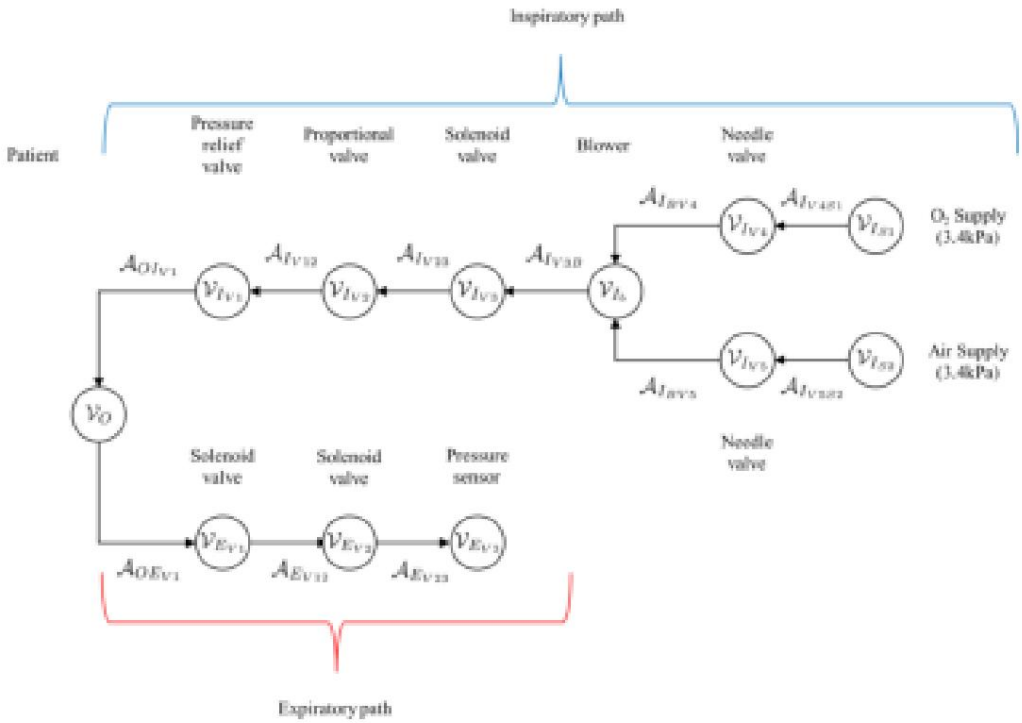


Figura 9. Gráfico detallado del ventilador mecánico que se muestra en la Figura 8 que indica el VO del vértice del paciente , así como los arcos y vértices a lo largo de las vías inspiratoria y espiratoria.

6. Condiciones de interconexión/acoplamiento del

modelo En esta sección, se dan las condiciones de acoplamiento del modelo de red Port-Hamiltoniano del ventilador mecánico. Los tipos de interconexiones que ocurren en este modelo se detallan a

continuación: 1. Interconexión bomba-tubería: La presión y el caudal del fluido que sale de la bomba, Pb y Qb , respectivamente, son iguales a la presión y el caudal en la entrada. de la tubería, dado por p(0) y m(0), respectivamente. De este modo,

Pb p0 y Qb m(0).

2. Interconexión tubería-válvula: La presión y el caudal del fluido que entra/sale de una válvula, Pv y Qv, respectivamente, son iguales a la presión y el caudal en la entrada /salida de la tubería, dados por p(0) y m(0) para la entrada y p(ℓ) y m(ℓ) para la salida. De este modo,

Pv p(0) y Qv m(0) en la entrada,

y

Pv p(ℓ) y Qv m(ℓ) en la salida.

3. Interconexión de tubería a circuito: la presión y el caudal de fluido en la salida de una tubería pueden actuar como entradas para un modelo de circuito; de este modo,

p(ℓ) vcin y m(ℓ) hielo .

Por otro lado, el voltaje y la corriente de salida de un circuito se pueden interconectar con una tubería de fluido en la entrada de la tubería. En este caso, el voltaje y/o la corriente de salida

Machine Translated by Google

del circuito debe ser igual a la presión de entrada y al caudal de entrada, respectivamente. Esta relación se puede expresar matemáticamente como:

vcout p(0) e icout m(0) en la entrada.

El hamiltoniano del sistema completo viene dado por la suma de los hamiltonianos de los sistemas individuales:

$$H \quad Hb + Hs + Hp + HC. \tag{37}$$

La tasa de cambio de la energía del sistema completo es

$$\begin{aligned} H^{\cdot} \quad & P^{\cdot} \quad b(\partial z\, p(0) + Fp) + Q^{\cdot} \quad b(\partial z m(0) + Mp) \\ & + P^{\cdot}_{\text{vino}} (\partial z\, p(0) + Fvin\,) + Q^{\cdot}_{\text{vino}} (\partial z m(0) + Mvin\,) \\ & + P^{\cdot} \quad vout(\partial z\, p(\ell) + Fvout) + Q^{\cdot} \quad vout(\partial z m(\ell) + Mvout) \\ & + P^{\cdot} \quad vout(\partial z\, p(\ell) + Fvout) + Q^{\cdot} \quad vout(\partial z m(\ell) + Mvout) \\ & + H^{\cdot} \quad b + H^{\cdot}_{s} + H^{\cdot}_{do.} \end{aligned} \tag{38}$$

Los términos Fp, Mp, Fvin , Mvin , Fvout y Mvout son las presiones externas y los caudales que actúan sobre el sistema. Deben ser iguales a cero para completar la interconexión.

7. Discretización que preserva la estructura

El modelo Port-Hamiltoniano de la tubería es una ecuación diferencial parcial continua en el espacio. Como tal, es difícil simular la dinámica de una sección de tubería. Para ello es necesario aproximar el modelo con un modelo discreto: en este caso, un modelo en diferencias finitas que es una aproximación del sistema original. Dentro del contexto de los sistemas Port-Hamiltonianos, un requisito adicional es la necesidad de garantizar que la aproximación discreta mantenga las propiedades estructurales del sistema original: por ejemplo, simetría sesgada, etc.

Cada estado del sistema se puede reemplazar con una aproximación discreta que consta de un total sobre n elementos, como se puede ver en la Figura 10. Como tal, ≈ d [1, 2, , n] R y m ≈ md $^{n\times 1}$, [m1, m2, , mn] R una aproximación discreta χd $^{n\times 1}$. Como tal, el vector de estado χp puede reemplazarse por [1, , n, m1, , mn] R i , mi R está ubicado en z {Δ(i − 1),Δ(i − 1/2)}, $^{2n\times 1}$. El iésimo elemento de $^{1\times 1}$ donde Δ es el discreto fijo tamaño de paso entre puntos, y i 1, 2, , n. Además, los esfuerzos en los límites vienen dados por δχ0H0 y δχnHn. Por lo tanto, el hamiltoniano dado en la ecuación (20) puede aproximarse mediante una aproximación discreta tal que Hp χp ≈ ΔHd χd de modo que el esfuerzo del sistema discreto ahora sea δχd (Hd). Una aproximación en diferencias finitas de las derivadas espaciales en el punto i es

$$\frac{\partial}{\partial z}(t, z)_{i} \approx \frac{1}{\Delta}(\quad (t, zi+0{,}5) - \quad (t, zi-0{,}5)) \text{ y } \Delta \qquad \frac{\partial}{\partial z} m(t,z)_{i} \approx \frac{1}{\Delta}(\text{metro}(t, zi+1) - \text{metro}(t, zi)). \tag{39}$$

La aproximación de la diferencia central en el punto i es

$$\partial t[\ mi\ ] \quad \frac{1}{\Delta}([\ \delta m H\ \chi i\ \chi i+1\ ] - [\ \delta m H\ \chi i-1 \chi i\ ]). \tag{40}$$

En forma matricial, esto es

$$\Delta \quad \frac{-1}{1\ 1\ -1} \quad \partial t\ d \qquad \Delta \quad {}_{0} \quad \frac{{}^{\delta m H\ \chi d}_{1}\ {}^{0}_{1}}{1\ -1}\ \delta m H\ \chi d \tag{41}$$

Machine Translated by Google

y

$$\partial t m d \quad \Delta \quad \frac{1-1 \quad 1}{1-1} \quad \delta \; H \; \chi d \quad + \quad \frac{}{1} \quad \delta \; H \; \chi 0 \quad , \tag{42}$$

que se puede reescribir como

$$\partial t \quad d \quad D \delta m H \quad \chi d \quad + G \quad \delta m H \quad \chi 0 \quad y \; \partial t m d \quad -D \quad \delta \; H \; \chi d \quad + G m \delta \; H \; \chi n \quad , \tag{43}$$

dónde

$$D \quad \Delta \quad \frac{1}{1-1} \quad , \quad G \quad \frac{1}{1-1} \quad \frac{0}{-1} \quad y \; Gm \quad \frac{1}{\Delta} \quad \frac{0}{0} \quad .$$

El operador asimétrico se desprende claramente de la ecuación (43).

$$[\partial t m d] \quad [D - H \; \chi d \quad \delta m H \; [G \chi d n]] [\delta \; G H \; \chi 0 \quad \delta m H \; \chi n \quad]. \tag{44}$$

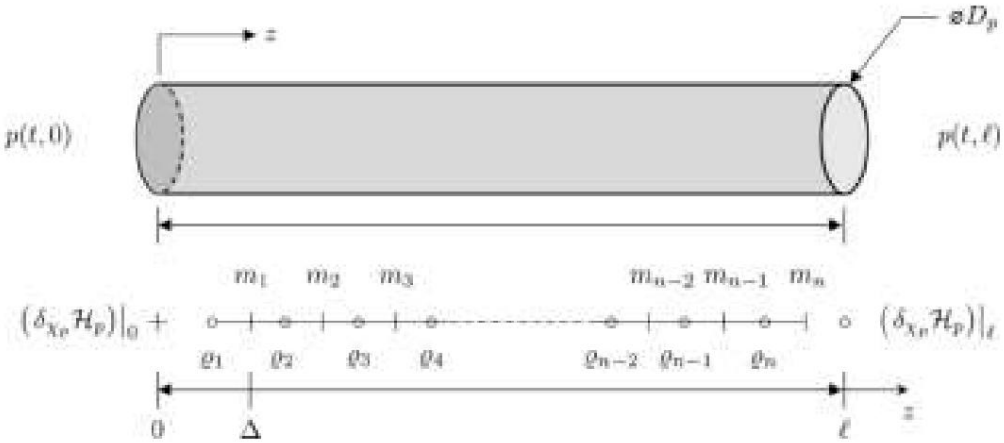


Figura 10. Discretización de cuadrícula escalonada del modelo dinámico de tuberías unidimensional de Port-Hamilton.

8. Resultados y discusión

Los parámetros del modelo de tubería y válvula solenoide utilizados en este trabajo se dan en la Tabla 1. y Tabla 2, respectivamente. Los parámetros del modelo del circuito pulmonar se dan en la Tabla 3.

Tabla 1. Valores de los parámetros del modelo de tubería.

Parámetro	Descripción	Valor	Unidades
AP	Área de la sección transversal de la tubería	3,8013 × 10−4 2,2 ×	^{2} metros
Dp	Diámetro de la tubería	10−3 1,5 × 10−1	metro
ℓ	Longitud de la tubería		metro

Machine Translated by Google

Tabla 2. Valores de los parámetros del modelo de solenoide [28].

Parámetro	Descripción	Valor	Unidades
ae	Área transversal efectiva	8 × 10−5	m^2
As1	Área de superficie del carrete	2,657 × 10−3	m^2
As2	Área de superficie del carrete	3,525 × 10−3	m^2
As3	Área de superficie del carrete	5,586 × 10−3	m^2
as4	Área de superficie del carrete	5,586 × 10−3	m^2
bs	Factor de amortiguación viscosa	2 × 10−1	Ns m^{-1}
g	Aceleración debida a la gravedad.	9.81	m s^{-2}
ks	rigidez del resorte	1 × 10−4	N m^{-1}
lc	Longitud de la parte del circuito magnético dentro del núcleo.	1,15 × 10−2	m
EM	masa del carrete	2,7 × 10−1	kilos
norte	Número de vueltas en la bobina.	1250	vueltas
qstot	Entrehierro total	3,3 × 10−4	m
qs0	Pretensión en primavera.	1,1 × 10−3	m
Rs	Resistencia de la bobina	13	Ω
μ0	Permeabilidad del aire	4π × 10−7	N A^{-2}
μc	Permeabilidad del núcleo magnético.	4,8π × 10−5	N A^{-2}

Tabla 3. Valores de los parámetros del modelo de circuito pulmonar [26].

Parámetro	Descripción	Valor	Unidades
RML	Resistencia de la boca a la laringe.	1.021	cmH2O s L^{-1}
RLT	Resistencia de la laringe a la tráquea.	3,369 × 10−1	cmH2O s L^{-1}
OTR	Resistencia de la tráquea a los bronquios.	3.063 × 10−1	cmH2O s L^{-1}
RBA	Resistencia de los bronquios a los alvéolos.	8,17 × 10−2	cmH2O s L^{-1}
CL	Cumplimiento de la laringe.	1,27 × 10−3	L/cmH2O
Connecticut	Compliance de la tráquea	2,38 × 10−3	L/cmH2O
CB	Cumplimiento de los bronquios.	1,31 × 10−2	L/cmH2O
California	Cumplimiento de los alvéolos.	2 × 10−1	L/cmH2O
CCW	Compliance de la pared torácica	2,445 × 10−1	L/cmH2O

8.1. Validación del modelo

El modelo fue validado utilizando parámetros obtenidos de la literatura. Se encontró que los resultados de la simulación proporcionados en la sección de resultados y discusión eran comparables a los de la literatura existente.

8.2. Entorno de simulación

Las simulaciones se realizaron utilizando la versión de MATLAB: Actualización 9.13.0.2193358 (R2022b) 5 en una CPU Intel Core i5 con cuatro núcleos y 8 GB de RAM. Las figuras 11 y 12 muestran curvas de ventilación para un pulmón bajo dos condiciones: un pulmón parcialmente dañado con un cumplimiento y resistencia de 20 ml/cmH2O y 20 cmH2O-s/L, respectivamente, y un pulmón con daño completo, que está representado por una distensibilidad pulmonar y resistencia de 10 mL/cmH2O y 50 cmH2O-s/L, respectivamente. Las curvas de ventilación se mantienen iguales. comportamiento sinusoidal. Para el caso de estudio de pulmón dañado, los valores mínimos de ventilación de Se consiguen flujo en el tiempo y volumen de aire. En el pulmón dañado, la distensibilidad y La resistencia del pulmón aumenta la presión.

Machine Translated by Google

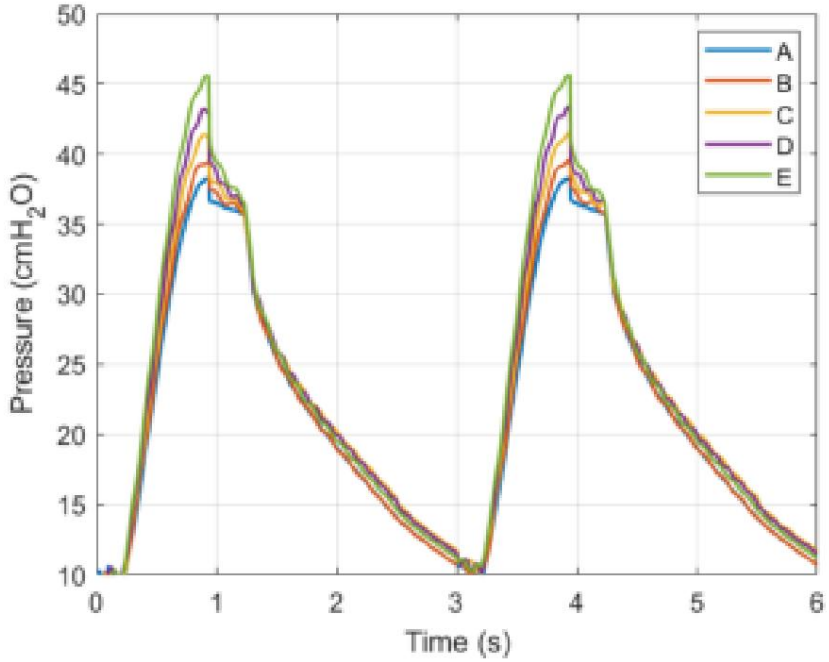


Figura 11. Gráfica de presión del aire versus tiempo.

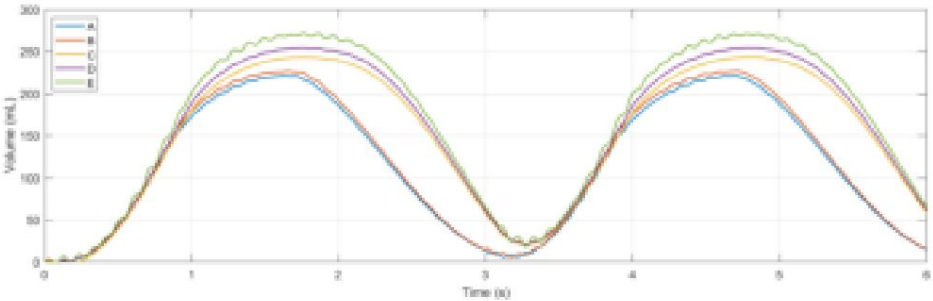


Figura 12. Gráfica de flujo volumétrico versus tiempo.

9. Conclusiones y recomendaciones

En este trabajo de investigación, formulamos un ventilador mecánico detallado en el Puerto–Marco hamiltoniano. A esto le sigue un modelo de Port-Hamilton del sistema respiratorio. y posteriormente, estos dos sistemas se integran. El trabajo realizado demuestra que el enfoque de Port-Hamilton es un método válido para modelar un sistema integrado ventilador mecánico – sistema respiratorio humano. El marco Port-Hamiltoniano es de naturaleza modular. Además, la estructura completa del modelo se basa en el gráfico subyacente del ventilador mecánico y el sistema respiratorio humano. Investigaciones futuras las instrucciones incluyen:

- Desarrollar un marco de software para la generación automática del Port-Hamiltonian dinámica para diversas configuraciones de ventiladores mecánicos y sistemas respiratorios humanos, así como sus modelos integrados asociados [19];
- Desarrollo de varios modelos de orden reducido;
- Desarrollo de un marco integrado para el modelado de ventiladores mecánicos /sistemas respiratorios humanos para permitir el control y la optimización del sistema [19,20];
- Aprovechar la naturaleza modular y teórica de grafos del Port-Hamiltoniano enfoque para incorporar aprendizaje automático e inteligencia artificial [19];
- Investigación de las discretizaciones y reducciones de orden de modelos más apropiadas para preservar la estructura para diversas aplicaciones basadas en datos y diseños de sistemas de control.

Machine Translated by Google

Contribuciones de los autores: Conceptualización, MCIM; metodología, MCIM; software, MCIM; validación , MCIM y JEDE; análisis formal, MCIM; investigación, MCIM; recursos, MCIM; curación de datos, MCIM; redacción: preparación del borrador original, MCIM; redacción: revisión y edición, MCIM; visualización, MCIM; supervisión, OTCN; administración de proyectos, MCIM; adquisición de financiación , MCIM Todos los autores han leído y aceptado la versión publicada del manuscrito.

Financiamiento: Me gustaría agradecer a la Escuela de Minería, Facultad de Ingeniería y Medio Ambiente Construido de la Universidad de Witwatersrand, por el apoyo financiero para publicar este trabajo.

Declaración de la Junta de Revisión Institucional: Se renunció a la revisión y aprobación éticas de este estudio porque no involucró a humanos ni animales.

Declaración de disponibilidad de datos: las contribuciones originales presentadas en el estudio se incluyen en el artículo; más consultas pueden dirigirse al autor correspondiente.

Conflictos de intereses: Los autores declaran no tener conflictos de intereses.

Referencias

1. Rubio, J.; Rojas, C.; Sánchez, M.; Gómez-Alzate, D.; Córdova, M.; Montoya, V.; Castañeda, B.; Chang, J.; Pérez Buitrago, S. COVOX: Proporcionando oxígeno durante la emergencia sanitaria del COVID-19. HardwareX 2023, 13, e00383. [Referencia cruzada]
2. Hickling, KG La curva presión-volumen se modifica en gran medida mediante el reclutamiento. Soy. J. Respirar. Crítico. Cuidado médico. 1998, 158, 194–202. [Referencia cruzada]
3. Bates, JHT Mecánica pulmonar: un enfoque de modelado inverso; Cambridge University Press: Cambridge, Reino Unido, 2009.
4. Maury, B. El sistema respiratorio en ecuaciones, 1ª ed.; MS&A: modelado, simulación y aplicaciones; Springer: Milán, Italia, 2013. [Referencia cruzada]
5. Burrowes, KS; Cazador, PJ; Tawhai, MH Modelos anatómicos de elementos finitos de los árboles arteriales y venosos pulmonares humanos, incluidos los vasos supernumerarios. J. Aplica. Fisiol. 2005, 99, 731–738. [Referencia cruzada]
6. Tawhai, MH; Bates, JHT Modelado pulmonar a múltiples escalas. J. Aplica. Fisiol. 2011, 110, 1466–1472. [Referencia cruzada] 7. Berger, L.; Bordas, R.; Burrowes, K.; Brightling, C.; Hartley, R.; Kay, D. Comprensión de la interdependencia entre la deformación parenquimatosa y la ventilación en la enfermedad pulmonar obstructiva. En B30. Dinámica del estrechamiento de las vías respiratorias en el asma: ¿todavía no se entiende? Sociedad Torácica Estadounidense: Nueva York, NY, EE. UU., 2014; Volumen 189, pág. A2677.
8. Roth, CJ; Yoshihara, L.; Ismail, M.; Wall, WA Modelado computacional del sistema respiratorio: discusión sobre enfoques de modelado acoplado y dos extensiones recientes. Computadora. Métodos de aplicación. Mec. Ing. 2017, 314, 473–493. [Referencia cruzada]
9. Tran, AS; Thinh Ngo, cuartel general; Dong, VK; Vo, AH Diseño, control, modelado y simulación de ventilador mecánico para Soporte respiratorio. Matemáticas. Problema. Ing. 2021, 2021, 2499804. [Referencia cruzada]
10. El-Hadj, A.; Kezrane, M.; Ahmad, H.; Ameur, H.; Bin Abd Rahim, SZ; Younsi, A.; Abu-Zinadah, H. Diseño y simulación de ventiladores mecánicos. Fractales de Solitones del Caos 2021, 150, 111169. [CrossRef]
11. Tharion, J.; Kapil, S.; Muthu, N.; Tharion, J.; Subramani, K. Ventilador rápido de fabricación para emergencias respiratorias de Enfermedad COVID-19. Trans. Nacional indio. Acad. Ing. 2020, 5, 373–378. [Referencia cruzada]
12. Pivik, WJ; Clayton, gerente general; Jones, GF; Nataraj, C. Modelado dinámico de un ventilador mecánico de bajo costo. IFAC-PapersOnLine 2022, 55, 81–85. [Referencia cruzada]
13. Al-Naggar, N. Modelado y simulación de un sistema de ventilación mecánica controlada por presión. J. Biomed. Ciencia. Ing. 2015, 8, 707–716. [Referencia cruzada]
14. Shi, Y.; Ren, S.; Cai, M.; Xu, W. Modelado y simulación de un sistema de ventilación mecánica controlado por volumen. Matemáticas. Problema. Ing. 2014, 2014, 271053. [Referencia cruzada]
15. Al-Naggar, NQ; Al-Hetari, HY; Al-Akwaa, Simulación FM de un modelo matemático para ventilación pulmonar y mecánica. J. Ciencias. Tecnología. 2016, 21, 1–9. [Referencia cruzada]
16. Giri, J.; Kshirsagar, N.; Wanjari, A. Diseño y simulación de un ventilador mecánico de bajo costo basado en IA: un enfoque. Madre. Hoy Proc. 2021, 47, 5886–5891. [Referencia cruzada]
17. Hannon, DM; Mistry, S.; Das, A.; Saffaran, S.; Laffey, JG; Brook, BS; Hardman, JG; Bates, DG Modelado Mecánico Ventilación in silico: potencial y dificultades. Semín. Respirar. Crítico. Cuidado médico. 2022, 43, 335–345. [Referencia cruzada]
18. Mehedi, IM; Shah, SA; Al-Saggaf, UM; Mansouri, R.; Bettayeb, M. Control PID difuso para sistemas respiratorios. J. Saludc. Ing. 2021, 2021, 1926711. [Referencia cruzada]
19. Mehrmann, V.; Unger, B. Control de sistemas y aplicaciones algebraicos diferenciales port-hamiltonianos. Número de actas. 2023, 32, 395–515. [Referencia cruzada]
20. van der Schaft, A. Modelado Port-Hamiltoniano para el control. Año. Robot de Control Rev. Auton. Sistema. 2020, 3, 393–416. [Referencia cruzada]
21. Villegas, JA Un enfoque port-hamiltoniano para sistemas de parámetros distribuidos. Doctor en Filosofía. Tesis, Departamento de Matemática Aplicada, Facultad EWI, Universiteit Twente, Enschede, Países Bajos, 2007.
22. Le Gorrec, Y.; Zwart, H.; Maschke, B. Estructuras de Dirac y sistemas de control de límites asociados con el diferencial simétrico sesgado Operadores. SIAM J. Control óptimo. 2005, 44, 1864–1892. [Referencia cruzada]

Machine Translated by Google

23. van der Schaft, AJ; Maschke, BM Formulación hamiltoniana de sistemas de parámetros distribuidos con flujo de energía límite.
J. Geom. Física. 2002, 42, 166–194. [Referencia cruzada]
24. Anderson, J. Dinámica de fluidos computacional: conceptos básicos con aplicaciones; Ediciones internacionales McGraw-Hill: Mecánica
Ingeniería; McGraw-Hill Inc.: Nueva York, NY, EE. UU., 1995.
25. Kami ´nski, Z. Un modelo de parámetros agrupados simplificado para tubos neumáticos. Matemáticas. Computadora. Modelo. Din. Sistema. 2017, 23, 523–535.
[Referencia cruzada]
26. Albanese, A.; Cheng, L.; Ursino, M.; Chbat, NW Un modelo matemático integrado del sistema cardiopulmonar humano:
Desarrollo de modelos. Soy. J. Physiol.-Heart Circ. Fisiol. 2016, 310, H899–H921. [Referencia cruzada] [PubMed]
27. Bondy, JA; Murty, USR Teoría de grafos con aplicaciones; The Macmillan Press Ltd.: Londres, Reino Unido, 1976.
28. Taghizadeh, M.; Ghaffari, A.; Najafi, F. Modelado e identificación de una válvula solenoide para aplicaciones de control PWM. cuentas
Rendus Mécanique 2009, 337, 131-140. [Referencia cruzada]

Descargo de responsabilidad/Nota del editor: Las declaraciones, opiniones y datos contenidos en todas las publicaciones son únicamente de los autores y contribuyentes individuales y no de MDPI ni de los editores. MDPI y/o los editores renuncian a toda responsabilidad por cualquier daño a personas o propiedad que resulte de cualquier idea, método, instrucción o producto mencionado en el contenido.

Machine Translated by Google

cálculo

MDPI

Artículo

El efecto de proporcional, proporcional-integral y Controladores proporcionales integrales derivados para mejorar la Rendimiento de vibraciones torsionales en un sistema dinámico

Khalid Alluhydan [1], Ashraf Taha EL-Sayed 2,* y Fatma Taha El-Bahrawy [2]

[1] Departamento de Ingeniería Mecánica, Facultad de Ingeniería, Universidad Rey Saud, PO Box 800, Riyadh 11421, Arabia Saudita; kalluhydan@ksu.edu.sa
[2] Departamento de Ciencias Básicas, Academia Moderna de Ingeniería y Tecnología, Elmokattam 11439, Egipto; fatma.taha@eng.modern-academy.edu.eg * Correspondencia: atelsayed@eng.modern-academy.edu.eg

Resumen: El objetivo principal de esta investigación es disminuir la alta vibración que provoca el modelo mediante el uso de un control de vibración adecuado. Por lo tanto, comenzamos implementando varios tipos de controladores para investigar su impacto en la reacción del sistema y evaluar los resultados de cada control.
Los tipos de controladores se presentan como controladores proporcionales (P), proporcional-integral (PI) y proporcional-integral-derivativo (PID). Empleamos control PID para regular el comportamiento de la vibración torsional en un sistema dinámico. El controlador PID tiene como objetivo aumentar la estabilidad del sistema después de ver el impacto del control P y PI. Este tipo de control garantiza que no haya componentes inestables en el sistema. Utilizando la técnica de perturbación en escalas de tiempo múltiples (MTSP), se ha obtenido una solución aproximada de primer orden. Utilizando el enfoque de la función de respuesta de frecuencia, la estabilidad y la respuesta de estado estable del sistema en el escenario de resonancia primaria ($\Omega 1 = \omega 1$, $\Omega 2 = \omega 2$) se consideran como la peor resonancia y se abordan. Además, se examinan la respuesta caótica del sistema dinámico no lineal y la solución numérica para varios valores de parámetros. Los programas MATLAB se utilizan para lograr resultados de simulación.

Palabras clave: MSPT; PAG; PI; controladores PID; ecuaciones diferenciales no lineales; control activo; estabilidad; vibración torsional

check for updates

Cita: Alluhydan, K.; EL-Sayed, AT; El-Bahrawy, FT El efecto de los controladores proporcional, proporcional-integral y proporcional-integral-derivativo en la mejora de la Rendimiento de vibraciones torsionales en un sistema dinámico. Computación 2024, 12, 157. https://doi.org/ 10.3390/computation12080157

Editor académico: Chathura Wanigasekara

Recibido: 15 de julio de 2024
Revisado: 24 de julio de 2024
Aceptado: 29 de julio de 2024
Publicado: 3 de agosto de 2024

Copyright: © 2024 por los autores. Licenciatario MDPI, Basilea, Suiza. Este artículo es un artículo de acceso abierto. distribuido bajo los términos y condiciones de los Creative Commons Licencia de atribución (CC BY) (https:// creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

1. Introducción

La vibración torsional ocurre de alguna forma en toda maquinaria giratoria. Incluso cuando la vibración se acerca a una amplitud destructiva, hay situaciones en las que no se puede identificar sin un equipo de monitoreo especializado. Después de que la rigidez a la flexión del eje y el momento de inercia diametral han sido reemplazados por la rigidez a la torsión y el momento polar de inercia, respectivamente, muchos elementos de vibración torsional son equivalentes a la vibración del eje. Cuando algo media en la conexión entre las vibraciones y el suelo, o cuando los dientes de los engranajes o las mordazas del acoplamiento están vacíos, las vibraciones de torsión se pueden detectar mediante el nivel de ruido y las vibraciones (perceptibles al tacto). La vibración torsional puede interactuar con el suelo a través de juegos de engranajes utilizados para cambiar la velocidad de los sistemas de transmisión de potencia; En las máquinas alternativas, el camino hacia el suelo lo proporcionan mecanismos de manivela deslizantes que se encuentran en motores y compresores. Normalmente, la vibración torsional se manifiesta como una señal de vibración complicada con numerosos componentes de frecuencia. Algunos sistemas experimentan breves vibraciones de torsión debido al impacto de arranques repentinos y la descarga de los dientes de los engranajes; Los sistemas de motores eléctricos síncronos también pueden experimentar resonancia torsional en

Los controladores PID convencionales han sido ampliamente adoptados en numerosas aplicaciones industriales debido a su diseño simple, precio asequible, simplicidad de mantenimiento y módulos listos para usar [1-3]. Árbitro. [4] ofrece la implementación de control no lineal dependiente del estado (SDP-PID+) empleando el modelo de función de transferencia SDP, un tipo

Machine Translated by Google

de descripción no lineal de estructuras dinámicas. El ajuste del control PID tradicional es problemático debido a las propiedades específicas de numerosos procedimientos, incluidos retrasos de tiempo de muestra binaria, duraciones más largas, modelos TF de orden superior y no linealidades [5–7]. Sayed et al. [8] desarrollaron un enfoque de control SDP PID resiliente no lineal para una función de transferencia discreta con propiedades no lineales. Esta investigación enfatizó procesos de respuesta robustos, para los cuales se diseñaron específicamente las técnicas robustas PID y SDP-PID. Dano y Julli'ere [9] estudiaron cómo los actuadores MFC controlaban las oscilaciones en una estructura compuesta. Kumar y Ray [10] examinaron las vibraciones en estructuras tipo sándwich con entre uno y tres compuestos piezoeléctricos y técnicas de amortiguación por capas. El controlador PD está diseñado para disminuir las oscilaciones de un rotor Jeffcott suspendido a través de dos pares de polos [11]. Un controlador PD puede relajar efectivamente las vibraciones de amplitud en estado estacionario de un sistema de haz [12]. Eissa et al. [13,14] sugirieron un controlador PD y un controlador PD retardado para reducir las vibraciones de sistemas magnéticos con coeficientes no lineales cúbicos y cuadráticos debajo de las fuerzas principales paramétricas. Bauomy y El-Sayed emplearon un controlador PD para controlar el comportamiento de la estructura de carcasa laminada MFC. El propósito de emplear el controlador PD es mejorar la estabilidad del sistema aumentando el control, ya que puede pronosticar errores futuros en la respuesta del marco [15]. Más del 90% de las industrias todavía utilizan controladores PID debido a su simplicidad, funcionalidad y facilidad de uso [16]. Las ganancias del controlador PID se adquieren haciendo coincidir la respuesta de frecuencia del sistema de control de bucle ce Recientemente, se utilizó un enfoque sistemático para seleccionar parámetros PID para estructuras inciertas no lineales [18]. Los controladores PID ofrecen ventajas sobre los enfoques pasivos para controlar sistemas de suspensión semiactivos [19-21]. Árbitro. [22] investiga el control de un sistema de suspensión semiactiva de un cuarto de vagón utilizando un controlador PID. El controlador PID típico se construye utilizando el enfoque de Ziegler-Nichols y se utiliza para regular el sistema de suspensión. Las vibraciones torsionales de una estructura dinámica no lineal de un grado de libertad se regulan con control activo [23]. Wenzhi y Zhiyong [24] sugirieron un control activo para disminuir la vibración torsional en un gran turbogenerador con un eje de rotor. El control de retroalimentación de estado completo mediante un regulador cuadrático lineal (LQR) reduce efectivamente la energía de vibración torsional y la respuesta en el sistema de eje del turbogenerador. El-Sayed y Bauomy [25] lograron reducir la vibración torsional de un sistema dinámico no lineal utilizando métodos de control pasivos y activos. El estudio de investigación [26] propone un enfoque de control adaptativo activado por eventos PI para sistemas no lineales MIMO con retraso de entrada impredecible. Se propone una estrategia de control adaptativo proporcional/proporcional-integral (P/PI) para un reactor volumétrico de reformado de metano/vapor (SVMSR) impulsado por energía solar con gestión térmica pasiva. La estrategia tiene como objetivo estabilizar los componentes del producto y reducir las fluctuaciones en la tasa de producción de hidrógeno en condiciones de radiación fluctuantes [27].

Investigaciones anteriores, como los estudios [28-30], han demostrado la aplicación exitosa de la técnica de perturbación de escala múltiple para derivar soluciones aproximadas para varios sistemas vibratorios. Estos estudios suelen utilizar programas MATLAB para analizar y resolver problemas de vibración.

Se exploró y derivó un modelo de viga en voladizo para cargar una masa concentrada intermedia bajo excitación armónica. La supresión de vibraciones se puede lograr utilizando el controlador IRC+ NSC. Para determinar las zonas inestables y estables para cada curva de respuesta de frecuencia, se llevó a cabo una investigación de estabilidad numérica [31]. Esta investigación investiga el uso de un péndulo de resorte no lineal para el control de la vibración del movimiento de balanceo del barco. Tres ecuaciones diferenciales no lineales de segundo orden (una para el ángulo de rotación, otra para el alargamiento relativo del resorte amortiguador y otra para el alargamiento del resorte amortiguador) conforman el modelo matemático que representa el movimiento de balanceo del barco con el amortiguador. Los autores utilizan una solución en serie en la que tienen en cuenta términos hasta el cuarto orden en funciones trigonométricas del ángulo de rotación. Según los autores, se puede hacer que los dos modos del sistema resorte-péndulo no lineal respondan a fuerzas de excitación multiparamétricas de una manera que reduzca sus valores máximos en un 8,8% y un 0,02% [32]. El control PPF del marco GMA no lineal se describe en [33]. La resonancia básica y la estabilidad de la amplitud del marco se pueden restringir con éxito ajustando las lim

Machine Translated by Google

Se han llevado a cabo experimentos para verificar la exactitud de los hallazgos. la investigacion ilustró el crecimiento del marco y comparó su utilidad con investigaciones anteriores. La trama 3D mejora e ilustra la corrección de la obra. Árbitro. [34] sugiere usar NIPPF Controladores para gestionar la vibración no lineal de la resonancia primaria de un eje giratorio. vibración. Entre ellos se encuentra una comparación entre los controladores de los FRC bajo estudio, NIPPF y ANIPPF. Un sistema de dos grados de libertad, contando cuadráticos y cúbicos Las no linealidades entre las fuerzas paramétricas y externas demuestran el sistema calculado. Se unen varias escalas de forma conectada para analizar la estabilidad de la medida. estructurar y obtener aproximaciones de soluciones. De la solución matemática, cada Se recupera la resonancia. El proceso de cuarto orden de Runge-Kutta se utiliza para medir la capacidad del sistema. actuación. Dentro de los resultados numéricos, la frecuencia programada de la estructura examinada Las curvas de respuesta se examinan en busca de influencias que incluyan coeficientes significativos [35]. Un motor síncrono de imán permanente de baja velocidad y alto par alimenta el semidirect Sistema de caja de cambios de accionamiento y corte de una cizalla, que utiliza una posición positiva integral no lineal. retroalimentación (NIPPF) y retroalimentación de posición positiva integral no lineal adaptativa (ANIPPF) controladores. Usando la técnica de promediación para resolver las ecuaciones diferenciales no lineales y modelar el sistema con controladores produce una solución analítica en el caso de primario y Resonancia interna 1:1. Se utilizó el programa MATLAB para comparar los valores numéricos y Soluciones analíticas para historia temporal y FRC para verificar su comparabilidad [36].

En este trabajo, utilizamos el control PID para suprimir la vibración torsional después de estudiar el modelo en un sitio web [37]. Un sistema de dos grados de libertad bajo múltiples excitaciones. resultados de esto. Para proporcionar una solución estimada hasta las aproximaciones de primer orden, MSPT se emplea en todas partes. Usando funciones de respuesta de frecuencia, la estabilidad del El sistema se examina en las proximidades del caso de resonancia principal. Algunas sugerencias sobre Se dan los distintos parámetros del sistema. Se proporcionan ejemplos numéricos para mostrar cómo Los controladores activos afectan el comportamiento del sistema. Se muestra una comparación entre PID control y controladores adicionales.

2. Modelado matemático

2.1. Dinámica del sistema sin control

Esta sección se presenta para ilustrar la investigación del sistema dinámico de vibración torsional. El modelo dinámico de este trabajo consta de dos partes acopladas, como se muestra en la Figura 1. θ1 y θ2 representan las posiciones angulares (coordenadas generalizadas) dentro del sistema. En este sistema dinámico no lineal, se cumple lo siguiente:

- I1 e I2 representan los momentos de inercia de la masa polar.
- k1 es la rigidez elástica lineal de la primera parte.
- k2 representa la rigidez elástica de la segunda parte, que comprende lo siguiente:
  - k21: un componente lineal.
  - k22: componentes cuadráticos y cúbicos no lineales.
- F $\dot{}_1$ y f $\dot{}_2$ denotamos las fuerzas de excitación generalizadas.

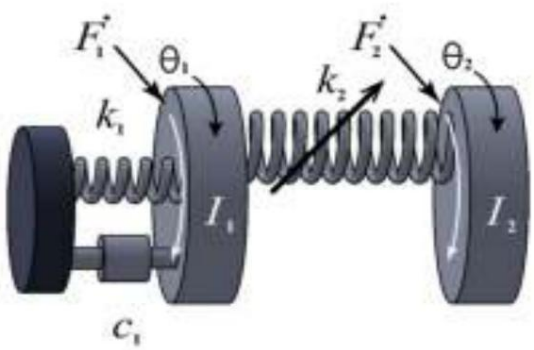


Figura 1. Modelo de diagrama esquemático del sistema principal.

$$\dot{}_{11} \quad {}_{11} \quad {}_{11} \quad {}_{21} \quad {}_{1} \quad {}_{2} \quad {}_{22} \quad {}_{1} \quad {}_{2}{}^{2} \quad {}_{23} \quad {}_{1} \quad {}_{2}{}^{3} \quad {}_{1} \,,$$

$$\dot{}_{22} \quad {}_{21\,2} \quad {}_{1} \quad {}_{22} \quad {}_{1} \quad {}_{2}{}^{2} \quad {}_{23} \quad {}_{1} \quad {}_{2}{}^{3} \quad {}_{2} \,,$$

Machine Translated by Google

Por lo tanto, las ecuaciones de los movimientos del sistema de cuerpo libre que se encuentran en la Figura 1 se pueden construir de la misma manera que las de [25,37]:

$$I_1\ddot{\theta}_1 + k_1\theta_1 + c_1\dot{\theta}_1 + k_{21}(\theta_1 - \theta_2) + k_{22}(\theta_1 - \theta_2)^2 + k_{23}(\theta_1 - \theta_2)^3 = F_1, \quad (1)$$

$$I_2\ddot{\theta}_2 + k_{21}(\theta_2 - \theta_1) - k_{22}(\theta_1 - \theta_2)^2 - k_{23}(\theta_1 - \theta_2)^3 = F_2, \quad (2)$$

$$\ddot{\theta}_1 + \frac{k_1}{I_1} + \frac{k_{21}}{I_1} + \frac{k_{22}}{I_1}(\theta_1 - \theta_2) + \frac{c_1}{I_1}\dot{\theta}_1 + \frac{k_{23}}{I_1}(\theta_1 - \theta_2)^2 + \frac{k_{23}}{I_1}(\theta_1 - \theta_2)^3 = \frac{F_1}{I_1}, \quad (3)$$

$$\ddot{\theta}_1 + \frac{k_1 + k_{21}}{I_1} + \frac{c_1}{I_1}\dot{\theta}_1 - \dot{\theta}_2 + (\theta_1 - \theta_2) + \frac{k_{21}}{I_1} + \frac{k_{22}}{I_1}\theta_1 + \frac{k_{23}}{I_1}(\theta_1 - \theta_2)^2 + \frac{k_{23}}{I_1}(\theta_1 - \theta_2)^3 = \frac{F_1}{I_1}, \quad (4)$$

$$\ddot{\theta}_2 + \frac{k_{21}}{I_2} + \frac{k_{22}}{I_2}\theta_2 + (\theta_2 - \theta_1) - \frac{k_{23}}{I_2}(\theta_1 - \theta_2)^2 - \frac{k_{23}}{I_2}(\theta_1 - \theta_2)^3 = \frac{F_2}{I_2}, \quad (5)$$

$$\frac{\ddot{\theta}_1}{\theta_0} + \frac{k_1 + k_{21}}{I_1} + \frac{\dot{\theta}_1}{\theta_0}\frac{c_1}{I_1} + \frac{\theta_0}{\theta_0} - \frac{k_{21}}{I_1}\frac{\theta_2}{\theta_0} - \frac{k_{22}\theta_0}{I_1}\frac{\theta}{\theta_0}(\theta_1 - \theta_2)^2 + \frac{k_{23}\theta_0^2}{I_1}\frac{(\theta_1 - \theta_2)^3}{\theta_0^3} = \frac{F_1}{I_1}, \quad (6)$$

$$\frac{\ddot{\theta}_2}{\theta_0}\frac{k_{21}}{I_2} + \frac{(\theta_2 - \theta_1)}{\theta_0} - \frac{k_{22}\theta_0}{I_2}\frac{(\theta_1 - \theta_2)^2}{\theta_0^2} - \frac{k_{23}\theta_0^2}{I_2}\frac{(\theta_1 - \theta_2)^3}{\theta_0^3} = \frac{F_2}{I_2}. \quad (7)$$

Ahora introduciremos las formas adimensionales de los parámetros utilizados en este análisis.

$$= \theta_0 \frac{\theta_j}{(j = 1, 2)}, \omega_j^2 = \frac{k_1 + k_{21}}{I_1}\frac{k_{21}}{I_1}\frac{k_{22}\theta_0}{I_1}\frac{c_1}{I_1}, \zeta = , \beta = , \alpha_1 = , \alpha_2 = \frac{k_{23}\theta_0^2}{I_1}\omega_2^2 = \frac{k_{21}}{I_2}\frac{k_{22}\theta_0}{I_2}, \alpha_3 = ,$$

$$\alpha_4 = \frac{k_{23}\theta_0^2}{I_2}, f_j \operatorname{sen}(\Omega_j t) = \frac{F_j}{y_o}.$$

Con base en los parámetros anteriores, podemos obtener las siguientes ecuaciones de movimiento en sus formas adimensionales:

$$\ddot{\theta}_1 + \omega_1^2\theta_1 + \zeta\dot{\theta}_1 - \beta\theta_2 + \alpha_1(\theta_1 - \theta_2)^2 + \alpha_2(\theta_1 - \theta_2)^3 = f_1 \operatorname{sen}(\Omega_1 t), \quad (8)$$

$$\ddot{\theta}_2 + \omega_2^2(\theta_2 - \theta_1) - \alpha_3(\theta_1 - \theta_2)^2 - \alpha_4(\theta_1 - \theta_2)^3 = f_2 \operatorname{sen}(\Omega_2 t). \quad (9)$$

2.2. Dinámica del sistema con control PID

El objetivo de la presente sección es proponer controladores PID para reducir la vibración torsional dañina en el sistema dinámico en este trabajo en uno de los peores casos de resonancia, como se muestra en la Figura 2. Además, el control en nuestro trabajo se representa como dos controles netos. fuerzas FC1 y FC2 que se generan para suprimir las oscilaciones de torsión en dos direccione

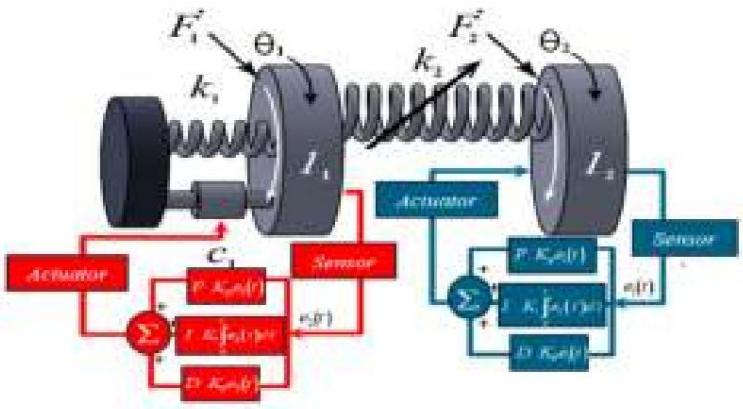


Figura 2. Modelo de diagrama esquemático de sistema principal con controladores PID.

Machine Translated by Google

integral. Aquí, y Kd denotan la ganancia de control de retroalimentación proporcional, retroalimentación Kp, Ki , ganancia de control y ganancia de control de retroalimentación derivada, respectivamente. Además, e1(t) y e2(t) denotan el valor de error con error de paso en estado estacionario cero.

Las ecuaciones de movimiento que utilizan los controladores PID acoplados al sistema dinámico no lineal como se muestra en la Figura 2 se pueden expresar de la siguiente manera:

$$\ddot{1} + \omega_1^2 \quad 1 + \varepsilon\zeta \quad \dot{1} - \varepsilon\beta \quad 2 + \varepsilon\alpha 1(\quad 1 - \quad 2)^2 + \varepsilon\alpha 2(\quad 1 - \quad 2)^3 = \varepsilon f1 \operatorname{sen}(\Omega 1t) + \varepsilon FC1 , \quad (10)$$

$$\ddot{2} + \omega_2^2 (\quad 2 - \quad 1) - \varepsilon\alpha 3(\quad 1 - \quad 2)^2 - \varepsilon\alpha 4(\quad 1 - \quad 2)^3 = \varepsilon f2 \operatorname{sen}(\Omega 2t) + \varepsilon FC2 , \quad (11)$$

$$FC1 = -Kp \quad 1 - Ki \int_{oh}^{t} 1(\tau)d\tau - Kd \quad \dot{1}, \quad (12a)$$

$$FC2 = -Kp \quad 2 - Ki \int_{oh}^{t} 2(\tau)d\tau - Kd \quad \dot{2}, \quad (12b)$$

$$\ddot{1} + \omega 2 \quad 1 - \varepsilon\beta \quad \dot{2} + \varepsilon\alpha 1(\quad 1 - \quad 2)\, 1 \quad 1 + \varepsilon\zeta \quad \dot{1}^2 + \varepsilon\alpha 2(\quad 1 - \quad 2)^3 = \varepsilon f1 \operatorname{sen}(\Omega 1t)$$
$$-\varepsilon Kp \quad 1 - \varepsilon Ki \int_{oh}^{t} 1(\tau)d\tau - \varepsilon Kd \quad \dot{1}, \quad (13)$$

$$\ddot{2} + \omega 2_2 (\quad 2 - \quad 1) - \varepsilon\alpha 3(\quad 1 - \quad 2)^2 - \varepsilon\alpha 4(\quad 1 - \quad 2)^3 = \varepsilon f2 \operatorname{sen}(\Omega 2t)$$
$$-\varepsilon Kp \quad 2 - \varepsilon Ki \int_{oh}^{t} 2(\tau)d\tau - \varepsilon Kd \quad \dot{2}. \quad (14)$$

3. Investigaciones analíticas 3.1.
Análisis de perturbación La

técnica de perturbación de escalas múltiples (MSPT) se aplica en esta sección para obtener una solución aproximada del sistema dinámico no lineal con el control propuesto (es decir, control PID) dado por las ecuaciones (13) y (14). En consecuencia, pudimos encontrar una solución aproximada de primer orden a las ecuaciones (13) y (14), propuesta de la siguiente manera [28,29]:

$$n = \quad n0 + \varepsilon \quad n1 + O\,\varepsilon^2, \ (n = 1, 2) \quad (15)$$

donde el parámetro de perturbación menor ε se ubica en el rango de 0 < ε 1. Definamos dos escalas de tiempo, T0 y T1, donde T0 = t representa una escala rápida mientras que T1 = εt es la lenta. Las derivadas del tiempo se convierten en lo siguiente:

$$\frac{d}{dt} = \frac{dT0}{dt}\frac{\partial}{\partial T0} + \frac{dT1}{dt}\frac{\partial}{\partial T1} = D0 + \varepsilon D1 + \ldots, + + \ldots \quad (16)$$

$$\frac{}{2dt^2} = \frac{d}{dt}\left(\frac{dT0}{dt}\frac{\partial}{\partial T0} + \frac{dT1}{dt}\frac{\partial}{\partial T1} + \ldots\right) = re\,0^2 + 2\varepsilon D0D1 + \ldots . \quad (17)$$

donde Dj = (j = 0, 1). ∂Tj El

siguiente conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias se construyó sustituyendo las ecuaciones (15) y (16) en las ecuaciones (13) y (14) e igualando los coeficientes de la misma potencia de ε en ambos lados: O ε

0 :

$$D^2 + \omega_1^2\, 0 \quad 10 = 0, \quad (18a)$$

$$2\,10.0^2 D + \omega_2^2 \quad 20 = \omega \quad (18b)$$

O ε 1 :

Machine Translated by Google

$$D^2 + \omega_1^2\ 11 = -2D0D1\ 10 - \zeta D0\ 10 + \beta\ 20 - \alpha 1(\ 10 - \ 20)^2 - \alpha 2(\ 10 - \ 20)^3 + f1\ \mathrm{sen}(\Omega 1t) - Kp\ 10 - Ki \int_{0}^{t} 10(\tau)d\tau - KdD0\ 10, \quad (19a)$$

$$D^2 + \omega_2^2\ 21 = \omega_2^2\ 11 - 2D0D1\ 20 + \alpha 3(\ 10 - \ 20)^2 + \alpha 4(\ 10 - \ 20)^3 + f2\ \mathrm{sen}(\Omega 2t) - Kp\ 20 - Ki \int_{0}^{t} 20(\tau)d\tau - KdD0\ 20. \quad (19b)$$

La aproximación de orden cero está representada por la solución general de las Ecuaciones (18a) y (18b), que se puede expresar de la siguiente manera:

$$10 = A1(T1)\exp(i\omega 1T0) + cc., \quad (20a)$$

$$20 = A2(T1)\exp(i\omega 2T0) + \Gamma A1(T1)\exp(i\omega 1T0) + cc. \quad (20b)$$

donde cc denota el complejo conjugado de los componentes anteriores, Am es el complejo función en T1, y $\Gamma = \frac{\omega_2^2}{\omega_2^2 - \omega_1^2}$.

Sustituyendo la ecuación (20) en la ecuación (19a), tenemos

$$\begin{aligned} D_0^2 + \omega_1^2\ 11 = {} & -2i\omega 1D1A1 - i\omega 1\zeta A1 + \Gamma\beta A1 - \alpha 2\ 6(1-\Gamma)A1A2\overline{A2} + 3(1-\Gamma)\ 3A_1^2\overline{A1}\ \exp(i\omega 1T0) \\ & - Kp - i\ Ki + \frac{}{\omega 1} + Kd\ i\omega 1\ A1 \\ & -\alpha 1(1-\Gamma)\ 2A_2^2\exp(2i\omega 1T0) + -\alpha 2(1-\Gamma)\ 3A_3\exp(3i\omega 1T0) + [\beta A2 \\ & 2 + \alpha 2\ 3A\ \overline{2A2} + 6(1-\Gamma)\ 2A1A1\overline{A2}\exp(i\omega 2T0) + -\alpha 1A_1^2\exp(2i\omega 2T0) \\ & + \alpha 2A\ 2 + {}^3\exp(3i\omega 2T0) + [2\alpha 1(1-\Gamma)A1A2]\exp(i(\omega 1+\omega 2)T0) \\ & 2\alpha 1(1-\Gamma)A1A2\exp(i(\omega 1-\overline{\omega 2})T0) + 3\alpha 2(1-\Gamma)\ 2A_2^2\ 1A2\exp(i(2\omega 1+\omega 2)T0) + \\ & 3\alpha 2(1-\Gamma)\ 2A_2^2\ \overline{1A2}\exp(i(2\omega 1-\omega 2)T0) + -3\alpha 2(1-\Gamma)A1A_2^2\exp(i(\omega 1-2\omega 2)T0) + -\alpha 1\ (1-\Gamma)^2\exp(i(\omega 1+2\omega 2)T0) \\ & \overline{2A1A1} + A2\overline{A2} - iKi + -3\alpha 2(1-\Gamma)A1A - i\ f1\ 2 + \frac{A1}{\omega 1}\exp(i\Omega 1T0) + cc., \end{aligned} \quad (21)$$

Para obtener la condición de solubilidad de la ecuación (21), el término de cercanía de las frecuencias de excitación (Ω1) y la frecuencia natural (ω1) se describe empleando el parámetro de desafinación adimensional σ1, como se muestra a continuación:

$$\Omega 1 = \omega 1 + \varepsilon\sigma 1. \quad (22)$$

Al sustituir la Ecuación (22) en la Ecuación (21) y cancelar el término que lleva a los seculares, obtenemos la solución particular de la primera aproximación (11) como la siguiente:

$$\begin{aligned} 11 = {} & M1\exp(2i\omega 1T0) + M2\exp(3i\omega 1T0) + M3\exp(i\omega 2T0) + M4\exp(2i\omega 2T0) \\ & + M5\exp(3i\omega 2T0) + M6\exp(i(\omega 1+\omega 2)T0) + M7\exp(i(\omega 1-\omega 2)T0), \\ & + M8\exp(i(2\omega 1+\omega 2)T0) + M9\exp(i(2\omega 1-\omega 2)T0) + M10\exp(i(\omega 1+2\omega 2)T0) \\ & + M11\exp(i(\omega 1-2\omega 2)T0) + M12 + cc. \end{aligned} \quad (23)$$

Aquí, Mi (i = 1, 2,..., 12) se presenta en el Apéndice A.

Sustituyendo las ecuaciones (20) y (23) en la ecuación (19b), tenemos

Machine Translated by Google

$$
\begin{aligned}
&D_0^2 + \omega_2^2\ 2 \quad 21 = -2i\omega_1 D_1 \Gamma A_1 + \alpha_4\ 3(1-\Gamma)\ 3A_2^2 \quad \overline{1A_1} + 6(1-\Gamma)A_1A_2\overline{A_2} \\
&- K_p - i\ K_i\overline{\omega_1} + i\omega_1 K_d\ \Gamma A_1 \exp(i\omega_1 T_0) + \omega_2^2 M_1 + \alpha_3(1-\Gamma)\ 2A_2^2 \quad {}_1 \exp(2i\omega_1 T_0) \\
&+ \omega_2^2 M_2 + \alpha_4(1-\Gamma)\ 3A_3^3 \exp(3i\omega_1 T_0) + \omega_2^2 M_3 - 2i\omega_2 D_1 A_2 \\
&- K_p - i\ K_i\overline{\omega_2} + i\omega_2 K_d\ A_2 - \alpha_4\ 3A_2^2\overline{A_2} + 6(1-\Gamma)\ 2A_1A_1\overline{A_2} \exp(i\omega_2 T_0) \\
&\omega_2^2 M_4 + \alpha_3 A\ \exp(2i\omega_2 T_0) + \omega_2^2 M_5 - \alpha_4 A + \omega_2^2\ {}_2^3 \exp(3i\omega_2 T_0) \\
&2M_6 - 2\alpha_3(1-\Gamma)A_1A_2 \exp(i(\omega_1+\omega_2)T_0) + \omega_2^2 M_7 - 2\alpha_3(1-\Gamma)A_1A_2 \times \exp(i(\omega_1 \\
&- \omega_2)T_0) + \omega_2^2 M_8 - 3\alpha_4(1-\Gamma)\ 2A_2^2 \quad 1A_2 \exp(i(2\omega_1+\omega_2)T_0) + \\
&\omega_2^2 M_9 - 3\alpha_4(1-\Gamma)\ 2A_2^2 \quad \overline{1A_2} \exp(i(2\omega_1-\omega_2)T_0) + \omega_2^2 M_{10} + 3\alpha_4(1-\Gamma)A_1A_2^2 \\
&\times \exp(i(\omega_1+2\omega_2)T_0) + \omega_2^2 M_{11} + 3\alpha_4(1-\Gamma)A_1\overline{A_2}^2 \exp(i(\omega_1-2\omega_2)T_0) - i\ f_2 + \omega_2^2 M_{12} \\
&\alpha_3\ (1-\Gamma)\ 2A_1A_1 + A_2\overline{A_2} - K_i\ i\ \overline{A_2} + i\ \Gamma A_1 \exp(i\Omega_2 T_0) + cc\overline{\omega_2} \qquad \overline{\omega_1} \quad + \quad \overline{+_2}
\end{aligned}
\tag{24}
$$

Para obtener la segunda condición de solubilidad de la ecuación (24), el término de cercanía de las frecuencias de excitación (Ω2) y la frecuencia natural (ω2) se describe empleando el parámetro de desafinación adimensional σ2 de la siguiente manera:

$$\Omega_2 = \omega_2 + \varepsilon\sigma_2. \tag{25}$$

Sustituyendo la Ecuación (25) en la Ecuación (24) y cancelando el término que conduce a los seculares, obtenemos la solución particular de la primera aproximación (21) como la siguiente:

$$
\begin{aligned}
21 &= N_1 \exp(i\omega_1 T_0) + N_2 \exp(2i\omega_1 T_0) + N_3 \exp(3i\omega_1 T_0) + N_4 \exp(2i\omega_2 T_0) \\
&+ N_5 \exp(3i\omega_2 T_0) + N_6 \exp(i(\omega_1+\omega_2)T_0) + N_7 \exp(i(\omega_1-\omega_2)T_0) \\
&+ N_8 \exp(i(2\omega_1+\omega_2)T_0) + N_9 \exp(i(2\omega_1-\omega_2)T_0) + N_{10} \exp(i(\omega_1+2\omega_2)T_0) \\
&+ N_{11} \exp(i(\omega_1-2\omega_2)T_0) + N_{12} + cc.
\end{aligned}
\tag{26}
$$

Aquí, Ni (i = 1, 2,..., 12) se presenta en el Apéndice A.

Después de insertar las ecuaciones (22) y (25) en las ecuaciones (21) y (24) y eliminar el término secular, las condiciones de solubilidad se pueden obtener de la siguiente manera:

$$
\begin{aligned}
2i\omega_1 D_1 A_1 = {} & -i\omega_1\zeta + \Gamma\beta - K_p + i\ K_i \quad \overline{\omega_1} - K_d\ i\omega_1\ A_1 + (-6\alpha_2(1-\Gamma))A_1A_2\overline{A_2} \\
& + -3\alpha_2(1-\Gamma) - i\ f_1\ {}_2^3\ A_1^2\overline{A_1} \\
& + \quad \exp(i\sigma_1 T_1)
\end{aligned}
\tag{27a}
$$

$$
\begin{aligned}
2i\omega_2 D_1 A_2 = {} & -\Gamma\beta - K_p + i\ K_i\ \overline{\omega_2} - i\omega_2 K_d\ A_2 + (-3\Gamma\alpha_2 - 3\alpha_4)A_2^2\overline{A_2} \\
& + (-6\Gamma\alpha_2 - 6\alpha_4)(1-\Gamma)\ 2A_1A_1\overline{A_2} \\
& + \quad \exp(i\sigma_2 T_1)
\end{aligned}
\tag{27b}
$$

Para obtener las ecuaciones amplitud-fase del sistema controlado, analizamos la solución de la Ecuación (27), intercambiando An(T1) por la forma polar como

$$U_n = 2^{\ 1}\ a_n(T_1) e^{i\gamma_n(T_1)}, \ (n = 1, 2). \tag{28}$$

Obtenemos las ecuaciones que rigen las amplitudes an y las fases γn sustituyendo la ecuación (28) por la ecuación (27) y luego separando los componentes real e imaginario.

$$\dot{a}_1 = -2\omega_2 \frac{\zeta}{2\ 1} + \frac{K_i}{} - \frac{k_d}{2}\ a_1 + \frac{-f_1}{2\omega_1}\ \text{porque}(\psi_1), \tag{29a}$$

Machine Translated by Google

$$\dot{a}1\ \gamma 1 = -2\omega 1\ 2\omega 1\frac{\Gamma\beta}{} + \frac{Kp}{}\ a1 + \frac{3\alpha 2(1-\Gamma)}{4\omega 1}\ a1a\ 2^{2} + \frac{3\alpha 2(1-\Gamma)^{3}}{8\omega 1}\ a_{1}^{3} + \frac{-f1}{2\omega 1}\ \text{pecado}(\psi 1), \tag{29b}$$

$$\dot{a}2 = \frac{Ki}{2\omega 2_{2}} - \frac{kd}{2}\ a2 + \frac{-f2}{2\omega 2}\ \cos(\psi 2), \tag{30a}$$

$$\dot{a}2\ \gamma 2 = \frac{\Gamma\beta}{2\omega 2^{+}} \frac{}{Kp2\omega 2a2} + \frac{3\Gamma\alpha 2+3\alpha 4}{8\omega 2}\ {}^{3}_{un\ 2^{+}}\ \frac{3\Gamma\alpha 2+3\alpha 4}{4\omega 2}\ (1-\Gamma)^{2\ 2\ un}1a2 + \frac{-f2}{2\omega 2}\ \text{pecado}(\psi 2) \tag{30b}$$

dónde

$$\psi 1 = \sigma 1T1 - \gamma 1,\ \psi 2 = \sigma 2T1 - \gamma 2. \tag{31}$$

Los puntos fijos en las ecuaciones (29) a (30) corresponden a las soluciones de estado estacionario del sistema, que a su vez corresponden a $\dot{a}n = 0$ y $\dot{\psi}n = 0$.

De la Ecuación (31), indicamos que $\dot{\gamma}1 = \sigma 1$ y Como resultado, $\dot{a}n = 0$ y $\dot{\gamma}2 = \sigma 2$.

$\dot{\psi}n = 0$; Las ecuaciones de respuesta en frecuencia (FRE) del caso práctico ($\dot{a}1 = 0$, $\dot{a}2 = 0$) se proporcionan como

$$0 = -\zeta + 2\omega 2_{2}\ 1\ \frac{Ki}{} - \frac{kd}{2}\ a1 + \frac{-f1}{2\omega 1}\ \text{porque}(\psi 1), \tag{32a}$$

$$a1\sigma 1 = -2\omega 1\ \frac{\Gamma\beta}{2\omega 1} + \frac{Kp}{}\ a1 + \frac{3\alpha 2(1-\Gamma)}{4\omega 1}\ a1a\ 2^{2} + \frac{3\alpha 2(1-\Gamma)^{3}}{8\omega 1}\ a_{1}^{3} + \frac{-f1}{2\omega 1}\ \text{pecado}(\psi 1), \tag{32b}$$

$$0 = \frac{Ki}{2\omega 2_{2}} - \frac{kd}{2}\ a2 + \frac{-f2}{2\omega 2}\ \cos(\psi 2), \tag{33a}$$

$$a2\sigma 2 = \frac{\Gamma\beta}{2\omega 2^{+}} \frac{}{Kp2\omega 2a2} + \frac{3\Gamma\alpha 2+3\alpha 4}{8\omega 2}\ {}^{3}_{un\ 2^{+}}\ \frac{3\Gamma\alpha 2+3\alpha 4}{4\omega 2}\ (1-\Gamma)^{2\ 2\ un}1a2 + \frac{-f2}{2\omega 2}\ \text{pecado}(\psi 2). \tag{33b}$$

3.2. Análisis de estabilidad mediante la linealización del sistema anterior

Para examinar la estabilidad de la solución no lineal de puntos fijos dada, sea

$$\begin{aligned} soy &= am0 + am1,\ \psi m \\ &= \psi m0 + \psi m1 \end{aligned} \tag{34}$$

donde am1 y ψm1 son perturbaciones que se consideran pequeñas en comparación con am0 y ψm0. Aquí, am0 y ψm0 son las soluciones de las ecuaciones (29) y (30). La ecuación (34) se sustituye en las ecuaciones (29) y (30) por la ecuación (31), conservando sólo los términos lineales en am1 y ψm1. Por lo tanto, el sistema linealizado de las ecuaciones (29) y (30) tiene las formas

$$\dot{a}11 = -\frac{\zeta}{2\omega 2\ 2} + \frac{Ki}{1} - \frac{kd}{2}\ a11 + \frac{f1}{}\ \text{sen}(\psi 10)\ \psi 11,\ 2\omega 1 \tag{35a}$$

$$\dot{\psi}11 = \frac{s1}{a10} + \frac{\Gamma\beta}{2a10\omega 1} - \frac{}{Kp2a10\omega 1} + -\frac{3\alpha 2(1-\Gamma)}{4a10\omega 1} - {}_{a\ 20\ 8\omega 1}\ \frac{9\alpha 2(1-\Gamma)\ 2+}{}^{3}\ a10\ a11 + \frac{f1}{2a10\omega 1}\ \cos(\psi 10)\ \psi 11 + -2\omega 1\ \frac{3\alpha 2(1-\Gamma)}{}\ a20\ a21, \tag{35b}$$

$$\dot{a}21 = \frac{Ki}{2\omega 2_{2}} - \frac{kd}{2}\ a21 + \frac{f2}{}\ \text{sen}(\psi 20)\ \psi 21,\ 2\omega 2 \tag{36a}$$

Machine Translated by Google

$$\dot{\psi}21 = -2\omega2\,\frac{3\Gamma\alpha2+3\alpha4}{9\Gamma\alpha2+9\alpha4}\,(1-\Gamma)^{2}\,a10\,a11 + \frac{\sigma2}{a20} - \frac{}{\Gamma\beta2a20\omega2} - \frac{Kp}{2a20\omega2} - \frac{8\omega2}{}\,a20 - \frac{3\Gamma\alpha2+3\alpha4}{4a20\omega2}\,(1-\Gamma)^{2}\,a10\,a21 + \frac{f2}{2\omega2a20}\cos(\psi20)\,\psi21 \quad (36b)$$

Las ecuaciones (35) y (36) anteriores se pueden describir como la siguiente matriz: 1,2,..., 4

$$\begin{matrix}\cdot & \cdot & \cdot \\ a11 & \psi11 & a21\end{matrix}\;.\;\psi21T = [J]\;a11\;\psi11\;a21\;\psi21T\;. \quad (37)$$

Aquí [J] está representado por las partes apropiadas de las ecuaciones (35) y (36).

Los valores propios de [J] determinados mediante la siguiente ecuación son los siguientes:

$$^{4}\lambda + \Gamma1\,\lambda^{3} + \Gamma2\,\lambda^{2} + \Gamma3\lambda + \Gamma4 = 0, \quad (38)$$

Los coeficientes de la ecuación (38) se denotan como Γm (m = 1, 2,..., 4). Las soluciones del sistema con control PID son estables si las partes reales de λ de las raíces tienen valores negativos; si no, son inestables. Es un requisito necesario y suficiente para una solución de estado estacionario utilizar el criterio de Routh-Hurwitz, que establece que todas las raíces de la ecuación (38) deben tener partes reales negativas si y sólo si todos los menores principales y los siguiente determinante D son positivos.

$$re = \begin{matrix}\Gamma1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & \Gamma4 & \Gamma3 \\ \Gamma2 & \Gamma1 & 0 & 0 \\ 0 & \Gamma3 & \Gamma2 & \Gamma1 \\ 0 & 0 & 0 & \Gamma4\end{matrix}\;. \quad (39)$$

4. Resultados y Discusión

4.1. Rendimiento histórico temporal sin control

Para analizar el comportamiento del sistema dinámico se aplica el algoritmo de Runge-Kutta de cuarto orden (ode45 en MATLAB) [30] para encontrar la solución numérica del problema dado. sistema no controlado de ecuaciones (8) y (9).

El desempeño histórico del sistema sin ningún controlador en la resonancia primaria (Ω1 = ω1, Ω2 = ω2) se muestra en la Figura 3 en los valores elegidos (ω1 = 3; ζ = 0,2; ω2 = 2; β = 0,5 ω2 ; α1 = 0,2 ; α2 = 0,3 ; Ω1 = Ω2 = ω2) .

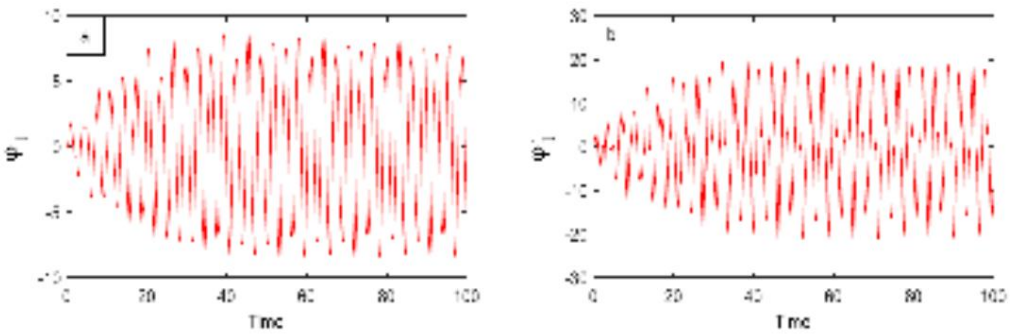
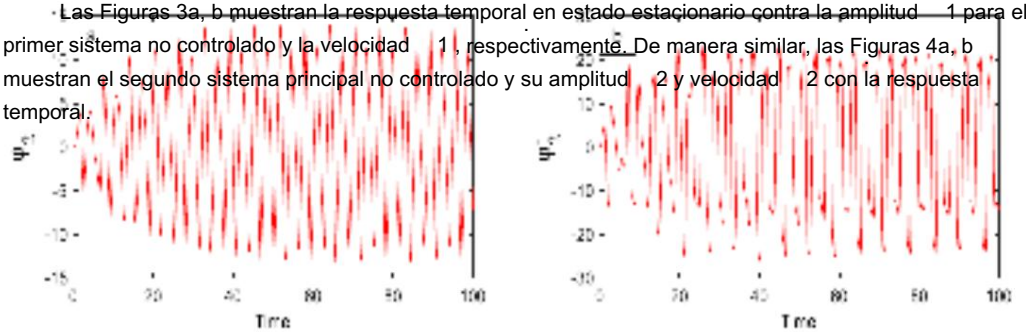


Figura 3. El diagrama de tiempo sin ningún controlador (a) la primera parte del sistema, 1 (b) la respuesta de su velocidad, 1 .

Las Figuras 3a, b muestran la respuesta temporal en estado estacionario contra la amplitud 1 para el primer sistema no controlado y la velocidad 1 , respectivamente. De manera similar, las Figuras 4a, b muestran el segundo sistema principal no controlado y su amplitud 2 y velocidad 2 con la respuesta temporal.



Machine Translated by Google

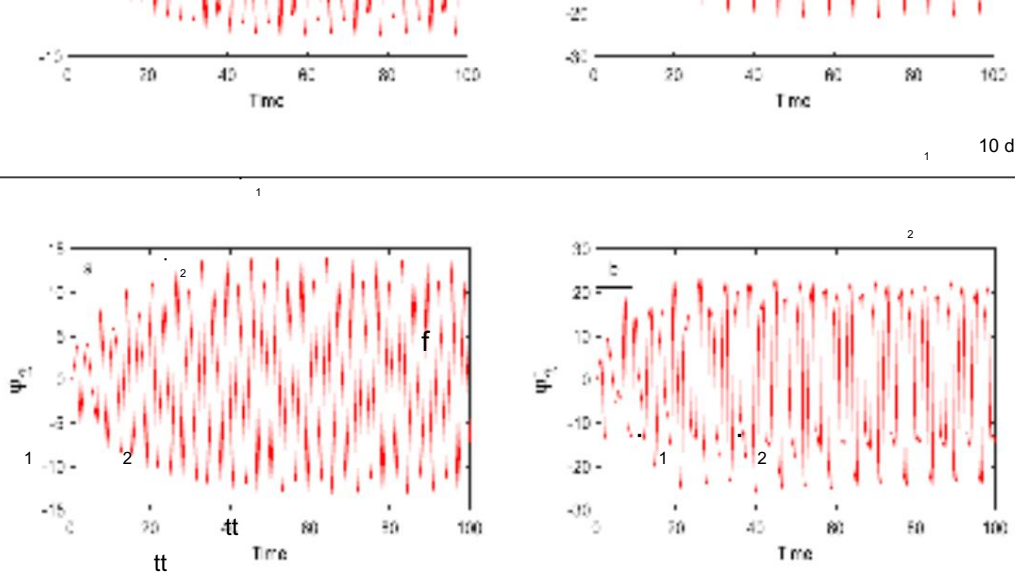


Figura 4. El diagrama de tiempo sin ningún controlador (a) la segunda parte del sistema, 2 (b) respuesta de su velocidad, 2 .

4.2. Rendimiento histórico de tiempo con control diferente

Los rendimientos de bucle cerrado de los controladores P, PI y PID para los dos sistemas 1 y 2, junto con sus velocidades correspondientes 1 se muestran en la Figura 5. Las respuestas 2 de bucle cerrado del Los controladores P y PI tradicionales son inestables y exhiben un exceso de pico. La estructura rediseñada del controlador PID proporcionó un mejor rendimiento de circuito cerrado, como en respuestas con menos sobreimpulso máximo y tiempo de estabilización, que transmite respuestas de circuito cerrado con menos pico y sobreimpulso y una curva más estable que las demás.

El estudio fue para el primer sistema principal y su velocidad, como en la Figura 5a, b, y el segundo sistema principal que se muestra en la Figura 5c, d. La Figura 5 muestra evidencia tanto de un comportamiento estable como de la ausencia de caos en las longitudes de onda y amplitudes producidas en cada sección. Utilizamos los valores de ganancia que se muestran en la Tabla 1 para obtener estos bucles cerrados utilizando los tres enfoques de control.

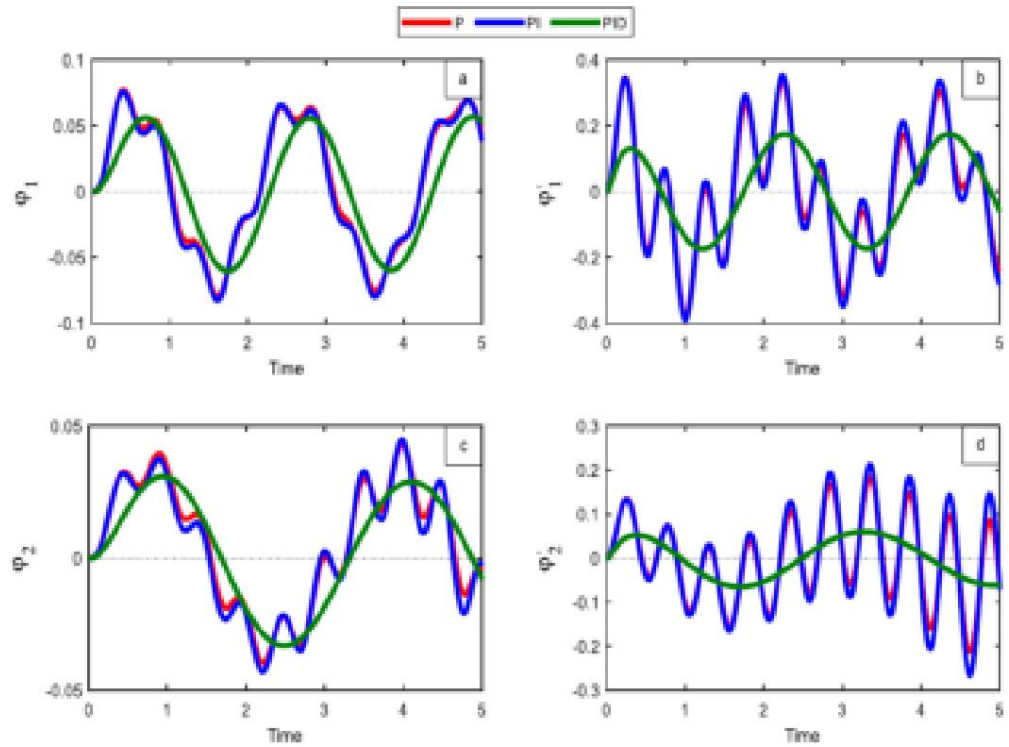


Figura 5. Respuestas en lazo cerrado usando controlador P, PI y PID. (a) la primera parte del sistema 1 (b) la respuesta de su velocidad 1 (c) la segunda parte del sistema 2 (d) la respuesta de su velocidad 2 .

Machine Translated by Google

Tabla 1. Parámetros de un controlador PID.

Controlador	Ganar		
	kp	ki	kd
PAG (Rojo)	150	-	-
PI (Azul)	150	20	-
PID (Verde)	150	20	20

En la Figura 6a,b, hay una representación de la disminución de la amplitud del primer sistema principal. de 7,788 a 0,0569 después de la utilización de un controlador PID de tiempo. Esto indica que el La efectividad del controlador (Ea = amplitud sin control/amplitud con) fue equivalente a 136,87 para el primer sistema principal, con una reducción proporcional del 99,27%. Asimismo, la amplitud del segundo sistema, que es igual a 13,59, como se muestra en la Figura 7, disminuyó a 0,02886, donde Ea = 470,89, lo que refleja una reducción proporcional del 99,79%.

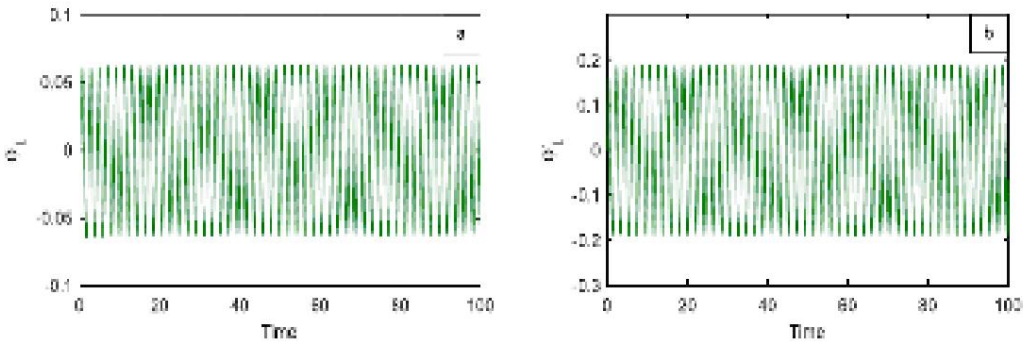


Figura 6. El diagrama de tiempo en la situación de resonancia primaria con el controlador PID (a) la primera parte del sistema (b) la respuesta de su velocidad .

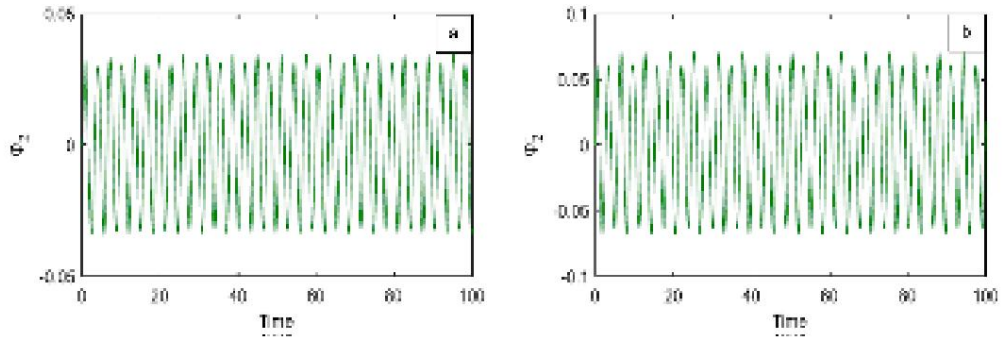


Figura 7. El diagrama de tiempo en la situación de resonancia primaria con el controlador PID (a) el segundo parte del sistema (b) la respuesta de su velocidad .

La Figura 8 ilustra el plano de fase de ambos sistemas principales antes y después de agregar el Controlador PID. La Figura 8a muestra que el primer sistema principal, con un ciclo multilímite en el caso de no agregar control, y mejorado con un ciclo limitado después de agregar PID. Con el segundo sistema principal, como se muestra en la Figura 8b antes de agregar el control, el plano de fase es el ciclo de límite múltiple, que disminuyó después de agregar PID.

Machine Translated by Google

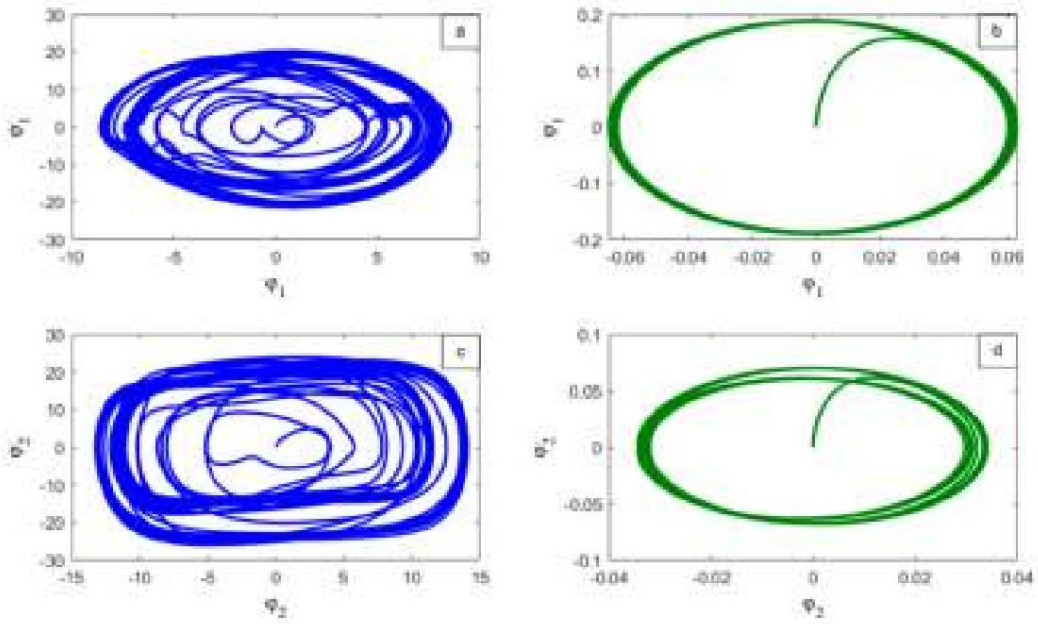


Figura 8. El plano de fase del sistema (a) φ_1 con velocidades angulares $\dot{\varphi}_1$ en la situación de resonancia primaria sin control (b) φ_1 con velocidades angulares $\dot{\varphi}_1$ en situación de resonancia primaria con controlador PID (c) φ_2 con velocidades angulares $\dot{\varphi}_2$ en situación de resonancia primaria sin control (d) φ_2 con velocidades angulares $\dot{\varphi}_2$ en la situación de resonancia primaria con el controlador PID.

4.3. Curvas de respuesta de frecuencia (FRC)

Las curvas de respuesta de frecuencia de las Ecuaciones (32) y (33) del primer sistema principal a1, frente al parámetro de desafinación σ1, se ilustran en la Figura 9a sin la influencia de ningún controlador, donde la línea negra sólida representa la solución estable mientras que la línea roja La línea indica la solución inestable de la misma ecuación. La amplitud del primer sistema principal se reduce completamente después de agregar el controlador P; sin embargo, como muestra la Figura 9b, esta porción decreciente de la curva es inestable. La curva de respuesta en la Figura 9c muestra lo que sucede cuando se agrega un controlador PI. Se descubre que esto reduce completamente la amplitud del sistema primario a1, pero la curva es absolutamente inestable. Después de agregar un controlador PID, el comportamiento del primer sistema principal se muestra en la Figura 9d, donde se descubre que la curva tiene una amplitud monótonamente decreciente y es completamente estable. Las curvas de respuesta del segundo sistema principal a2, frente al parámetro de desafinación σ2, se ilustran en la Figura 10a sin la influencia de ningún controlador. La amplitud del segundo sistema principal se reduce completamente después de agregar el controlador P; sin embargo, como muestra la Figura 10b , esta porción decreciente de la curva es inestable. La curva de respuesta en la Figura 10c muestra lo que sucede cuando se agrega un controlador PI. Se descubre que este controlador reduce la amplitud del segundo sistema a2, pero la curva se comporta de forma inestable. Después de agregar un controlador PID, el comportamiento del segundo sistema principal se muestra en la Figura 10d, donde se descubre que la curva tiene una amplitud monótonamente decreciente y es completamente estable. La Figura 11 ilustra claramente la diferencia en las respuestas de las curvas antes y después de que se incluyera el controlador PID para los dos sistemas primarios, a1 y a2. La Figura 11a,b demostró cómo el sistema solo es estable y no contiene partes inestables, así como también cómo la adición de un controlador PID hace que la amplitud caiga con a1 y desaparezca con a2. La amplitud aumentó al aumentar los valores de la fuerza externa f1 para el primer sistema principal a1, como ilustra la Figura 12a , con el primer componente del sistema, a1. La amplitud del primer sistema principal se desplaza hacia la derecha y muestra una curva monótonamente decreciente a medida que aumentan los valores de la frecuencia natural ω_1 , como se ve en la Figura 12b. La amplitud disminuye monótonamente cuando los valores del coeficiente de amortiguación ζ aumentan, como se muestra en la Figura 12c. . A medida que aumentaron los valores del parámetro no lineal β , la amplitud de la primera mitad del sistema se inclinó hacia la izquierda, como se ilustra en la Figura 12d. Por últ

Machine Translated by Google

se comporta tanto para valores de parámetros positivos como negativos. Para valores negativos muy pequeños de α2, la curva se dobla hacia la izquierda, pero para valores positivos altos de α2, la curva se dobla hacia la derecha. La amplitud del segundo sistema principal aumentó para valores grandes de la fuerza externa f2, como se muestra en la Figura 13a, con la segunda parte del sistema, a2. Como se ve en la Figura 13b, la amplitud del segundo sistema principal se mueve hacia la derecha y muestra una curva decreciente monótona para valores aumentados de la frecuencia natural ω2. Como se ve en la Figura 13c, la amplitud permanece constante y se desplaza hacia la derecha para valores positivos extraordinariamente altos del parámetro no lineal α4 y hacia la izquierda para valores negativos extraordinariamente bajos de α4. La respuesta de las ganancias con la amplitud se examina en la Figura 14. La Figura 14a establece los valores de Ki y Kd . Tras un examen más detallado de la influencia de Kp, descubrimos que cuando los valores de Kp aumentan, la amplitud de ambos sistemas primarios disminuye mien Con diferentes valores de Ki , observamos que la amplitud de ambos sistemas principales aumentó de manera indistinguible para los valores fijos de Kp y Kd . Sin embargo, cuando Ki = 80, ambos sistemas principales se comportaron de manera inestable, como se muestra en la Figura 14b. Por último, aunque las otras dos ganancias son fijas, la Figura 14c muestra la mejora de Kd . La pintura hizo evidente que la amplitud es inestable en los valores iniciales de Kd y que, en ambos sistemas, la amplitud disminuye a medida que Kd aumenta.

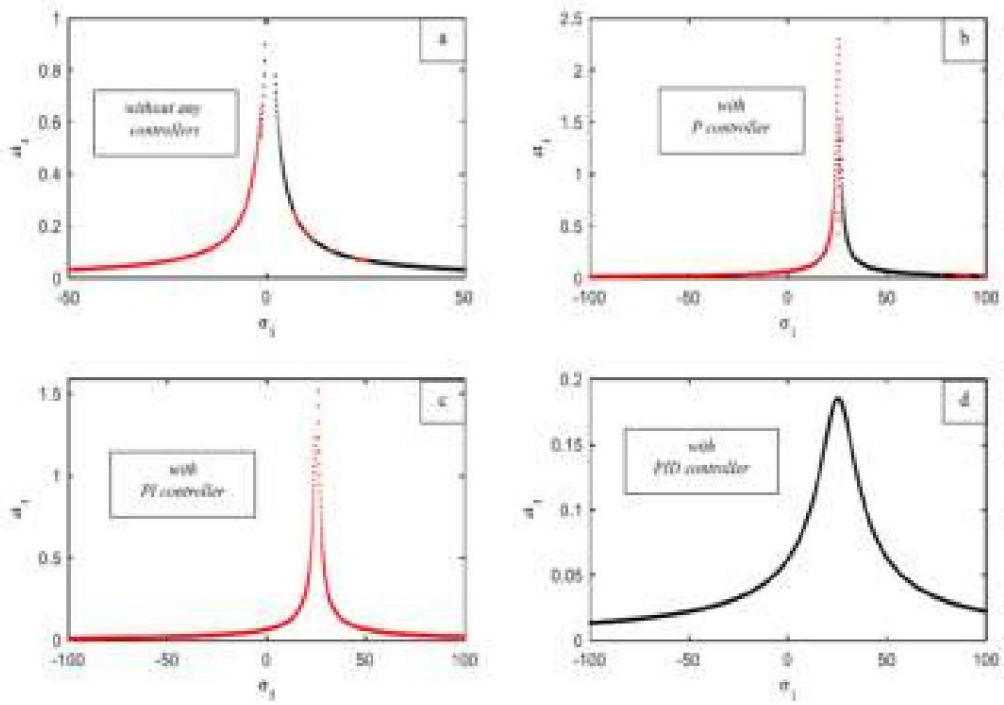


Figura 9. Las curvas de respuesta de frecuencia en el plano σ1 y la primera parte del sistema (a1) (a) sin controlador, (b) con un controlador P, (c) con un controlador PI, y (d) con un Controlador PID. (color rojo) región inestable (color negro) región estable

Machine Translated by Google

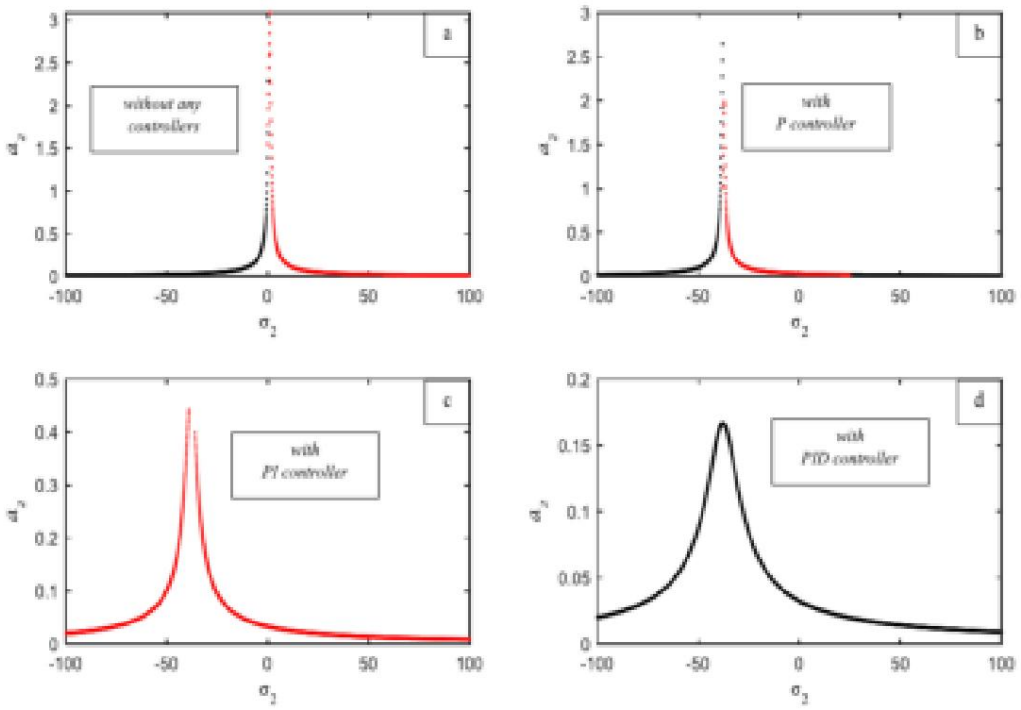


Figura 10. Las curvas de respuesta de frecuencia en el plano σ2 y la primera parte del sistema (a2) (a) sin controlador, (b) con controlador P, (c) con controlador PI y (d) con controlador PID . (color rojo) región inestable (color negro) región estable.

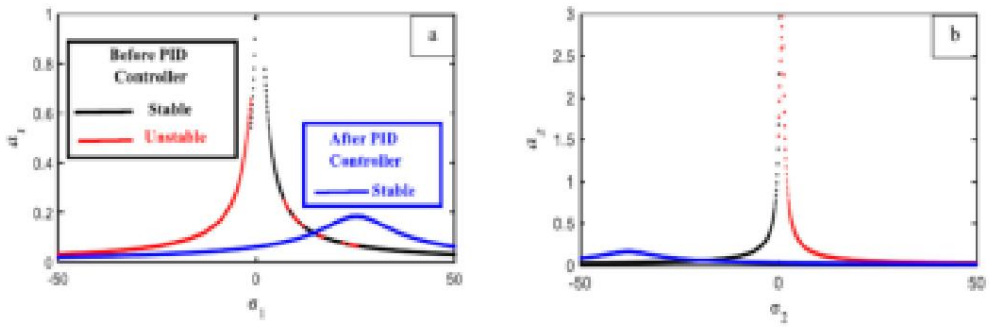


Figura 11. Respuesta de frecuencia antes y después de PID: (a) primer sistema principal a1 y (b) primer sistema principal a2.

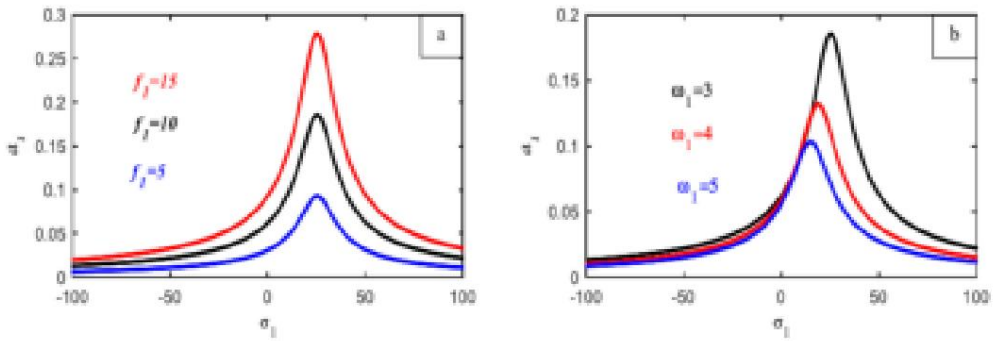


Figura 12. Continuación.

Machine Translated by Google

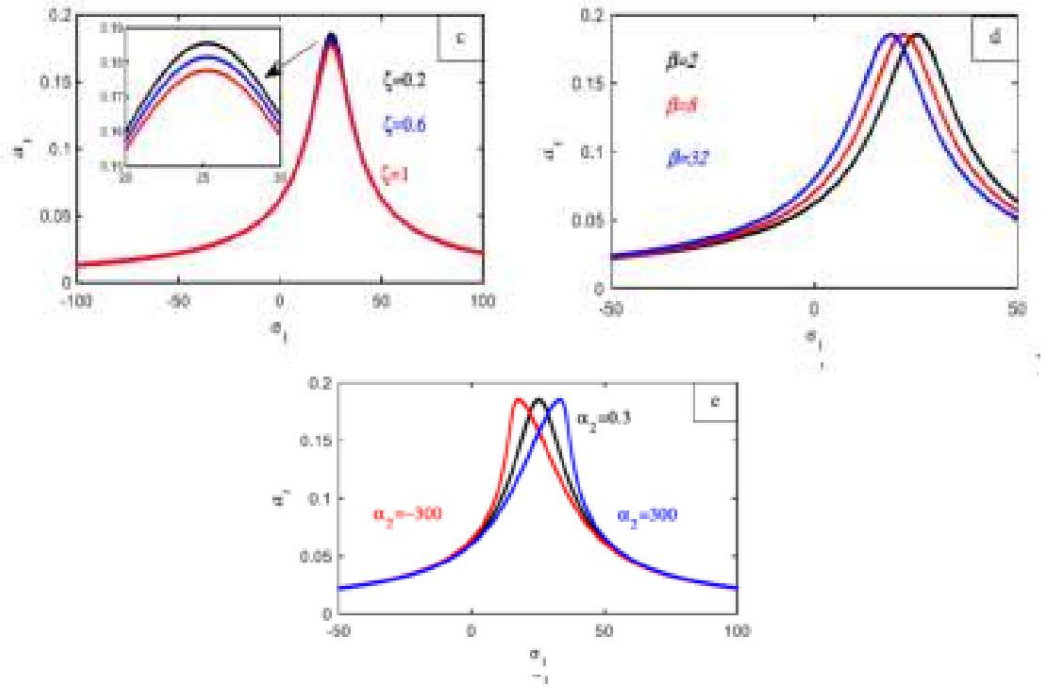


Figura 12. (a) El FRC de la acción de la fuerza externa f1 . (b) Frecuencia natural ω1 . (c) Amortiguación coeficiente ffi ζ. (d) Parámetro lineal β. (e) Parámetro no lineal α2. Todos estos se refieren a la primera parte de el sistema a1 .

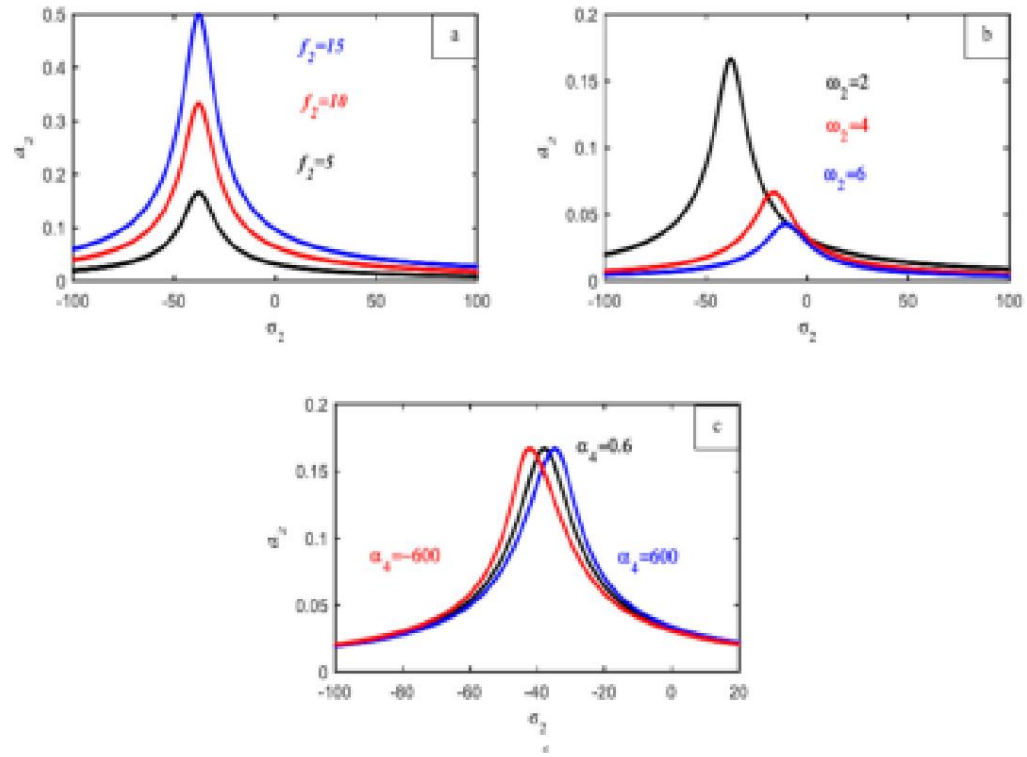


Figura 13. (a) El FRC de la acción de la fuerza externa f2. (b) Frecuencia natural ω2. (c) No lineal parámetro α4 . Todos estos se refieren a la segunda parte del sistema a2.

Machine Translated by Google

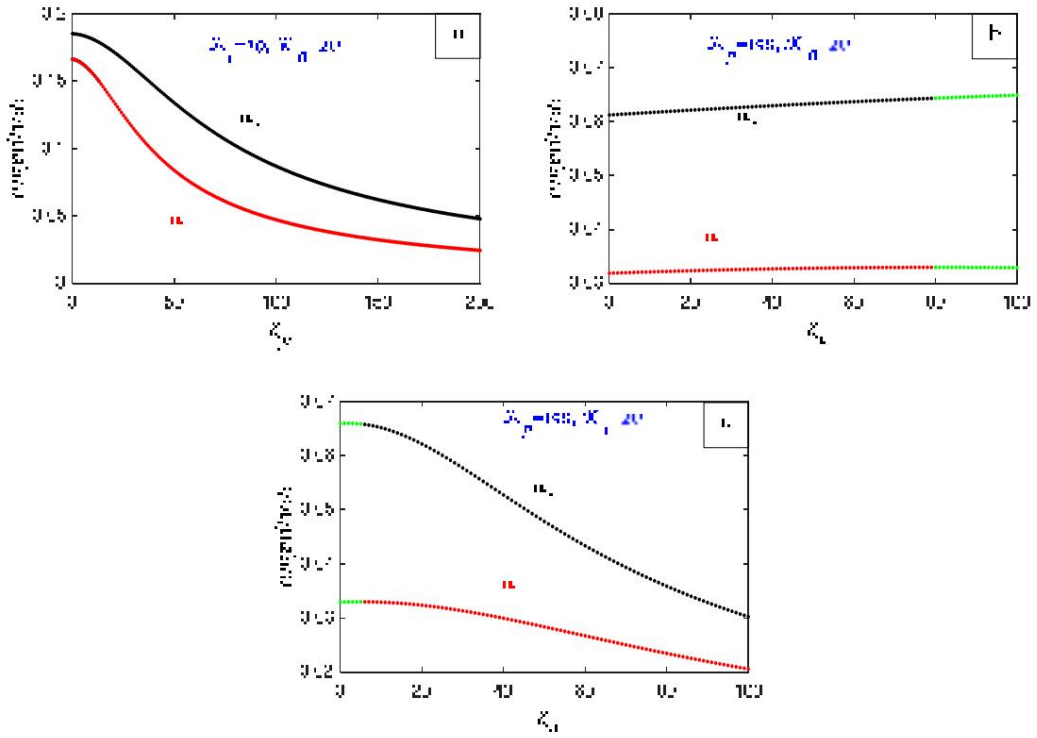


Figura 14. Curva de respuesta para las amplitudes del sistema con (a)Kp (b) Ki (c) Kd .

5. Comparación

5.1. Comparación de las soluciones de respuesta temporal de la perturbación con técnicas numéricas

Las soluciones analíticas de las Ecuaciones (29) y (30) se representan gráficamente mediante líneas (---), que corresponden con las soluciones numéricas de las Ecuaciones (13) y (14), como se muestra en la Figura 15a para el primer sistema principal, y en la Figura 15b para el segundo sistema principal.

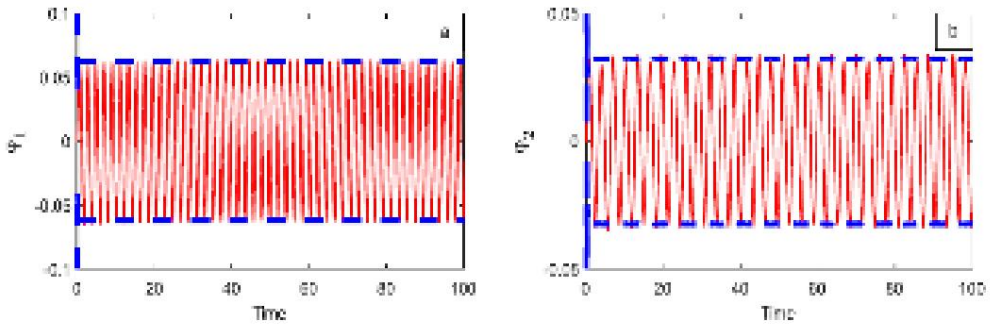
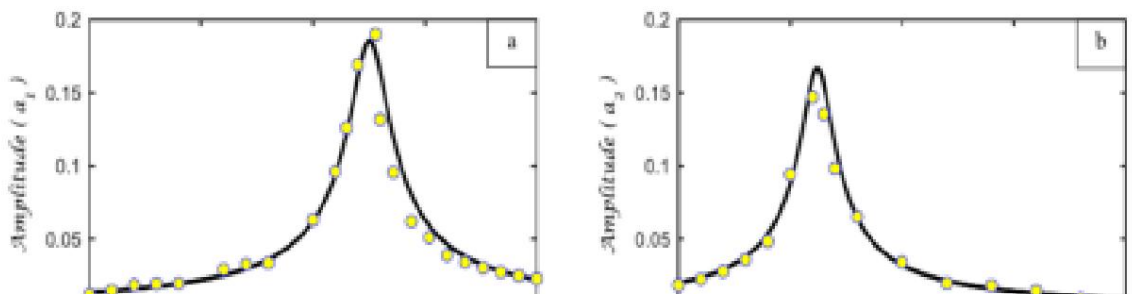


Figura 15. Comparación de simulación numérica y análisis de perturbaciones para ambos modos marco en controladores PID. (a) la primera parte del sistema 1 (b) la segunda parte del sistema 2

5.2. Comparación entre RK-4 y FRC

La Figura 16 muestra una concordancia aceptable con las soluciones numéricas de las Ecuaciones (4) y (5), usando (RK-4) resaltado por círculos amarillos y las curvas de respuesta en frecuencia (FRC) para los dos sistemas principales a1 en la Figura 16a y a2 en Figura 16b, que se presentan con la línea continua.



Machine Translated by Google

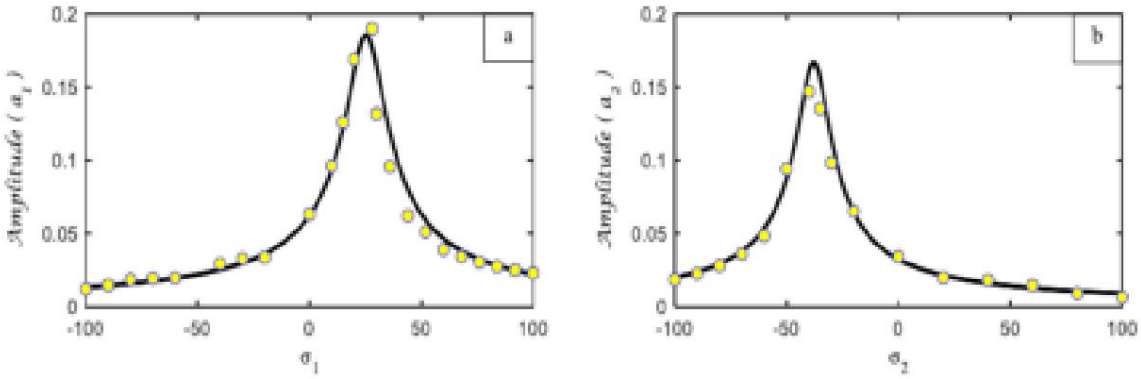


Figura 16. Contraste entre la solución FRC y la solución RK-4 para ambos sistemas (a) la primera parte del sistema a1 (b) la segunda parte del sistema a2.

5.3. Comparación con trabajos publicados

Para trabajos anteriores se puede afirmar lo siguiente:

(1) La vibración torsional se examinó en una revisión de la literatura [25] para el control activo y pasivo, que es una herramienta útil para gestionar la vibración torsional de un sistema dinámico no lineal que está expuesto a varias excitaciones paramétricas.

(2) Usaron las ecuaciones de respuesta de frecuencia; La estabilidad del sistema se examina en las proximidades de resonancias subarmónicas e internas simultáneas.

(3) El comportamiento del sistema con y sin dos controladores está integrado numéricamente y examinado.

Para este trabajo, después de agregar control, comparamos las historias temporales de nuestro trabajo y un estudio previo y descubrimos que las amplitudes y longitudes de onda mostraban que las soluciones generadas exhibían un comportamiento estable y carecían de caos.

6. Conclusiones

En este artículo se ha abordado el control de la vibración torsional de un sistema dinámico no lineal . Se han propuesto controladores proporcionales integrales derivativos (PID) para controlar la vibración torsional dañina del sistema, como se muestra en la Figura 2 para uno de los peores casos de resonancia. Se aplica el enfoque de perturbación de múltiples escalas para obtener la solución de aproximación para el sistema controlado acoplado. Se dibuja la historia temporal para estudiar las amplitudes de vibración en estado estacionario y la efectividad de los algoritmos de control aplicados para suprimir la vibración. Además, la estabilidad y los efectos de diferentes parámetros del sistema y de control se ilustran en curvas de respuesta de frecuencia según el criterio de Routh-Hurwitz. Con base en la discusión anterior, se pueden sacar las siguientes conclusiones:

(1) Cabe señalar que el controlador PID se opera para reducir las vibraciones peligrosas en un poco tiempo.

(2) Este trabajo proporcionó una comparación entre los controladores P, PI y PID en el contexto de FRC.

(3) Se examinan y muestran numéricamente los efectos de numerosos coeficientes.

(4) A pesar de la frecuencia de excitación, el controlador PID es el control más eficaz Método para minimizar las vibraciones en la estructura.

(5) La respuesta de bucle cerrado de desplazamiento relativo se obtiene con el controlador PID, que comprende el sobreimpulso de pico.

(6) La estructura modificada del controlador PID, como ocurre con los controladores P y PI, se utiliza para controlar el desplazamiento relativo del sistema de suspensión. A partir de los resultados, el controlador PID proporcionó un mejor rendimiento de circuito cerrado en términos de sobreimpulso máximo y tiempo de estabilización, que se minimizan.

Machine Translated by Google

Contribuciones de los autores: KA: recursos; metodología; análisis formal; validación; visualización; escritura—borrador original; redacción: revisión y edición (igual); adquisición de financiación. ATE-S.: conceptualización ; investigación; metodología; curación de datos; validación; escritura—borrador original; Escritura: revisión y edición. FTE-B.: análisis formal; validación; investigación; metodología; curación de datos; conceptualización; escritura—borrador original; Escritura: revisión y edición. Todos los autores han leído y aceptado la versión publicada del manuscrito.

Financiamiento: Esta investigación fue financiada por el Proyecto de Apoyo a Investigadores, número de subvención (RSPD2024R 588), Universidad King Saud, Riyadh, Arabia Saudita.

Declaración de disponibilidad de datos: todos los datos generados o analizados durante este estudio se incluyen en este artículo publicado.

Agradecimientos: Los autores extienden su agradecimiento al Proyecto de Apoyo a Investigadores, número de subvención (RSPD2024R588), Universidad Rey Saud, Riyadh, Arabia Saudita.

Conflictos de intereses: Los autores no han revelado ningún conflicto de intereses.

Nomenclatura

I1 , I2	Momento de masa polar del sistema dinámico no lineal.
k1 , k2	Rigidez del resorte lineal del sistema dinámico no lineal.
k21, k22, k23	Partes de rigidez cuadrática y cúbica.
$F^{\bullet}_{1}$, $F^{\bullet}_{2}$	Fuerzas de excitación
c1	Coeficientes de amortiguación lineal del sistema dinámico no lineal.
ω1 , ω2	Frecuencias naturales ζ
	Coeficiente de amortiguación
β	Parámetro lineal αi(i =
1, 2, 3, 4) Parámetro no lineal	
FC1 , FC2	control forzado
kp	ganancia proporcional
kd	Ganancia derivada
Ki	ganancia integral
θ0	Ángulo de referencia

Apéndice A

$$M1 = \frac{\alpha 1(1-\Gamma)\,2A\,2^{1}}{3\omega 2}\,,\ M2 = \frac{\alpha 2(1-\Gamma)\,3A\,3^{1}}{8\omega 2}\,,\ M3 = \frac{\beta A2+\alpha 2(3A\,2\,\overline{2A2}+6(1-\Gamma)\,2A1A1\overline{A2})}{\omega 2\;1-\omega 2}$$

$$M4 = \frac{-\alpha 1A\,\frac{2}{1}}{\omega 2\;1-4\omega 2\;2}\,,\ M5 = \frac{\alpha 2A\,\frac{3}{2}}{\omega 2\;1-9\omega 2\;2}\,,\ M6 = \frac{2\alpha 1(1-\Gamma)A1A2}{1-(\omega 1+\omega 2)}\,2\,,\ M7 = \omega 2\ \frac{2\,2\alpha 1(1-\Gamma)A1\overline{A2}}{\omega 2\;1-(\omega 1-\omega 2)}\,2$$

$$M8 = \frac{3\alpha 2(1-\Gamma)\,2A\,2\quad 1A2}{-\,(2\omega 1+\omega 2)}\,2\,,\ M9 = \omega 2\ \frac{3\alpha 2(1-\Gamma)\,2A\,2\quad \overline{1A2}}{-\,(2\omega 1-\omega 2)}\,2\,,\ M10 = \omega 2\ \frac{-3\alpha 2(1-\Gamma)A1A\ \frac{2}{2}}{\omega 2_{1}-(\omega 1+2\omega 2)}\,2$$

$$M11 = \frac{-3\alpha 2(1-\Gamma)A1A\ \overline{\ }^{2}\ \frac{}{2}}{(\omega 1-2\omega 2)\,1}\,2\,,\ M12 = \omega 2 - \frac{-\alpha 1\,(1-\Gamma)\,2A1\overline{A1}+A2\overline{A2}-iKi\ \frac{A1}{\omega 1}}{1}$$

$$N1 = \frac{1}{\omega 2-\omega 2\;2\;1}\ -2i\omega 1D1\Gamma A1+\alpha 4\;3(1-\Gamma)\;3A\;2\quad \overline{1A1}+6(1-\Gamma)A1A2\overline{A2}-\overline{Kp}-\quad \frac{Ki}{\omega 1}+\omega 1Kd\;\Gamma A1$$

$$N2 = \frac{\omega 2\;2M1+\alpha 3(1-\Gamma)\;2A\;2_{1}}{\omega 2_{2}-4\omega 2_{1}}\,,\ N3 = \frac{\omega 2\;2M2+\alpha 4(1-\Gamma)\;3A\;3_{1}}{\omega 2_{2}-9\omega 2_{1}}$$

Machine Translated by Google

$$N4 = \frac{-\omega 2\,2M4 - \alpha 3A\,\frac{2}{2}}{3\omega 2_2}, \quad N5 = \frac{-\omega 2\,2M5 + \alpha 4A\,\frac{3}{2}}{8\omega 2_2}, \quad N6 = \frac{\omega 2\,2M6 - 2\alpha 3(1-\Gamma)A1A2\,\omega 2 - (\omega 1+\omega 2)\,2}{2}$$

$$N7 = \frac{\omega 2\,2M7 - 2\alpha 3(1-\Gamma)A1A2\,\overline{\omega 2 - \frac{}{2}}}{(\omega 1_2 - \omega 2)}, \quad N8 = \frac{\omega 2\,2M8 - 3\alpha 4(1-\Gamma)\,2A\,\frac{2}{2}A2}{\omega 2_2 - (2\omega 1+\omega 2)\,\frac{2}{2}}$$

$$N9 = \frac{\omega 2\,2M9 - 3\alpha 4(1-\Gamma)\,2A\,\frac{2}{2}\overline{A2}}{\omega 2_2 - (2\omega 1-\omega 2)\,2}, \quad N10 = \frac{\omega 2\,2M10 + 3\alpha 4(1-\Gamma)A1A\,\omega 2 - (\omega 1+2\omega 2)\,\frac{2}{2}\,\frac{2}{2}}{2}$$

$$N11 = \frac{\omega 2\,2M11 + 3\alpha 4(1-\Gamma)A1A\,\omega 2 - (\omega 1-2\omega 2)\,\overline{\frac{2}{2}}}{2}, \quad N12 = \frac{\omega 2\,2M12 + \alpha 3\,(1-\Gamma)\,2A1\overline{A1} + A2\overline{A2} - Ki\,\frac{A2\,\Gamma A1 + \omega 2}{\omega 1}}{\omega 2_2}$$

Referencias

1. Sowmya, VS; Dharsini, SP; Dharshini, RP; Aravind, P. Aplicación de varias técnicas de ajuste del controlador PID para una temperatura sistema. Int. J. Computación. Aplica. 2014, 103, 32–34.
2. Pradeepkannan, D.; Sathiyamoorthy, S. Implementación del controlador PID de ganancia programada para un proceso de tanque esférico acoplado no lineal. Int. J. Mech. Mecatrón. Ing. 2014, 14, 93–98.
3. Sabri, Luisiana; Hussein, AA Implementación de un controlador difuso y PID en un sistema de nivel de agua utilizando LabView. Int. J. Computación. Aplica. 2015, 116, 6-10.
4. Bashiri, AH Estudio empírico de control PID robusto/desarrollado para sistemas dinámicos retardados en el tiempo no lineales en el dominio del tiempo discreto. Heliyon 2024, 10, e29749. [Referencia cruzada] [PubMed]
5. Hamed, A.; Shaban, EM; Darwish, RR; Abdel Ghany, AM Diseño e implementación de control PID discreto aplicado a Tanque de betún basado en un nuevo enfoque de técnica de colocación de postes. Int. J. Dinám. Controlar 2017, 5, 604–613. [Referencia cruzada]
6. Shaban, EM; Hamed, A.; Darwish, RR; Abdel Ghany, AM Nuevo enfoque de ajuste del controlador PI/PID discreto aplicado al sistema bituminoso basado en una formulación de espacio de estados no mínimo. En Actas de la 25.ª Conferencia Internacional sobre Teoría y Aplicaciones de la Computación (ICCTA), Alejandría, Egipto, 24 a 26 de octubre de 2015; págs. 52–57.
7. Hamed, AR; Shaban, EM; Abdelhaleem, AM Implementación industrial del control PID+ de parámetros dependientes del estado para un sistema de tanque de betún retardado en el tiempo no lineal. Irán J. Sci. Tecnología. Trans. eléctrico. Ing. 2022, 46, 743–751. [Referencia cruzada]
8. Dijo, H.; Shaban, EM; Abdelhamid, A. Control PID+ de parámetros dependientes del estado aplicado a un brazo manipulador no lineal. En Avances Recientes en Ingeniería Matemática y Física; Farouk, M., Hassanein, M., Eds.; Springer: Cham, Suiza, 2020.
9. Dano, ML; Julli'ere, B. Control activo de la distorsión inducida térmicamente en estructuras compuestas utilizando actuadores compuestos de macrofibra . Madre inteligente. Estructura. 2007, 16, 2315–2322. [Referencia cruzada]
10. Kumar, RS; Ray, MC Control activo de vibraciones geométricamente no lineales de carcasas de sándwich inteligentes doblemente curvadas usando 1–3 compuestos piezoeléctricos. Compos. Estructura. 2013, 105, 173–187. [Referencia cruzada]
11. Saeed, N.; Kamel, M. Controlador PD no lineal para suprimir las oscilaciones no lineales del sistema de rotor Jeffcott con soporte horizontal. Int. Mecánico no lineal. 2016, 87, 109–124. [Referencia cruzada]
12. Fey, RHB; Wouters RM, T.; Nijmeijer, H. Control proporcional y derivativo para la mitigación de vibraciones en estado estacionario por partes sistema de vigas lineales. Dyn no lineal. 2010, 60, 535–649. [Referencia cruzada]
13. Eissa, M.; Kandil, A.; El Ganaini, WA; Kamel, M. Análisis de las vibraciones de un sistema de levitación magnética no lineal controladas por un controlador derivativo proporcional retardado en el tiempo. Dyn no lineal. 2015, 79, 1217–1233. [Referencia cruzada]
14. Eissa, M.; Kandil, A.; Kamel, M.; El-Ganaini, WA Sobre el control de la respuesta de resonancias primarias y paramétricas de un Sistema de levitación magnética no lineal. Meccanica 2015, 50, 233–251. [Referencia cruzada]
15. Bauomy, SA; EL-Sayed, AT Ley de controlador derivativo proporcional no lineal para carcasa laminada MFC. Física. scr. 2020, 95, 095210. [Referencia cruzada]
16. Hote, YV; Jain, S. Diseño de controlador PID para control de frecuencia de carga: desafíos pasados, presentes y futuros. IFAC-Pap. En línea 2018, 51, 604–609. [Referencia cruzada]
17. Darwish, NM Diseño de controlador PID en el dominio de la frecuencia para sistemas de retardo de tiempo utilizando el método directo. Trans. Inst. Medidas. Controlar 2018, 40, 940–950. [Referencia cruzada]
18. Zhao, C.; Guo, L. Diseño de controlador PID para sistemas inciertos no lineales de segundo orden. Ciencia. Inf. China. Ciencia. 2017, 60, 022201. [Referencia cruzada]
19. Hanafi, D. Diseño de controlador PID para suspensión semiactiva de automóvil basado en el modelo de identificación de sistema inteligente. En Actas de la IEEE Computer Society, Segunda Conferencia Internacional sobre Ingeniería y Aplicaciones Informáticas, Bali, Indonesia, 19 a 21 de marzo de 2010; págs. 60–63.

Machine Translated by Google

20. Constantín, M.; Popescu, OS; Mastorakis, NE Ensayos y simulación de suspensión de vehículos de motor. Int. J. Sistema. Aplica. Ing. Desarrollo. 2009, 3, 74–83.
21. Kumar, MS Desarrollo de sistema activo para automóviles utilizando controlador PID. En las actas del Congreso Mundial sobre Engineering, Londres, Reino Unido, 2 a 4 de julio de 2008; Volumen II.
22. Govinda, KE; Raghul, S.; Kishore, KR; Mathan, KM; Prasanth, C. Mejora del rendimiento de circuito cerrado de semiactivos Sistema de suspensión con controlador I-PD. Madre. Ciencia. Ing. 2019, 561, 012085. [Referencia cruzada]
23. Amer, YA; EL-Sayed, AT; El-Bahrawy, FT Reducción de la vibración torsional del sistema de accionamiento principal del tren de laminación mediante negativo retroalimentación de velocidad bajo excitación paramétrica. J. Mech. Ciencia. Tecnología. 2015, 29, 1581–1589. [Referencia cruzada]
24. Wenzhi, G.; Zhiyong, H. Estudio de prueba de simulación y control activo sobre la vibración torsional del eje del rotor de un turbogenerador grande. Mec. Mach. Teoría 2010, 45, 1326-1336. [Referencia cruzada]
25. El-Sayed, AT; Bauomy, HS Controladores pasivos y activos para suprimir la vibración torsional de sistemas de múltiples grados de libertad . J. Vib. Controlar 2015, 21, 2616–2632. [Referencia cruzada]
26. Jianhui, W.; Yushen, W.; Philip Chen, CL; Zhi, L.; Wenqiang, W. Control adaptativo activado por eventos PI para sistemas no lineales MIMO con retardo de entrada. inf. Ciencia. 2024, 677, 120817.
27. Yang, WW; Yang, YJ; Tang, XY; Zhang, KR; Li, JC; Xu, C. Una estrategia de control adaptativo de P/PI para un reactor solar volumétrico de reformado de metano/vapor con gestión térmica pasiva. Química. Ing. Ciencia. 2023, 281, 119005. [Referencia cruzada]
28. Kevorkian, J.; Cole, JD Métodos de escala múltiple y perturbación singular. En Ciencias Matemáticas Aplicadas; Springer: Berlín/Heidelberg, Alemania, 1996.
29. Nayfeh, A. Métodos de perturbación; Wiley: Nueva York, NY, Estados Unidos, 1973.
30. Dukkipati, RV Resolución de problemas de análisis de vibraciones utilizando Matlab; New Age International Pvt Ltd Editores: Nueva Delhi, India, 2007.
31. Bauomy, HS; El -Sayed, AT Controlador mixto (IRC+ NSC) involucrado en el modelo de haz voladizo de respuesta de vibración armónica. Medidas. Controlar 2020, 53, 1954–1967. [Referencia cruzada]
32. Kamel, M.; Eissa, M.; El-sayed, AT Reducción de la vibración de un péndulo de resorte no lineal bajo excitación multiparamétrica a través de un absorbente longitudinal. Física. scr. 2009, 80, 025005. [Referencia cruzada]
33. Bauomy, HS; El-Sayed, AT; Salem, AM; El-Bahrawy, FT Las oscilaciones del actuador magnetostrictivo gigante mejorado a través de un amortiguador de retroalimentación de posición positiva. OBJETIVOS Matemáticas. 2023, 8, 16864–16886. [Referencia cruzada]
34. Bauomy, SA; El-Sayed, AT; El-Bahrawy, FT; Salem, AM Seguridad de la estructura de un eje de giro continuo frente a factores no lineales. vibración con NIPPF. Alex. Ing. J. 2023, 67, 193–207. [Referencia cruzada]
35. Bauomy, SA; El -Sayed, AT Rendimiento de vibración de un sistema transportador vertical bajo dos resonancias simultáneas. Arco. Aplica. Mec. 2018, 88, 1349–1368. [Referencia cruzada]
36. El-Sayed, AT; Bauomy, resultados del controlador HS NIPPF versus ANIPPF en un sistema de transmisión de corte de accionamiento semidirecto en un esquilador. Fractales de Solitones del Caos 2022, 156, 111778. [CrossRef]
37. Formación de ecuaciones de movimiento para sistemas de múltiples grados de libertad. Disponible en línea: www.efunda.com/formulae/ vibraciones/mdof_eom.cfm (consultado el 1 de enero de 2013).

Descargo de responsabilidad/Nota del editor: Las declaraciones, opiniones y datos contenidos en todas las publicaciones son únicamente de los autores y contribuyentes individuales y no de MDPI ni de los editores. MDPI y/o los editores renuncian a toda responsabilidad por cualquier daño a personas o propiedad que resulte de cualquier idea, método, instrucción o producto mencionado en el contenido.

Machine Translated by Google

cálculo

MDPI

Revisar

Revisión sistemática de modelos de pronóstico utilizando la evolución Sistemas difusos

Sebastián Camilo Vanegas Ayala [1,2,*,†], Julio Barón-Velandia [1,†] y Efrén Romero-Riaño [3,†]

[1] Doctorado en Ingeniería, Facultad de Ingeniería, Universidad Distrital Francisco José de Caldas, Bogotá 111611-111611537, Colombia; jbaron@udistrital.edu.co Programa
[2] de Ingeniería de Sistemas, Facultad de Ingeniería y Ciencias Básicas, Fundación Universitaria Los Libertadores, Bogotá 111221-111221440, Colombia

[3] Subdirección de Investigación, Observatorio Colombiano de Ciencia y Tecnología (OCyT), Bogotá 111311-111311474, Colombia; eromero@ocyt.org.co
* Correspondencia: scvanegasa@libertadores.edu.co
† Estos autores contribuyeron igualmente a este trabajo.

Resumen: Actualmente, el aumento de dispositivos capaces de recoger continuamente datos sobre variables dinámicas y no estacionarias afecta a los modelos predictivos, especialmente si no están equipados con algoritmos capaces de adaptar sus parámetros y estructura, provocando que no sean capaces de percibir determinados tiempos. propiedades variables o la presencia de datos faltantes en los flujos de datos. Una solución en constante desarrollo para estos problemas es la evolución de sistemas de inferencia difusa. El objetivo de este trabajo fue revisar sistemáticamente los modelos de pronóstico implementados a través de sistemas de inferencia difusa en evolución, identificando las estructuras más comunes, los resultados de la implementación y las variables predichas para establecer una visión general del estado actual de esta técnica y sus posibles aplicaciones en otros campos inexplorados. Esta investigación siguió la metodología PRISMA de revisiones sistemáticas, incluyendo artículos científicos y patentes de tres bases de datos académicas, una de las cuales ofrece acceso gratuito. Esto se logró mediante un flujo de trabajo de identificación, selección e inclusión, obteniendo 323 registros sobre los cuales se realizaron análisis en base a las preguntas de revisión propuestas. En total, se identificaron 62 investigaciones que propusieron 115 estructuras de sistemas diferentes, principalmente enfocadas a aumentar la precisión, además de abordar ocho campos principales de aplicación y algunas técnicas de optimización. Se observó que estos sistemas han sido implementados exitosamente en la predicción de variables con comportamiento dinámico y manejo de valores faltantes, flujos continuos de datos y características no estacionarias. Por tanto, su uso puede extenderse a fenómenos con estas propiedades.

Palabras clave: sistema difuso en evolución; previsión; difuso; revisión de literatura; PRISMA; Visor VOS

check for updates

Cita: Vanegas-Ayala, S.-C.; Barón-Velandia, J.; Romero Riaño, E. Revisión sistemática de modelos de pronóstico que utilizan sistemas difusos en evolución. Computación 2024, 12, 159. https://doi.org/10.3390/ computation12080159

Editor académico: Demos T. Tsahalis

Recibido: 12 de junio de 2024
Revisado: 18 de julio de 2024
Aceptado: 27 de julio de 2024
Publicado: 8 de agosto de 2024

Copyright: © 2024 por los autores. Licenciatario MDPI, Basilea, Suiza.

Este artículo es un artículo de acceso abierto. distribuido bajo los términos y condiciones de los Creative Commons Licencia de atribución (CC BY) (https:// creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

1. Introducción

1.1. Modelos de pronóstico

Los modelos de pronóstico permiten el control y la toma de decisiones sobre el entorno modelado. Un modelo con un alto grado de complejidad puede añadir una dificultad computacional significativa a esta tarea, mientras que un modelo demasiado simple puede reducir el rendimiento o representar incorrectamente el fenómeno [1]. La dinámica de los fenómenos modelados puede variar con el tiempo, implicando la necesidad de que los modelos se adapten durante su operación a través de enfoques basados en datos y aprendizaje continuo [2]. Esto requiere que los modelos tengan estructuras dinámicas evolutivas capaces de capturar variaciones en el flujo de datos [1,3,4].

Actualmente, la mayoría de los métodos de pronóstico tienden a utilizar información histórica limitada para generar sus configuraciones iniciales, y obtener esta información puede resultar difícil o costoso. Este enfoque puede impedir que los modelos respondan a cambios inesperados en el fenómeno modelado. Además, algunos enfoques de aprendizaje automático a menudo dependen de la capacitación fuera de línea, lo que genera ciclos de capacitación prolongados, una mayor complejidad computacional y propagación de errores, lo que puede afectar la precisión del pronóstico [5,6].

Machine Translated by Google

Implementar un método de predicción en línea efectivo se vuelve imperativo para mejorar la estrategia de respuesta del modelo, permitiendo la transformación del conocimiento aprendido de una manera altamente intuitiva e interpretable [3,6]. Los modelos deben responder rápidamente y aprender de situaciones con condiciones variables del sistema, como desviaciones, valores atípicos, valores perdidos, cambios o entornos no estacionarios. También deben manejar flujos de datos ilimitados, operando en línea y en tiempo real [7].

1.2. Evolución de los sistemas de inferencia

difusa Los sistemas de inferencia difusa (EFS) han surgido recientemente como una solución de modelado para procesos altamente complejos, no lineales, en línea y no estacionarios. Pueden adaptar sus parámetros y alterar sus estructuras internas de forma incremental con nuevas muestras de datos entrantes, por ejemplo, modificando el conjunto de reglas o el número de entradas o salidas del sistema. Esto les permite adaptarse a nuevos estados o cambios de comportamiento a lo largo del tiempo, sin necesidad de fases de reentrenamiento que requieran mucho tiempo ni interrupciones en el modelado [8-11].

Los EFS proporcionan una estructura flexible con aprendizaje incremental y continuo, procesando muestras de flujo de datos solo una vez, reduciendo así el consumo de memoria [7]. Además, son sistemas basados en reglas difusas (FRS) capaces de autoactualizarse junto con sus metaparámetros . Esto implica identificar y refinar las partes antecedente y consecuente de las reglas, así como adaptar dinámicamente los parámetros de las funciones de membresía a partir del flujo continuo de datos [3,9,12,13]. Hasta la fecha, se han propuesto varios EFS con diferentes estructuras evolutivas y esquemas de aprendizaje de parámetros para abordar problemas de clasificación, identificación y regresión del mundo real, donde la interpretabilidad del modelo juega un papel clave [3,9,14].

Actualmente, los EFS se emplean como herramientas prácticas en aplicaciones de transmisión de datos, como la conducción autónoma, la previsión meteorológica y el comercio de alta frecuencia [15]. Como resultado, se han introducido numerosos EFS, con notable flexibilidad, interoperabilidad lingüística y autonomía dinámica. Estos sistemas permiten la representación de información con un rendimiento computacional eficiente para el autoaprendizaje continuo en procesos no estacionarios [10,11], además de ofrecer velocidades de entrenamiento rápidas y alta precisión en comparación con otras estrategias de predicción no lineal [6].

Este trabajo proporciona una revisión sistemática de los EFS para problemas de pronóstico, destacando que su importancia ha sido indicada por otros trabajos de revisión que han cubierto otros enfoques, como la teoría del control [16], el diseño heurístico [14], la interpretabilidad [17], su aplicación. en los flujos de datos [18], y los desafíos al inicio de su desarrollo [19].
Por lo tanto, se ofrece una revisión sistemática de los modelos de pronóstico que utilizan EFS para proporcionar una descripción general del estado actual del arte y explorar aplicaciones potenciales en dominios inexplorados. Para lograrlo, la revisión pretende abordar las siguientes preguntas: 1. ¿Quiénes

son los autores con mayor impacto en el desarrollo de las EFS?
2. ¿Cuáles son las tendencias en los temas, conceptos o palabras clave asociados con la previsión?

¿Modelos que utilizan EFS?

3. ¿Cómo ha evolucionado la frecuencia de la investigación sobre modelos de pronóstico que utilizan EFS?
4. ¿Qué variables o fenómenos predicen las EFS?
5. ¿Cuáles son las estructuras de las EFS aplicables a la previsión?
6. ¿Qué métodos de optimización se implementan en los EFS para mejorar la precisión de sus pronósticos?

7. ¿Qué resultados de desempeño se han obtenido en los modelos de pronóstico que utilizan EFS?

Este manuscrito presenta un análisis del estado del arte de la técnica de EFS para problemas de pronóstico, describiendo las estructuras existentes, los campos en los que se han aplicado y sus variables, junto con los resultados de su implementación en base a las respuestas a las preguntas consideradas en la revisión. Esto nos permite visualizar nuevas oportunidades de investigación, innovación y desarrollo y posibles aplicaciones en problemas que tienen las mismas características.

Esta revisión sistemática sigue una estructura clara y ordenada, adaptando la metodología PRISMA para revisiones sistemáticas, que se describe en los siguientes apartados del

Machine Translated by Google

documento. La sección de Materiales y Métodos detalla la metodología utilizada; en los Resultados y Discusión se presentan y analizan los hallazgos obtenidos; en las Conclusiones se resumen las principales conclusiones de la revisión; y, finalmente, la sección Direcciones futuras describe campos futuros de investigación y desafíos existentes.

2. Materiales y métodos

La presente revisión se adhiere a la guía de flujo de trabajo PRISMA para revisiones sistemáticas [20]. Este proceso se organiza en tres fases: identificación, selección e inclusión (Figura 1).

1. La fase de identificación implica definir los criterios de elegibilidad, seleccionar la información fuentes de información y desarrollar una estrategia de búsqueda.
2. La fase de selección abarca la selección y recopilación de datos, incluida la descripción de los elementos de datos recopilados y el método de síntesis.
3. La fase de inclusión no supone ningún desarrollo específico, ya que se centra en realizar una búsqueda exhaustiva para evitar pasar por alto registros relevantes a lo largo del flujo de trabajo.

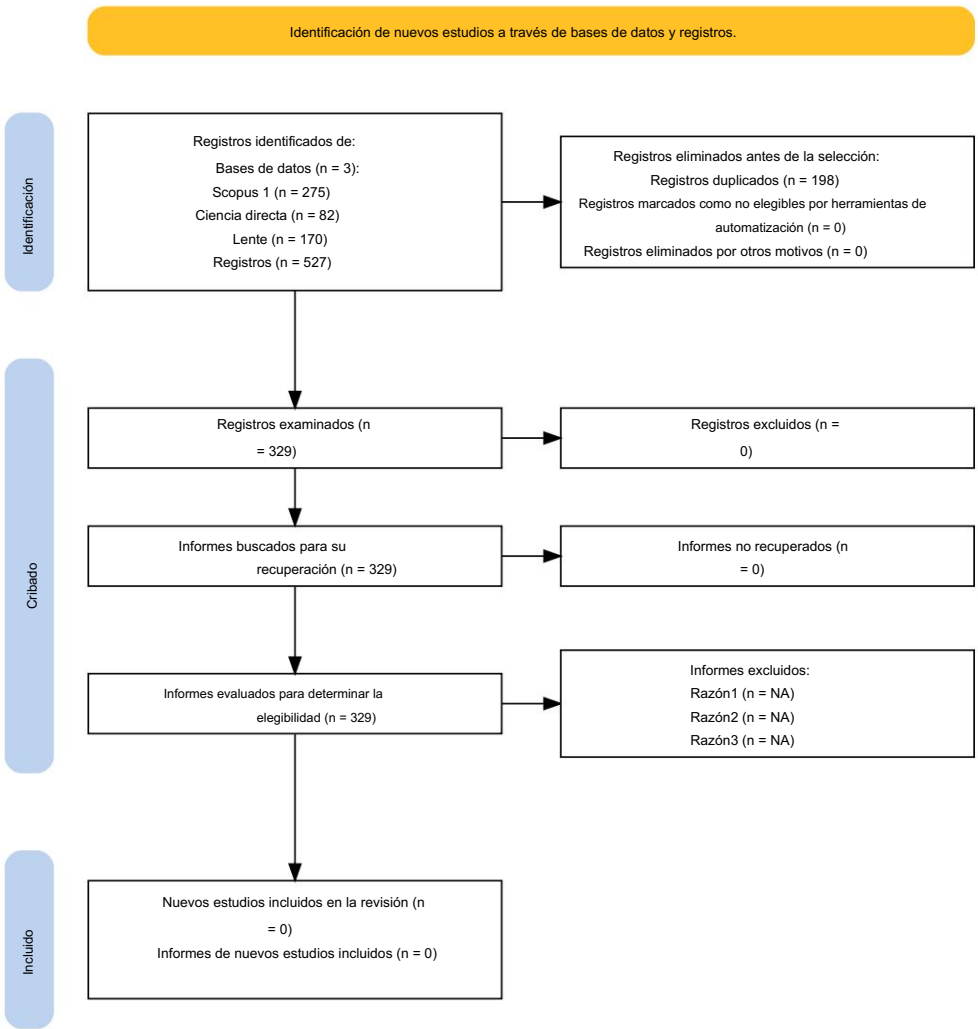


Figura 1. Descripción de la metodología siguiendo el diagrama de flujo de revisión sistemática según PRISMA [20,21].

2.1. Criterios de elegibilidad, fuentes de información y estrategia de búsqueda

Todos los estudios e investigaciones realizados durante los primeros dos meses de 2024 sobre modelos de pronóstico que involucran EFS se consideran bajo los criterios de admisibilidad. Las fuentes de datos utilizadas son las bases de datos científicas Scopus, Science Direct y Lens. En la Tabla 1, el

Machine Translated by Google

Se proporciona la ecuación de búsqueda correspondiente para cada fuente, junto con el número de registros encontrados en cada repositorio.

Tabla 1. Descripción de la estrategia de búsqueda para la revisión sistemática.

DB	Ecuación	Archivos
Scopus	TÍTULO-ABS-CLAVE (“Modelo*” O “Predicción*” O “Estimación*” O “Modelo Matemático*” O “Simulación por computadora*” O “Previsión*” O “Modelo de predicción*” O “Estimación de parámetros*” O “Estimación de parámetros*”) Y TÍTULO-ABS-CLAVE (“difusa” O “ANFIS” O “Membresía Función*”) Y TÍTULO-ABS-CLAVE (“Sistema difuso en evolución*” O “Sistema en evolución*”)	275
Ciencia directa	Busque artículos con estos términos: (“Modelo” O “Predicción” O “Estimación” O “Matemática Modelo” O “Simulación por Computadora” O “Previsión” O “Modelo de Predicción” O “Parámetro Estimación” O “Estimación de parámetros”) Título, resumen o palabras clave especificadas por el autor: ((“difuso” O “ANFIS” O “Función de Membresía”) Y (“Sistema difuso en evolución” O “Sistema en evolución”))	82
Lente	(Título: ((“Modelo*” O “Predicción*” O “Estimación*” O “Modelo matemático*” O “Simulación por computadora*” O “Previsión*” O “Modelo de predicción*” O “Estimación de parámetros*” O “Estimación de parámetros*”) Y (“difusa” O “ANFIS” O “Función de membresía*”) Y (“Sistema difuso en evolución*” O “Sistema en evolución*”))) O (resumen: ((“Modelo*” O “Predicción*” O “Estimación*” O “Modelo matemático*” O “Simulación por computadora*” O “Previsión*” O “Modelo de predicción*” O “Estimación de parámetros*” O “Estimación de parámetros*”) Y (“difuso” O “ANFIS” O “Función de membresía*”) Y (“Sistema difuso en evolución*” O “Sistema en evolución*”))) O (palabra clave: ((“Modelo*” O “Predicción*” O “Estimación*” O “Modelo matemático*” O “Simulación por computadora*” O “Previsión*” O “Modelo de predicción*” O “Estimación de parámetros*” O “Estimación de parámetros*”) Y (“difusa” O “ANFIS” O “Función de membresía*”) AND (“Sistema difuso en evolución*” O “Sistema en evolución*”))) (título:	165
Búsqueda de patentes de lentes	((“difuso” O “ANFIS” O “Función de membresía*”) AND (“Difuso en evolución*”))) O (resumen: ((“difuso” O “ANFIS” O “Función de membresía*”) Y (“Evolución difusa*”))) O (reclamo: ((“difuso” O “ANFIS” O “Función de membresía* ”) Y (“Evolución difusa*”)))	5

Después de eliminar duplicados de los 527 registros iniciales, quedan 323 registros únicos para su uso en el proceso de revisión.

2.2. Proceso de selección y proceso de recopilación de datos

Cada documento se exportó desde la base de datos en valores separados por comas y formato RIS para análisis bibliométrico. El método utilizado para determinar los criterios de inclusión específicamente para el análisis de investigación se describe a continuación.

1. Sólo se seleccionan patentes y artículos.
2. Los artículos deberán estar publicados en revistas científicas.
3. Se elige una ventana de tiempo que indique un aumento o avance en el campo de estudio con base en el análisis bibliométrico.
4. Se excluye cualquier registro no relacionado con el tema de investigación (predicción con EFS).

2.3. Elementos de datos y métodos de síntesis

Del número total de registros, se extrajeron y agruparon los siguientes datos según su relevancia para la revisión.

1. Bibliometría
   - Autores: Se utiliza para analizar colaboraciones y relevancia de los autores.
   - Palabras clave: utilizadas para el análisis de coocurrencia de términos.
   - Año de publicación: Se utiliza para revisar la distribución temporal de las publicaciones sobre el tema.
2. Investigativa
   - Variable analizada: Corresponde a la variable o fenómeno modelado.
   - Tipo de sistema de inferencia difusa: Indica el tipo de sistema de inferencia difusa utilizado.

Machine Translated by Google

• Optimización: Indica el método o tipo de optimización aplicado. • Descripción del modelo: Proporciona información detallada sobre la estructura del desarrollo.
modelo operado.
• Precisión: Indica el valor de medición y rendimiento del modelo obtenido.

3. Filtrado de campos para análisis investigativo
• Título, Resumen: Se utiliza para determinar si los documentos corresponden al tema.

• Tipo de publicación: Indica el medio de publicación, como revista, libro, conferencia u otro.

2.4. Herramientas de análisis

de datos Se utilizó la herramienta VOSviewer para realizar el análisis bibliométrico. Esta herramienta permite la visualización de relaciones que abordan las preguntas de revisión. En concreto, facilita el análisis de coautoría y coocurrencia de palabras clave con un enfoque temporal. El análisis investigativo también implica tabular cada artículo según los campos de investigación de las variables analizadas, el tipo de sistema de inferencia difusa, la optimización y los resultados.

3. Resultados

Los resultados se clasificaron en dos secciones según sus objetivos: una que se centra en datos bibliométricos para abordar las preguntas de revisión 1 a 3 y la otra que requiere un análisis de investigación más completo para responder las preguntas 4 a 7.

3.1. Análisis bibliométrico

Comenzando con el análisis de coautoría representado en la Figura 2, se enumeran todos los autores, con tres grupos principales identificados como los más destacados. Estos grupos representan a los investigadores Fernando Gomide (azul claro), Edwin Lughofer (verde) y Plamen Angelov (rojo).

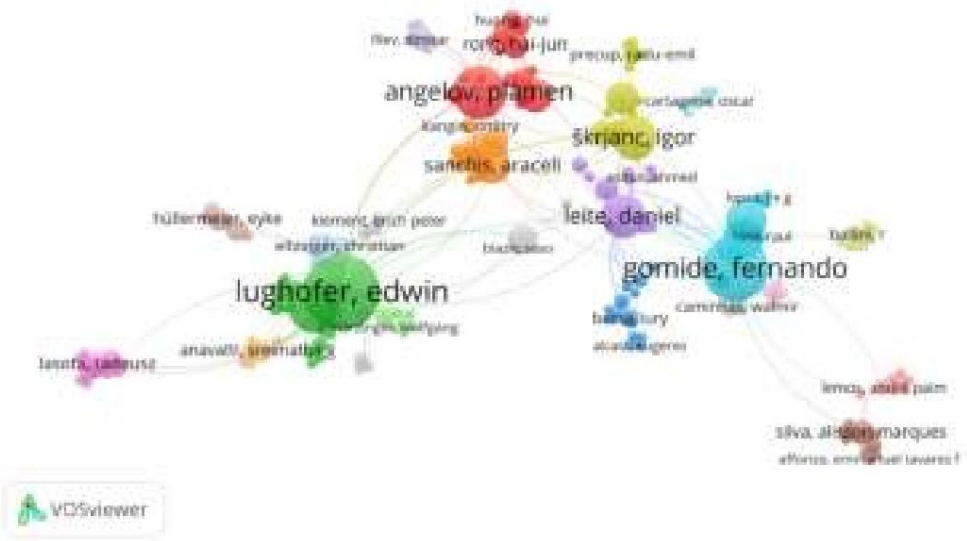


Figura 2. Red de coautoría por número de documentos sobre EFS.

En la Figura 3, se examina la coexistencia de palabras clave, con el umbral mínimo de aparición establecido en 13 repeticiones para identificar los temas más relevantes dentro del alcance de la revisión. Además de los EFS, se observa que existen elementos relacionados con aplicaciones como sistemas de tiempo real, flujos de datos y sistemas de comunicación (resaltados en rojo
Además, implementaciones como modelos matemáticos, modelos Takagi-Sugeno,

Machine Translated by Google

y se destacan las redes neuronales (resaltadas en azul), junto con enfoques como la predicción, la clasificación, el aprendizaje en línea y la inteligencia artificial (resaltadas en verde).

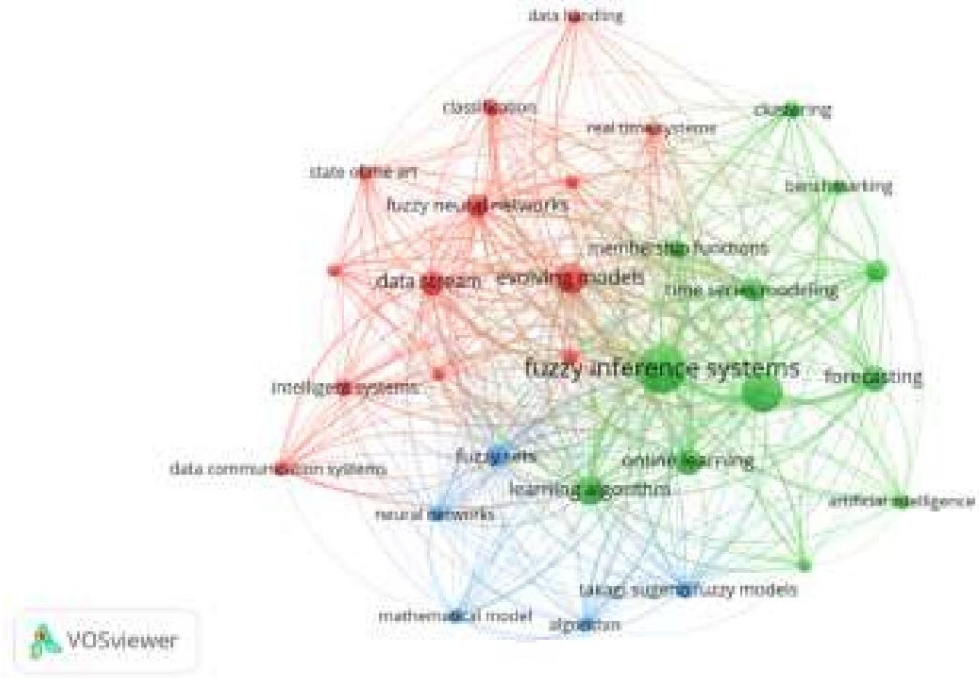


Figura 3. Mapa de coocurrencia de palabras clave de cada documento en EFS.

En la Figura 4, se examina la coexistencia de palabras clave a lo largo del tiempo, con el umbral mínimo de aparición establecido en 13 repeticiones. Los temas de investigación con el desarrollo más reciente incluyen flujos de datos, clasificación de información, pronósticos y series de tiempo.

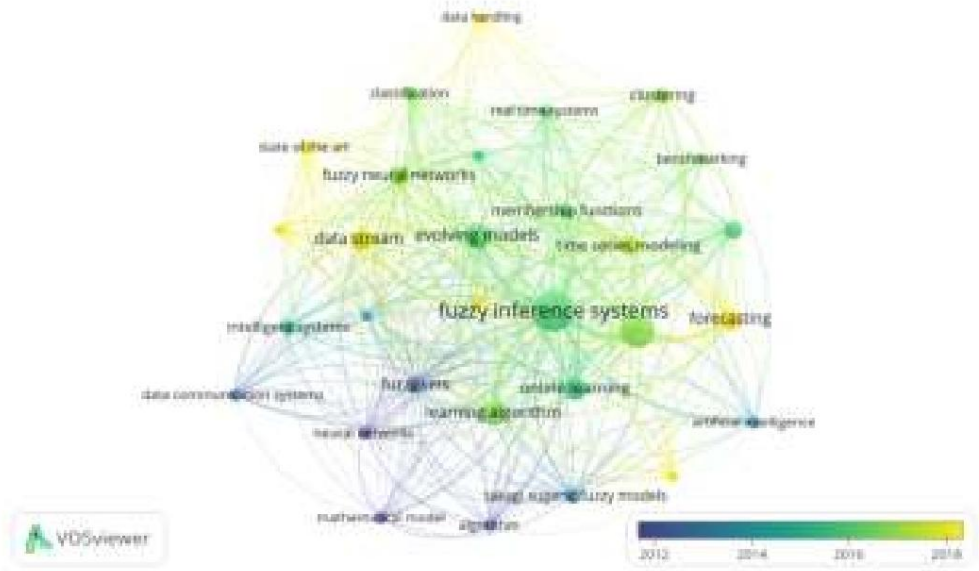


Figura 4. Mapa de co-ocurrencia de palabras clave de cada documento en EFS a lo largo del tiempo.

La Figura 5 ilustra la frecuencia de la investigación sobre modelos de pronóstico que utilizan EFS a lo largo del tiempo. Se observa una tendencia de crecimiento desde 2010, con un promedio aproximado de 20 estudios por año. Este crecimiento se atribuye a la maduración de la tecnología y las herramientas informáticas de soporte.

Machine Translated by Google

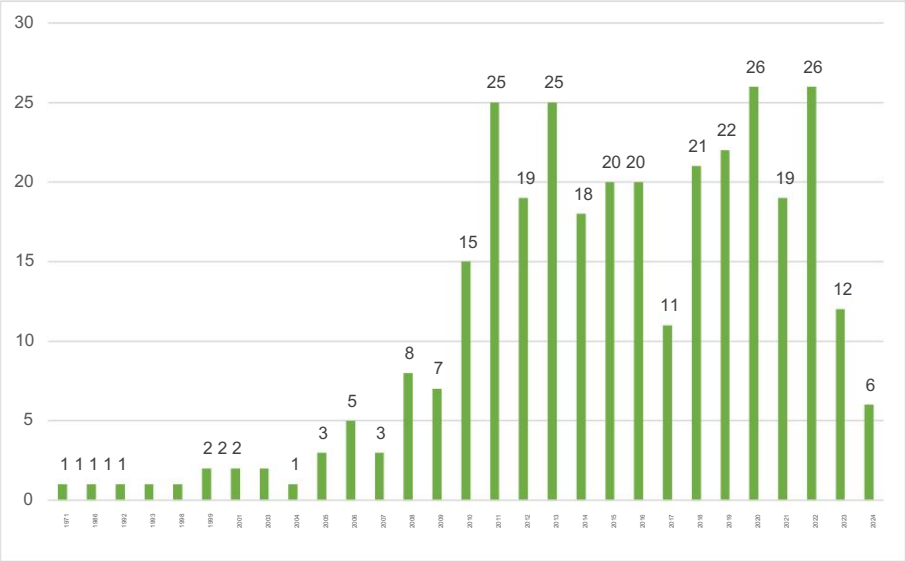


Figura 5. Histograma de la distribución de la cantidad de investigación sobre EFS a lo largo del tiempo.

3.2. Análisis Investigativo Del total

de investigaciones, se han seleccionado 82 estudios mediante depuración desde 2010, centrándose en artículos de revistas y registros de patentes, según lo estipulado en la metodología de selección. Entre estos, 20 estudios fueron descartados por no corresponder a modelos de pronóstico o no utilizar EFS.

La Tabla 2 analiza las 62 investigaciones restantes y describe brevemente las medidas implementadas. modelos. Cabe destacar que las cinco primeras entradas corresponden a patentes.

Tabla 2. Tipos de SAE implementados por cada investigación.

Investigación	Tipo de EFS
[22]	Base de datos de lógica difusa
[23]	Red neuronal difusa en evolución (EFuNN)
[24]	Red neuronal difusa en evolución (EFuNN)
[25]	Red neuronal difusa en evolución (EFuNN)
[26]	red difusa
[27]	Sistema de inferencia difusa autoorganizado (SOFIS+)
[28]	EFS ponderado por similitud dinámica (DSW-EFS)
[29]	EFS de orden cero: Sistema de inferencia difusa autoorganizado (SOFIS+); ALMMo de orden cero (ALMMo0); Sistema de inferencia de creencias difusas autoorganizado (SOFBIS)
[30]	Intervalo de predicción difusa (FPI)
[5]	Sistema de inferencia difusa autoorganizado semisupervisado de modelo dual (DMS3OF); sistema de inferencia difusa autoorganizado (SOFIS+); Sistema de inferencia de creencias difusas autoorganizado (SOFBIS)
[31]	Neurodifuso en evolución (eNF)
[32]	Algoritmo DSP de fuzzificación (FDSPA)
[33]	Fuzzy evolutivo adaptativo (AEF)
[34]	Gránulos de información difusa elipsoidales en evolución (EEFIG); TS difuso autorregresivo con entradas exógenas (TS difuso ARX)
[35]	eMG de membresía de conjunto modificado (MSM-eMG); eMG de tamaño de paso variable (VS-eMG)
[36]	Procedimiento de evolución de neurona neodifusa con datos faltantes (eNFN-MDP)
[11]	Sistema de inferencia difusa en evolución estadística (SEFIS)
[37]	Conjunto secuencial en línea de sistemas difusos (OS-FS)
[38]	Aprendizaje difuso autoadaptativo (SAFL)
[39]	Red de forzamiento docente escalable y débilmente supervisada (WeScatterNet)
[40]	Sistema de inferencia difusa en evolución de conjuntos multicapa (MEEFIS); Sistemas de inferencia difusa evolutivos de primer orden (EFIS)
[41]	transmisiones TSK
[42]	EFS con umbrales de autoaprendizaje/adaptativos (EFS-SLAT)
[43]	Evolución de la red neurodifusa Takagi-Sugeno (Evolving NF-TS)

Machine Translated by Google

Tabla 2. Cont.

Investigación	Tipo de EFS
[44]	Membresía del conjunto mejorado ePL-KRLS (ESM-ePL-KRLS); establecer membresía ePL-KRLS (SM-ePL-KRLS)
[45]	ALMMo de orden cero extendido (ALMMo-0*)
[46]	Regresión C difusa incremental (InFuR)
[47]	Clasificador difuso de intervalo heterogéneo generalizado tipo 2 (GHIT2Class)
[48]	Predictor granular difuso en evolución (eFGP)
[49]	Filtro de Kalman difuso en evolución TS
[50]	Clasificador difuso adaptativo basado en descenso de gradiente (AFCGD)
[51]	Evolución de Takagi-Sugeno (eTS); Takagi-Sugeno extendido (xTS); evolución del aprendizaje participativo difuso (ePL)
[52]	Método de identificación de estructura robusta (RSIM)
[53]	Red parsimoniosa basada en sistema de inferencia difusa (PANFIS)
[54]	Procedimiento de identificación basado en la nube
[55]	Motor difuso de evolución de series temporales (TiSEFE)
[56]	Modelo neuro-neo-difuso-ANARX ponderado
[57]	Clasificador GENÉRICO (gClass)
[58]	Clasificador de andamios tipo 2 (ST2Class)
[59]	Evolución del sistema de inferencia difusa heterogénea (eHFIS)
[60]	Evolucionando el GARCH difuso
[61]	Clasificador en evolución (eClass)
[62]	Sistema difuso de contexto de salida en evolución (EOCFS)
[63]	Gránulo de información en evolución (EIG)
[64]	EFS inteligente generalizado (Gen-Smart-EFS) (GS-EFS)
[65]	Detección de anomalías eTS (eTSAD)
[66]	Sistema adaptativo de inferencia neurodifusa (ANFIS)
[67]	Red recurrente neurodifusa en evolución (ENFRN)
[68]	Clasificador en evolución (eClass)
[69]	Sistema genérico de inferencia neurodifusa en evolución (GENEFIS)
[70]	Evolución extendida de Takagi-Sugeno (exTS)
[71]	Evolución del aprendizaje participativo difuso + (ePL+)
[72]	Agrupación evolutiva participativa gaussiana
[73]	Clasificador en evolución (eClass)
[74]	Evolución del sistema de inferencia neuronal difusa tipo 2 (eT2FIS)
[75]	eTS basado en el cambio a vecino (eTS-N)
[76]	Sistema multiagente difuso de cuatro capas (FMAS)
[77]	FNN autoorganizada (SOFNN)
[4]	Evolución de Takagi-Sugeno (eTS); sistemas flexibles de inferencia difusa (FLEXFIS)
[78]	Evolución de Takagi-Sugeno (eTS)
[79]	Clasificador en evolución de comportamientos de agentes (EvCAB)
[80]	eSensores

La Tabla 3 muestra las variables o fenómenos predichos por las EFS, con cada variable agrupados según su respectivo campo de estudio. Los campos con mayor importancia las aplicaciones incluyen economía o finanzas, salud, manufactura y tecnología. Particularmente en el campo tecnológico, una parte considerable se dedica a aplicar materiales sintéti variables para verificar y validar nuevos desarrollos de modelos.

Tabla 3. Lista de variables predichas mediante EFS por número de investigaciones.

Campo	Variable analizada	Contar
Climático—Meteorológico	Sistema intercambiador de calor	1
Económico—Financiero	Criptomoneda	1
	Volatilidad del rendimiento financiero	1
	Precios de la vivienda	1
	Volatilidad del mercado de valores	2
	Curva de rendimiento	1

Machine Translated by Google

Tabla 3. Cont.

Campo	Variable analizada	Contar
Energía	Vida útil restante de la batería	1
	Temperatura del punto caliente	1
	Modelado térmico de transformadores de potencia.	1
Salud	Reconocimiento de actividad	1
	árboles genealógicos	1
	expresión genética	3
	sonidos del corazon	2
Fabricación	Detección y diagnóstico de fallos.	1
	Proceso de fabricación	1
	Fallo del sistema de engranajes en tiempo real	1
	Vida útil restante	1
	Planificación de secuencia de desmontaje robótico (DSP)	1
	Planta enfriadora de agua	1
Social	Tasación de inmuebles	1
	noticias web	1
Tecnológico	Datos de ejemplo	30
	Imagen de ejemplo	1
	Estructuras de red difusas	1
	Tráfico de red	1
	Ruido no gaussiano	1
	Datos de sensores	1
	Comandos UNIX	1
Transporte y logística	Rotor de helicóptero	1

La Tabla 2 describe las 115 estructuras del sistema de inferencia difusa evolutiva aplicables a la previsión. Además, la Figura 6 ilustra los porcentajes de uso de varios EFS. considerando un mínimo de dos solicitudes. eTS tiene la mayor frecuencia de aplicación, seguido de eClass, eMG y xTS, en la predicción de las variables indicadas en la Tabla 3.

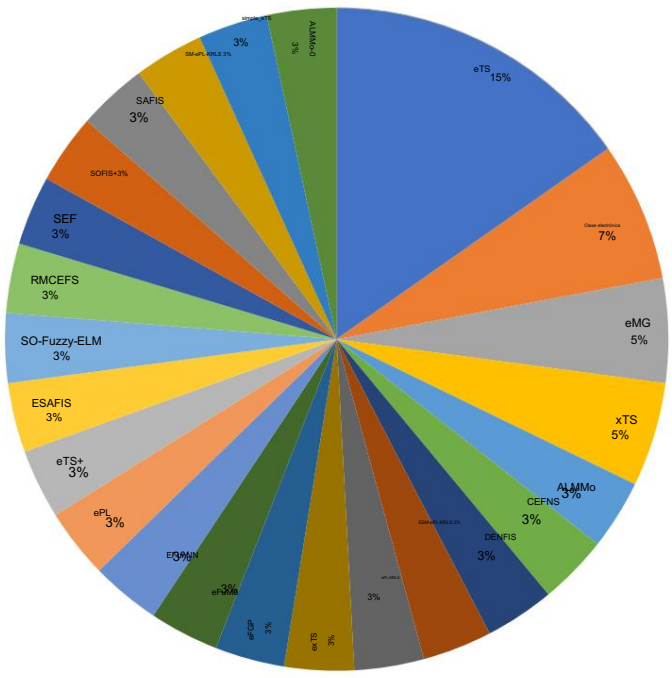


Figura 6. Gráfico circular de la distribución de tipos de EFS aplicados a problemas de predicción.

Machine Translated by Google

Además, la Figura 7 muestra los diferentes EFS aplicados al pronosticar los objetivos identificados. variables al menos dos veces. En particular, datos de ejemplo, el modelado térmico de transformadores de potencia, y el ruido no gaussiano son las variables predichas por el mayor número de EFS diferentes.

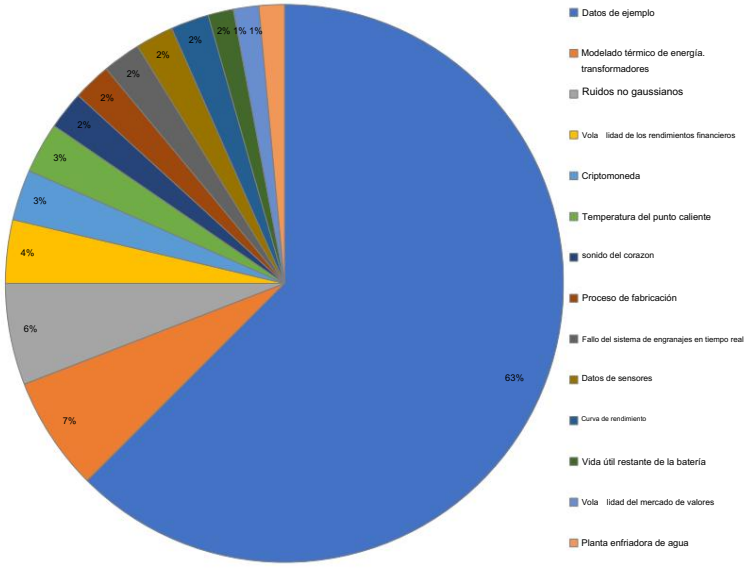


Figura 7. Gráfico circular de la distribución de los tipos de variables en la investigación que aplica EFS.

Respecto a los métodos de optimización implementados en los EFS para mejorar la previsión precisión, la Tabla 4 muestra que 12 investigaciones incluyen elementos de optimización, especificando qué métodos se han implementado y su frecuencia.

Tabla 4. Listado de métodos de optimización por número de investigaciones que los aplican.

Mejoramiento	Contar
Función Adadelta (NaD)	1
Impulso adaptativo (AdaBoost)	1
Filtro de partículas adaptativo (aPF)	1
Método de conjunto adaptativo semisupervisado (ASSEMBLE)	1
Wavelet adaptativo	1
Marco de impulso para el aprendizaje semisupervisado (SemiBoost)	1
Filtro Kalman extendido desacoplado (DEKF)	1
Detección y reacción de deriva.	1
Árbol de búsqueda binaria extendido (E-BST)	1
AdaBoost ponderado difusamente (FWAdaBoost)	1
Mínimos cuadrados recursivos ponderados difusos con olvido de dirección variable (FWRLS-VDF)	1
Algoritmo genético (GA)	1
Mínimo cuadrado global	1
Descenso de gradiente (GD)	2
Olvido gradual	1
Optimización de hiperparámetros basada en la desigualdad de Hoeffding	1
MapaReducir	1
Algoritmo de fusión	1
ModificadoEvolucionando	1
AdaBoost robusto (RobAdaBoost)	1
FWAdaBoost semisupervisado (SSFWAdaBoost)	1
Modelado aditivo por etapas utilizando un exponencial multiclase (SAMME)	1
Función Adadelta (NaD)	1

Además, los modelos de pronóstico que utilizan EFS emplean varias medidas de desempeño. Cabe destacar que el error cuadrático medio (RMSE) se menciona en 23 investigaciones, mientras que

Machine Translated by Google

el error cuadrático medio (MSE) se considera en cinco. Los valores obtenidos son 0,0662 y 0,0561, respectivamente.

4. Discusión

En esta sección se discuten elementos relevantes derivados de los análisis realizados, centrándose en los hallazgos de las estructuras comunes, los resultados de la implementación de los modelos y las variables utilizadas para el pronóstico con EFS.

Dentro de los tipos de estructuras EFS aplicables a la previsión, las más utilizadas y referenciadas son eGNN, FLEXFIS, eTS y eClass, propuestas por Fernando Gomide, Edwin Lughofer y Plamen Angelov, respectivamente, que proporcionan un punto de comparación para investigación de la naturaleza, en la que puedan ser implementados, contrastados y mejorados. Además, varios autores han presentado nuevas propuestas durante la última década que introducen enfoques novedosos o mejoras a implementaciones anteriores, lo que indica un campo floreciente y en expansión.

Incluso ahora se están desarrollando nuevas propuestas a partir de los enfoques analizados, buscando por ejemplo aumentar su interpretabilidad, como X-Fuzz [81]; manejo de datos faltantes [82]; utilizando otros enfoques, como el uso de múltiples capas en sistemas difusos jerárquicos en evolución [83]; o mejorar los enfoques existentes, como la generación dinámica de reglas [84].

Al analizar las tendencias actuales, se observa que las estructuras de las EFS aplicables a la predicción se basan predominantemente en sistemas de inferencia difusa del tipo Takagi-Sugeno. Estos sistemas abordan enfoques como la creación o ajuste dinámico de reglas [31,38,41,45] y la configuración o monitoreo de flujos de entrada o salida [59,6 Sin embargo, existen algunas configuraciones centradas en la gestión de datos faltantes [36,48] y también basadas en sistemas de inferencia difusa tipo Mamdani [62,63,74], que ofrecen una mayor interpretabilidad.

Esta tendencia muestra que actualmente existen muchas propuestas centradas en la precisión pero pocas en la interpretabilidad o el manejo de datos faltantes, lo que brinda una oportunidad de investigación. Esto se evidencia, por ejemplo, en el hecho de que de las 115 propuestas analizadas, sólo 10 utilizan sistemas tipo Mamdani: •

Sistema difuso evolutivo de contexto de salida (EOCFS); •
Esquema de construcción en evolución para sistemas difusos (ECSFS);
• Gránulo de información en evolución (EIG); •
Evolución del sistema de inferencia neuronal difusa tipo 2 (eT2FIS); •
Red de control de aprendizaje adaptativo difuso aplicando la teoría de resonancia adaptativa (FALCON-ARTE);
• Red neuronal difusa en evolución (EFuNN); •
Evolución de la memoria semántica neuronal difusa (eFSM); •
SOFNN genérico (GenSoFNN); •
Producto pseudoexterior basado en un conjunto aproximado
(RSPOP); • Sistema neuronal difuso autoorganizado tipo 2 (T2SONFS).

Los valores de precisión obtenidos en los diversos enfoques abordados por las EFS demuestran su solidez en la implementación. En particular, estos sistemas adaptan continuamente sus estructuras para acomodar nuevos flujos de datos o variaciones en el comportamiento de la variable analizada.

Se observa que al implementar métodos de optimización se mejoran las características de los sistemas existentes, aumentando así su precisión o reduciendo la complejidad algorítmica y el tiempo. Sin embargo, su implementación limitada se debe al nivel actual de madurez de la técnica; por lo que se espera un incremento en su implementación en el futuro. Actualmente, la atención se centra en desarrollar nuevas propuestas con diversas características, en lugar de implementar mecanismos de optimización en estructuras existentes.

Dentro del campo de aplicación de la previsión de flujo de datos, se observan varias oportunidades de investigación relacionadas con las variables o fenómenos pronosticados:

Machine Translated by Google

- Variables que exhiben características dinámicas y no estacionarias a lo largo del tiempo, por ejemplo, variables climáticas o meteorológicas, como las del sistema intercambiador de calor [30];
- Fenómenos que demuestran fuertes fluctuaciones en el tiempo y son interdependientes de variables desconocidas, por ejemplo, en fenómenos económicos como la volatilidad del mercado de valores [60,76]; •
Variables en flujos de datos continuos, como fallas en el sistema de engranajes en tiempo real [31] y tráfico de red [55];
- Series temporales con datos faltantes [36] dentro de flujos de datos dinámicos y no estacionarios, como en criptomonedas [48].

5. Conclusiones

Las aplicaciones de los EFS se encuentran en campos como el clima, la economía, la energía, la salud, la manufactura, las ciencias sociales y el transporte, con valores de alto rendimiento en el pronóstico de variables dinámicas y no estacionarias, incluso con flujos de datos continuos y datos faltantes. Es evidente que es factible obtener valores de alta precisión al pronosticar fenómenos con estas propiedades, particularmente en conjunto con métodos de optimización, que actualmente son de uso limitado, principalmente debido al actual nivel de madurez de la técnica.

Se encuentra que existe una variedad significativa en las propuestas de configuración y montaje de EFS para la previsión de flujo de datos. Se sugiere que si se desea una mayor precisión, las estructuras de tipo Sugeno son las estructuras más comunes. Por otro lado, si nos centramos en una mayor interpretabilidad, sólo una pequeña proporción, aproximadamente el 8,6957%, de las propuestas se basan en sistemas de inferencia difusa tipo Mamdani, y sólo dos en gestión de datos faltantes.

6. Direcciones futuras

En esta sección exploramos las posibles vías de investigación futuras y avances en el campo de las EFS en problemas de predicción a partir de la revisión realizada. Se destacan las tendencias emergentes y los problemas no resueltos que pueden hacer avanzar el

campo. • Tendencias

emergentes – La previsión de flujos de datos dinámicos, no estacionarios y con datos faltantes como índices económicos, estados de salud en tiempo real, datos ambientales, comportamiento del consumidor, interacciones en redes sociales, datos de interacciones en plataformas educativas, datos de movilidad, y datos de sensores, entre otros.
- La implementación de algoritmos de optimización para aumentar la precisión de los modelos, buscando mantener los niveles de interpretabilidad obtenidos y sin modificar la semántica del modelo.
- El desarrollo de nuevas propuestas que se centren en garantizar la previsión de flujos de datos con alta interpretabilidad y el manejo de datos faltantes o flujos de datos continuos.

- Problemas no resueltos

- En cuanto a la clasificación de estructuras existentes, se encontraron más de 100 propuestas de sistemas de inferencia difusa evolutiva, por lo que es necesario desarrollar un sistema de clasificación que facilite su implementación y comparación. Por ejemplo , algunas propuestas identificadas en esta revisión están agrupadas por su enfoque, es decir, precisión o interpretabilidad, o se centran en modificar reglas o entradas y salidas.
- Es necesario combinar eficientemente propuestas que combinen altos niveles de interpretabilidad y alta precisión de una manera que sea sencilla de implementar.

Contribuciones del autor: Conceptualización, S.-CV-A. y JB-V.; metodología, ER-R.; software, S.-CV-A.; validación, S.-CV-A., JB-V. y ER-R.; investigación, S.-CV-A.; recursos, ER-R.; curación de datos , S.-CV-A.; escritura—preparación del borrador original, S.-CV-A.; redacción—revisión y edición, S.-CV-A.; visualización, ER-R.; supervisión, JB-V. Todos los autores han leído y aceptado la versión publicada del manuscrito.

Machine Translated by Google

Financiamiento: Esta investigación no recibió financiamiento externo.

Declaración de disponibilidad de datos: Los autores pondrán a disposición los datos brutos que respaldan las conclusiones de este artículo previa solicitud.

Conflictos de intereses: Los autores declaran no tener conflictos de intereses.

Referencias

1. Alcalá, E.; Besa, I.; Puig, V.; Sename, O.; Palhares, R. MPC utiliza un enfoque de aprendizaje difuso TS en línea con aplicación a la conducción autónoma. Aplica. Computación suave. 2022, 130, 109698. [Referencia cruzada]
2. Andonovski, G.; Costa, BSJ; Blažic, S.; Škrjanc, I. Controlador evolutivo robusto para tanque de compensación simulado y para planta real de dos tanques . Automatisierungstechnik 2018, 66, 725–734. [Referencia cruzada]
3. Gu, X.; Angelov, P.; Shen, Q. Sistema de inferencia de creencias difusas autoorganizado para clasificación. Traducción IEEE. Sistema difuso. 2022, 30, 5473–5483. [Referencia cruzada]
4. Lughofer, E.; Angelov, P. Manejo de derivas y cambios en flujos de datos en línea con sistemas difusos en evolución. Aplica. Computación suave. 2011, 11, 2057–2068. [Referencia cruzada]
5. Gu, X. Un sistema de inferencia difusa autoorganizado semisupervisado de modelo dual para la clasificación de flujos de datos. Aplica. Computación suave. 2023, 136, 110053. [Referencia cruzada]
6. Sol, J.; Gan, X.; Gong, D.; Tang, X.; Dai, H.; Zhong, Z. Un sistema difuso de evolución automática basado en predicciones en línea dinámico multi-algoritmo evolutivo objetivo. inf. Ciencia. 2022, 612, 638–654. [Referencia cruzada]
7. Rodrigues, F.; Silva, A.; Lemos, A. Evolución del predictor difuso con aprendizaje participativo gaussiano multivariable y mínimos cuadrados ponderados recursivos de múltiples innovaciones: eFMI. Evolución. Sistema. 2022, 13, 667–686. [Referencia cruzada]
8. Lughofer, E.; Skrjanc, I. Modelo difuso de retroalimentación de errores en evolución para mejorar la robustez bajo ruido de medición. Traducción IEEE. Sistema difuso. 2022, 31, 997–1008. [Referencia cruzada]
9. Škrjanc, I.; Iglesias, JA; Sanchís, A.; Leite, D.; Lughofer, E.; Gomide, F. Evolución de enfoques difusos y neurodifusos en agrupación, regresión, identificación y clasificación: una encuesta. inf. Ciencia. 2019, 490, 344–368. [Referencia cruzada]
10. Ferdaus, M.; Pratama, M.; Anavatti, S.; Garratt, M. PALM: una construcción incremental de hiperplanos para flujo de datos Regresión. Traducción IEEE. Sistema difuso. 2019, 27, 2115–2129. [Referencia cruzada]
11. Yang, ZX; Rong, HJ; Angelov, P.; Yang, ZX Sistema de inferencia difusa en evolución estadística para ruidos no gaussianos. IEEE Trans. Sistema difuso. 2021, 30, 2649–2664. [Referencia cruzada]
12. Angelov, P.; Filev, D. Una aproximación a la identificación en línea de modelos difusos de Takagi-Sugeno. Traducción IEEE. Sistema. Hombre Cibernético. Parte B Cibern. 2004, 34, 484–498. [Referencia cruzada] [PubMed]
13. Dell'Anna, D.; Jamshidnejad, A. Evolución de sistemas de lógica difusa para robots creativos y personalizados de asistencia social. Ing. Aplica. Artif. Intel. 2022, 114, 105064. [Referencia cruzada]
14. Ojha, V.; Abraham, A.; Snášel, V. Diseño heurístico de sistemas de inferencia difusa: una revisión de tres décadas de investigación. Ing. Aplica. Artif. Intel. 2019, 85, 845–864. [Referencia cruzada]
15. Huang, H.; Rong, HJ; Yang, ZX; Vong, CM Solución recursiva de potencia p dual menos media para la generalización de la evolución Sistema difuso bajo múltiples ruidos. inf. Ciencia. 2022, 609, 228–247. [Referencia cruzada]
16. Precopa Radu-Emil, ATN; Blaži˘c, S. Una encuesta sobre control difuso para aplicaciones mecatrónicas. Int. J. Sistema. Ciencia. 2024, 55, 771–813. [Referencia cruzada]
17. Lughofer, E. Garantía en línea de criterios de interpretabilidad en sistemas difusos en evolución: logros, nuevos conceptos y apertura asuntos. inf. Ciencia. 2013, 251, 22–46. [Referencia cruzada]
18. Baruá, RD; Angelov, P. Evolución de sistemas difusos para flujos de datos: una encuesta. CABLES Datos Min. Conocimiento. Descubrimiento. 2011, 1, 461–476. [Referencia cruzada]
19. Pedrycz, W. Sistemas difusos evolutivos: algunas ideas y desafíos. Evolución. Sistema. 2010, 1, 73–82. [Referencia cruzada]
20. Page, M. Explicación y elaboración de PRISMA 2020: Orientación actualizada y ejemplos para informar revisiones sistemáticas. BMJ 2021, 372, 160. [Referencia cruzada]
21. Haddaway, N.; Página, M.; Pritchard, C.; McGuinness, L. PRISMA2020: Un paquete R y una aplicación Shiny para producir diagramas de flujo compatibles con PRISMA 2020, con interactividad para una transparencia digital optimizada y síntesis abierta. Sistema Campbell. Rdo. 2022, 18, 1230. [Referencia cruzada] [PubMed]
22. Charles, DM Método y sistema para descubrir antepasados utilizando datos genómicos y genealógicos. Estados Unidos 2017/0213127 A1, 27 de julio de 2017.
23. Edmundo, RA; Erwin, FM; James, SM; Kirilov, KN; John, GP Aplicaciones médicas del uso de sistemas de aprendizaje adaptativo Datos de expresión genética. US 7370021 B2, 6 de mayo de 2008.
24. Edmundo, RA; Erwin, FM; James, SM; Kirilov, KN; John, GP Aplicaciones médicas de sistemas de aprendizaje adaptativo y Kits de diagnóstico. Nueva Zelanda 547894 A, 6 de mayo de 2008.
25. Kirilov, KN; Erwin, FM; James, SM; Edmund, RA Sistemas de apoyo a las decisiones médicas que utilizan la expresión genética y la información clínica y el método de uso. EP 1534122 B1, 20 de julio de 2016.
26. Flinn, SD; Moneypenny, Sistemas recombinantes adaptativos NF. WO 2005/054982 A2, 16 de junio de 2005.

Machine Translated by Google

27. Xiao, F.; Liu, H.; Lu, J. Un nuevo enfoque basado en una red neuronal convolucional 1D + 2D y un sistema difuso en evolución para el diagnóstico de enfermedades cardiovasculares a partir de señales sonoras del corazón. Aplica. Acústico. 2024, 216, 109723. [Referencia cruzada]
28. Li, H.; Zhao, T. Un sistema difuso en evolución ponderado por similitud dinámica para la deriva conceptual de flujos de datos. inf. Ciencia. 2024, 659, 120062. [Referencia cruzada]
29. Gu, X.; Angelov, P.; Shen, Q. Impulso adaptativo ponderado difuso semisupervisado para clasificación. Traducción IEEE. Sistema difuso. 2024, 32, 2318–2330. [Referencia cruzada]
30. Cartagena, O.; Ožbot, M.; Sáez, D.; Škrjanc, I. Evolución del intervalo de predicción difusa para la detección de fallas en un intercambiador de calor. Aplica. Computación suave . 2023, 145, 110625. [Referencia cruzada]
31. Shah, J.; Wang, W. Un clasificador neurodifuso en evolución para el diagnóstico de fallas de sistemas de engranajes. ISA Trans. 2022, 123, 372–380. [Referencia cruzada] [PubMed]
32. Vosotros, F.; Perrett, J.; Zhang, L.; Laili, Y.; Wang, Y. Un sistema de evolución automática para la planificación de secuencias de desmontaje robótico en condiciones de interferencia inciertas. Robot. Computadora. Integral Fabricante. 2022, 78, 102392. [Referencia cruzada]
33. Ahwiadi, M.; Wang, W. Una técnica difusa en evolución adaptativa para el pronóstico de sistemas dinámicos. Traducción IEEE. Sistema difuso. 2021, 30, 841–849. [Referencia cruzada]
34. Cordovil, L.; Coutinho, P.; Besa, I.; Peixoto, M.; Palhares, R. Aprendizaje del control desencadenado por eventos basado en datos evolutivos Modelos granulares difusos. Int. J. Control no lineal robusto 2022, 32, 2805–2827. [Referencia cruzada]
35. Rocha, M.; Alves, K.; Queiroz, E.; Oliveira, F.; Demonios, M.; Aguiar, E. Modelado térmico de transformadores de potencia basado en el gaussiano multivariable evolutivo de membresía de conjunto modificado y el gaussiano multivariable evolutivo de tamaño de paso variable. J.Control. Automático. eléctrico. Sistema. 2022, 33, 1044–1055. [Referencia cruzada]
36. da Silva Júnior, GA; Silva, A. Un método de imputación de datos faltantes incremental simple y eficiente para la evolución neo-difusa red. Evolución. Sistema. 2022, 13, 201–220. [Referencia cruzada]
37. Lughofer, E.; Pratama, M. Conjunto secuencial en línea de sistemas difusos predictivos. Evolución. Sistema. 2022, 13, 361–386. [Referencia cruzada]
38. Gu, X.; Shen, Q. Un sistema de aprendizaje difuso autoadaptativo para la predicción de datos en tiempo real. inf. Ciencia. 2021, 579, 623–647. [Referencia cruzada]
39. Pratama, M.; Za'in, C.; Lughofer, E.; Pardedé, E.; Rahayu, DA Red de fuerza docente escalable para flujos de datos semisupervisados a gran escala . inf. Ciencia. 2021, 576, 407–431. [Referencia cruzada]
40. Gu, X. Conjunto multicapa en evolución del sistema de inferencia difusa. Traducción IEEE. Sistema difuso. 2020, 29, 2425–2431. [Referencia cruzada]
41. Coctelera, A.; Hüllermeier, E. TSK-Streams: Aprendizaje de sistemas difusos TSK para regresión en flujos de datos. Datos mín. Conocimiento. Descubrimiento. 2021, 35, 1941–1971. [Referencia cruzada]
42. Ge, D.; Zeng, XJ Flujos de datos de aprendizaje en línea: un enfoque de sistema difuso en evolución con umbrales adaptativos/de autoaprendizaje. inf. Ciencia. 2020, 507, 172–184. [Referencia cruzada]
43. Júnior, S.; Oliveira Serra, G. Previsión inteligente de series temporales basada en la red Neuro-Fuzzy distribuida en evolución. Computadora. Intel. 2020, 36, 1394–1413. [Referencia cruzada]
44. Alves, K.; Demonios, M.; Oliveira, F.; Aguiar, E. Un aprendizaje participativo en evolución de membresía de conjunto mejorado con mínimos cuadrados recursivos del núcleo aplicados al modelado térmico de transformadores de potencia. eléctrico. Sistema de energía. Res. 2020, 184, 106334. [Referencia cruzada]
45. Soares, E.; Angelov, P.; Gu, X. Clasificador de orden cero de modelo múltiple de aprendizaje autónomo para la clasificación de sonidos cardíacos. Aplica. Computación suave. J. 2020, 94, 106449. [Referencia cruzada]
46. Blazic, S.; Skrjanc, I. Agrupación de regresión C difusa incremental a partir de datos en tiempo real para la identificación de redes de modelos locales. Traducción IEEE. Sistema difuso. 2019, 28, 758–767. [Referencia cruzada]
47. Zhao, J.; Yang, L.; Wang, L.; Wang, W. Un clasificador difuso heterogéneo generalizado de tipo 2 y su aplicación industrial. IEEE Trans. Sistema difuso. 2019, 28, 2287–2301. [Referencia cruzada]
48. García, C.; Esmin, A.; Leite, D.; Škrjanc, I. Sistemas difusos evolucionables a partir de flujos de datos con valores faltantes: con aplicación al reconocimiento de patrones temporales y predicción de criptomonedas. Reconocimiento de patrones. Letón. 2019, 128, 278–282. [Referencia cruzada]
49. Pires, D.; Serra, Metodología GO para la evolución de la identificación de filtros difusos de Kalman. Int. J. Control automático. Sistema. 2019, 17, 793–800. [Referencia cruzada]
50. Shahparast, H.; Mansoori, E.; Jahromi, M. AFCGD: Un clasificador difuso adaptativo basado en descenso de gradiente. Computación suave. 2019, 23, 4557–4571. [Referencia cruzada]
51. Maciel, L.; Ballini, R.; Gomide, F. Evolución de modelos difusos para la previsión de la curva de rendimiento. Int. J. Economía. Autobús. Res. 2018, 15, 290–311. [Referencia cruzada]
52. Sa'ad, H.; Isa, N.; Ahmed, MM; Sa'd, A. Un método robusto de identificación de estructuras para sistemas difusos en evolución. Sistema experto. Aplica. 2018, 93, 267–282. [Referencia cruzada]
53. Za'in, C.; Pratama, M.; Lughofer, E.; Ferdaus, M.; Cai, Q.; Prasad, M. Análisis de Big Data basado en PANFIS MapReduce. procedimiento Computadora. Ciencia. 2018, 144, 140-152. [Referencia cruzada]
54. Andonovski, G.; Mušič, G.; Blažic, S.; Škrjanc, I. Identificación de modelos en evolución para el seguimiento de procesos y la predicción de sistemas no lineales . Ing. Aplica. Artif. Intel. 2018, 68, 214–221. [Referencia cruzada]
55. Abdullah, S.; AL-Hashmi, A. TiSEFE: Motor difuso de evolución de series temporales para la clasificación del tráfico de red. Int. J. Común. Neto. inf. Seguro. 2018, 10, 116-124. [Referencia cruzada]
56. Hu, Z.; Bodyanskiy, Y.; Tyshchenko, O.; Boiko, O. Pronóstico adaptativo de series temporales no estacionarias no lineales basadas en Evolución del modelo neuro-neo-difuso-ANARX ponderado. arXiv 2016, arXiv:1610.06486.

Machine Translated by Google

57. Pratama, M.; Lu, J.; Anavatti, S.; Lughofer, E.; Lim, CP Una red neuronal difusa de andamiaje incremental de base metacognitiva. Neurocomputación 2016, 171, 89-105. [Referencia cruzada]
58. Pratama, M.; Lu, J.; Lughofer, E.; Zhang, G.; Anavatti, S. Clasificador de andamio tipo 2 para el aprendizaje incremental bajo derivas de conceptos. Neurocomputación 2016, 191, 304–329. [Referencia cruzada]
59. Alizadeh, S.; Kalhor, A.; Jamalabadi, H.; Araabi, B.; Ahmadabadi, M. Selección de entradas locales en línea mediante la evolución de un sistema de inferencia difusa heterogénea. Traducción IEEE. Sistema difuso. 2016, 24, 1364–1377. [Referencia cruzada]
60. Maciel, L.; Gomide, F.; Ballini, R. Evolución del enfoque Fuzzy-GARCH para la modelización y previsión de la volatilidad financiera. Computadora. Economía. 2016, 48, 379–398. [Referencia cruzada]
61. Iglesias, J.; Tiemblo, A.; Ledezma, A.; Sanchis, A. Minería de noticias web en un marco en evolución. inf. Fusión 2016, 28, 90–98. [Referencia cruzada]
62. Ahmed, MM; Isa, N. Evolución del sistema difuso del contexto de salida para una base de reglas eficaz. Sistema experto. Aplica. 2015, 42, 1972–1986. [Referencia cruzada]
63. Ahmed, MM; Isa, N. Modelo de granularidad de la información para la evolución de un sistema difuso basado en contexto. Aplica. Computación suave. J. 2015, 33, 183–196. [Referencia cruzada]
64. Lughofer, E.; Cernuda, C.; Kindermann, S.; Pratama, M. Sistemas difusos en evolución inteligentes generalizados. Evolución. Sistema. 2015, 6, 269–292. [Referencia cruzada]
65. Moshtaghi, M.; Bezdek, J.; Leckie, C.; Karunasekera, S.; Palaniswami, M. Evolución de reglas difusas para la detección de anomalías en flujos de datos. Traducción IEEE. Sistema difuso. 2014, 23, 688–700. [Referencia cruzada]
66. Sí. Bodyanskiy, A.; Vynokurova, O. Evolución del sistema de autoaprendizaje neurodifuso de ondas onduladas. Aplica. Computación suave. 2014, 14, 252–258. [Referencia cruzada]
67. Jesús Rubio, J.; Pérez-Cruz, J. Sistema inteligente en evolución para el modelado de sistemas no lineales con entrada de zona muerta. Aplica. Computación suave. J. 2014, 14, 289–304. [Referencia cruzada]
68. Iglesias, J.; Ledezma, A.; Sanchis, A. Clasificación en evolución de los comportamientos de los usuarios de UNIX. Evolución. Sistema. 2014, 5, 231–238. [Referencia cruzada]
69. Pratama, M.; Anavatti, S.; Lughofer, E. Genefis: Hacia una red localista eficaz. Traducción IEEE. Sistema difuso. 2013, 22, 547–562. [Referencia cruzada]
70. Ramasso, E.; Gouriveau, R. Estimación de la vida útil restante mediante clasificación de predicciones basada en un sistema neuro-difuso y Teoría de las funciones de creencias. Traducción IEEE. Confiable. 2014, 63, 555–566. [Referencia cruzada]
71. Maciel, L.; Gomide, F.; Ballini, R. Modelado difuso de aprendizaje participativo en evolución mejorado: una aplicación para el pronóstico de la volatilidad de los rendimientos de los activos. Evolución. Sistema. 2014, 5, 75–88. [Referencia cruzada]
72. Lemos, A.; Caminhas, W.; Gomide, F. Detección y diagnóstico adaptativo de fallas mediante un clasificador difuso en evolución. inf. Ciencia. 2013, 220, 64–85. . [Referencia cruzada]
73. Ordóñez, FJ; Iglesias, J.; Toledo, P.; Ledezma, A.; Sanchis, A. Reconocimiento de actividades en línea mediante clasificadores en evolución. Sistema experto. Aplica. 2013, 40, 1248–1255. [Referencia cruzada]
74. Tung, S.; Quek, C.; Guan, C. eT2FIS: un sistema de inferencia difusa neuronal tipo 2 en evolución. inf. Ciencia. 2013, 220, 124-148. . [Referencia cruzada]
75. Kalhor, A.; Araabi, B.; Lucas, C. Evolución del modelo difuso Takagi-Sugeno basado en el cambio a modelos vecinos. Aplica. Computación suave . J. 2013, 13, 939–946. [Referencia cruzada]
76. Zarandí, M.; Hadavandi, E.; Turksen, I. Un sistema híbrido basado en agentes inteligentes y difusos para la predicción del precio de las acciones. Int. J. Intel. Sistema. 2012, 27, 947–969. [Referencia cruzada]
77. Leng, G.; Zeng, XJ; Keane, J. Un enfoque mejorado de red neuronal difusa autoorganizada basado en medidas de similitud. Evolución. Sistema. 2012, 3, 19–30. [Referencia cruzada]
78. Lasota, T.; Telec, Z.; Trawinski, B.; Trawinski, K. Investigación de la evolución de los sistemas difusos eTS aplicados a la tasación inmobiliaria. J. -Registro multivalor. Computación suave. 2011, 17, 229–253.
79. Iglesias, J.; Angelov, P.; Ledezma, A.; Sanchis, A. Clasificación evolutiva de las conductas de los agentes: un enfoque general. Evolución. Sistema. 2010, 1, 161–171. [Referencia cruzada]
80. Angelov, P.; Kordon, A. Sensores inferenciales adaptativos basados en modelos difusos en evolución. Traducción IEEE. Sistema. Hombre, Cybern. Parte B Cibern. 2009, 40, 529–539. [Referencia cruzada]
81. Ferdaus, MM; Presa, T.; Alam, S.; Pham, DT X-Fuzz: un alumno neurodifuso interpretable y en evolución para flujos de datos. Traducción IEEE. Artif. Intel. 2024, 1–12. [Referencia cruzada]
82. Yan, L.; Zhao, T.; Xie, X.; Precup, RE OSSEFS: un sistema difuso de conjunto semisupervisado en línea para el aprendizaje de flujos de datos con valores faltantes. Sistema experto. Aplica. 2024, 255, 124695. [Referencia cruzada]
83. Hu, L.; Xu, X.; Ren, W.; Han, M. Sistema difuso en evolución jerárquica: un método para series temporales caóticas multidimensionales Predicción en línea. Traducción IEEE. Sistema difuso. 2024, 32, 3329–3341. [Referencia cruzada]
84. Mei, Z.; Zhao, T.; Gu, X. Un sistema difuso en evolución dinámica para la predicción de datos en tiempo real. Traducción IEEE. Sistema difuso. 2024, 1–14. [Referencia cruzada]

Descargo de responsabilidad/Nota del editor: Las declaraciones, opiniones y datos contenidos en todas las publicaciones son únicamente de los autores y contribuyentes individuales y no de MDPI ni de los editores. MDPI y/o los editores renuncian a toda responsabilidad por cualquier daño a personas o propiedad que resulte de cualquier idea, método, instrucción o producto mencionado en el contenido.

Machine Translated by Google

computation

MDPI

Artículo

Evaluación de la dinámica del factor de pánico psicológico. Riesgo de glucosa y efectos del estrógeno en el modelo de cáncer de mama

Zahraa Aamer 1, Shireen Jawad 1, Belal Batiha 2, Ali Hasan Ali 3,4,*, Firas Ghanim 5 y Alina Alb Lupaş 6,*

1 Departamento de Matemáticas, Facultad de Ciencias, Universidad de Bagdad, Bagdad 10071, Irak; zahraa.aamer1703a@sc.uobaghdad.edu.iq (ZA); shireen.jawad@sc.uobaghdad.edu.iq (SJ)
2 Facultad de Ciencias y Tecnología de la Información, Departamento de Matemáticas, Universidad de Jadara, Irbid 21110, Jordania; b.bateha@jadara.edu.jo
3 Instituto de Matemáticas, Universidad de Debrecen, Pf. 400, H-4002 Debrecen, Hungría
4 Centro de Investigación de la Universidad de Jadara, Universidad de Jadara, Irbid 21110, Jordania
5 Departamento de Matemáticas, Facultad de Ciencias, Universidad de Sharjah, Sharjah 27272, Emiratos Árabes Unidos; fgahmed@sharjah.ac.ae
6 Departamento de Matemáticas e Informática, Universidad de Oradea, 1 Universitatii Street, 410087 Oradea, Rumania
* Correspondencia: ali.hasan@science.unideb.hu (AHA); alblupas@gmail.com (AAL)

Resumen: Contraer cáncer típicamente induce un estado de terror entre las personas afectadas. Explorar cómo el exceso de glucosa, el exceso de estrógeno y la ansiedad trabajan juntos para afectar la velocidad a la que se multiplican las células del cáncer de mama y el modelo de respuesta del sistema inmunológico es necesario para concebir formas de detener la propagación del cáncer. Este artículo propone un modelo matemático para investigar el impacto del pánico psicológico, el exceso de glucosa y el exceso de estrógeno en la interacción del cáncer y la inmunidad. El modelo propuesto se describe con precisión. El objetivo del análisis dinámico del modelo es identificar las posibles ubicaciones de equilibrio. Según el análisis, es posible establecer cuatro posiciones de equilibrio. El análisis de estabilidad revela que todos los puntos de equilibrio exhiben consistentemente estabilidad bajo las condiciones definidas. La bifurcación transcrítica ocurre cuando el exceso de glucosa se toma como punto de bifurcación. Se emplean simulaciones numéricas para validar el estudio teórico, que muestra que el pánico psicológico, el exceso de glucosa y el exceso de estrógeno podrían contribuir significativamente a la propagación de tumores y la debilidad de la función inmune.

Palabras clave: pánico psicológico; riesgo de glucosa; efecto estrógeno; modelo de cáncer de mama; análisis de estabilidad

Cita: Aamer, Z.; Jawad, S.; Batiha, B.; Ali, AH; Ghanim, F.; Lupaş, AA Evaluación de la dinámica del factor de pánico psicológico, riesgo de glucosa y estrógeno Efectos sobre el modelo de cáncer de mama. Computación 2024, 12, 160. https://doi.org/10.3390/cálculo12080160

Editor académico: Simeone Marino

Recibido: 23 de mayo de 2024
Revisado: 12 de julio de 2024
Aceptado: 2 de agosto de 2024
Publicado: 8 de agosto de 2024

Copyright: © 2024 por los autores. Licensee MDPI, Basilea, Suiza. Este artículo es un artículo de acceso abierto. distribuido bajo los términos y condiciones condiciones de Creative Commons Atribución de licencia (CC BY) (https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

1. Introducción

Un grupo de trastornos denominados colectivamente cáncer son aquellos en los que las células se dividen sin control a un ritmo más rápido que las células sanas y tienen el potencial de metastatizarse en otras partes del cuerpo [1]. Los datos indican que el número de muertes causadas por el cáncer fue de aproximadamente 8,2 millones en el año 2010. Se prevé que la tasa de mortalidad atribuida al cáncer aumentará de manera persistente, lo que resultará en aproximadamente 13 millones de muertes para el año 2030 [2]. El cáncer de mama es el segundo tipo de cáncer más frecuente en las mujeres, sólo superado por el cáncer de piel, entre muchos otros. Un poco menos del 12% de las mujeres desarrollarán cáncer de mama invasivo a lo largo de su vida [3]. Hay tres factores de riesgo principales para el cáncer de mama: factores genéticos (como los antecedentes familiares), desequilibrio hormonal (es decir, estrógeno) y factores ambientales (incluido el consumo de alcohol, una mala alimentación, la exposición a toxinas, el tabaquismo, etc.). [4]. Para estudiar el comportamiento dinámico de las células cancerosas ante la presencia de diferentes estímulos, a lo largo de los años se han desarrollado numerosos modelos matemáticos. Por ejemplo, Dehingia et al. desarrolló un modelo matemático para evaluar el impacto de la obesidad en el crecimiento tumoral y la respuesta inmune, considerándola como un factor de riesgo en un estudio que demuestra que la grasa acumulada en el cuerpo de un individuo obeso contribuye significativamente a la formación de tumores, e

Machine Translated by Google

factores asociados con la supervivencia [5]. Una elevación de los niveles de estrógeno podría potencialmente acelerar la tasa de formación de tumores [6,7]. Sorofa et al. [8] evaluaron cómo el estrógeno afecta la dinámica de las células inmunológicas normales y el cáncer de mama. Los resultados mostraron que los niveles elevados de estrógeno pueden retardar el desarrollo del sistema inmunológico y mejorar la iniciación del tumor.

Se ha demostrado que la mayor parte de la energía para las células de cáncer de mama proviene de la glucólisis, en la que la glucosa se transforma en lactato para obtener energía durante todo el proceso de glucólisis [9,10]. Múltiples estudios han verificado que las células cancerosas tienen una gran necesidad de glucosa como fuente de alimento. Por tanto, el efecto de la glucosa se incorpora al modelo tumoral para evaluar su impacto en las células del cáncer de mama. Por ejemplo, Sun et al. investigó el impacto de la privación de glucosa en la apoptosis de las células de cáncer de mama en un estudio que demuestra que consumir una cantidad excesiva de glucosa puede promover el desarrollo y la proliferación de células cancerosas, mientras que restringir el consumo de glucosa puede disminuir y suprimir el crecimiento. de las células cancerosas [11]. Una ingesta elevada de glucosa puede provocar un estado patológico y una alteración de la funcionalidad del sistema inmunológico. Sin embargo, mantener una cantidad adecuada de glucosa es fundamental para el funcionamiento del sistema inmunológico. Como resultado, la infiltración de una cantidad sustancial de glucosa en las células inmunitarias puede tener efectos perjudiciales sobre el sistema inmunitario. En consecuencia, esto da como resultado una funcionalidad comprometida del sistema inmunológico, lo que inicia condiciones patol Alharbi et al. creó un modelo que ofrece una comprensión fundamental del proceso del cáncer de mama en pacientes que ya tienen factores de riesgo relacionados con la hiperglucemia. Determinaron que sus hallazgos tienen el potencial de ser ventajosos para la futura administración y tratamiento de medicamentos contra el cáncer de mama [13].

Por otro lado, un creciente cuerpo de literatura destaca el uso de modelos matemáticos para investigar los efectos de la ansiedad en la transmisión de enfermedades [14,15]. La investigación en el campo médico ha demostrado que la angustia emocional podría acelerar la metástasis de células cancerosas en un paciente. El estrés a nivel psicológico ensancha y espesa los vasos sanguíneos, lo que a su vez acelera la migración de las células cancerosas y facilita la propagación de la enfermedad [16]. Según investigaciones recientes, las hormonas producidas por el estrés aceleran el crecimiento de las células cancerosas en el "sistema linfático", lo que a su vez facilita que estas células se propaguen a otras partes del cuerpo, un proceso conocido como metástasis [17-19].

En resumen, la mayoría de las investigaciones anteriores han demostrado que una dieta rica en glucosa y niveles elevados de estrógeno podrían promover el crecimiento y la proliferación de células de cáncer de mama, lo que aumenta la probabilidad de que la enfermedad progrese rápidamente. Por otro lado, el impacto de los niveles elevados de estrógeno y glucosa en el sistema inmunológico humano ha sido objeto de muy pocas investigaciones. La evidencia experimental sugiere que las células inmunes son vulnerables a los efectos dañinos de niveles altos o bajos de glucosa en sangre, así como de niveles altos de estrógeno [8,20]. Además, faltan investigaciones sobre el impacto de la ansiedad en el modelo de células inmunitarias y cáncer de mama. Por tanto, debemos investigar este fenómeno, ya que juega un papel en la minimización de la ocurrencia de situaciones desastrosas. Por lo tanto, esta investigación se centra en examinar la influencia de la ansiedad en pacientes con cáncer inmunocomprometidos, que puede servir como un factor sustancial en la proliferación de tumores y el deterioro de la eficacia del sistema inmunológico.

Esta investigación tiene como objetivo investigar la dinámica del modelo células inmunes-cáncer de mama como resultado de la influencia combinada del factor de pánico psicológico, el aumento del consumo de glucosa y los altos niveles de estrógeno y sus efectos nocivos sobre las células normales, cancerosas e inmunes. . Teniendo en cuenta estos efectos, proponemos un modelo PPIGCNE de interacción pánico psicológico-inmune-glucosa-cáncer-estrógeno normal. Los hallazgos de este artículo proporcionan un contexto adicional para [8] por

(1) Analizar el impacto de la glucosa como factor de riesgo en la progresión del cáncer de mama.

(2) Examinar la influencia del pánico psicológico en el sistema inmunológico de pacientes con cáncer de mama, que puede desempeñar un papel clave en la progresión de enfermedades malignas y el deterioro de la función inmune.

Machine Translated by Google

Luego de una descripción de la construcción del modelo, pretendemos determinar cómo los efectos anteriores impactan la dinámica de un modelo PPIGCNE. Además, este artículo explorará la comprensión de la dinámica no lineal exhibida por nuestro modelo mediante la utilización de diversas metodologías, incluidas técnicas de análisis de estabilidad y bifurcación. En conclusión, validaremos la precisión de nuestros hallazgos analíticos mediante una simulación numérica del sistema propuesto.

2. Supuestos del modelo

En esta parte, construiremos un modelo integrando muchas investigaciones experimentales y modelos matemáticos [21-23] que dilucidan la dinámica de la progresión tumoral.
Se formula el modelo de interacción del pánico psicológico, el aumento del consumo de glucosa y los niveles altos de estrógeno. La dinámica del modelo PPIGCNE influye significativamente en el desarrollo del cáncer de mama, convirtiéndolo en un factor de riesgo sustancial. Además, analizamos las interacciones entre los factores anteriores con las células tumorales de mama. Las relaciones entre las células inmunitarias (), las células cancerosas (), las células normales (de la mama) () y el efecto del estrógeno (), se representan en la Figura 1.

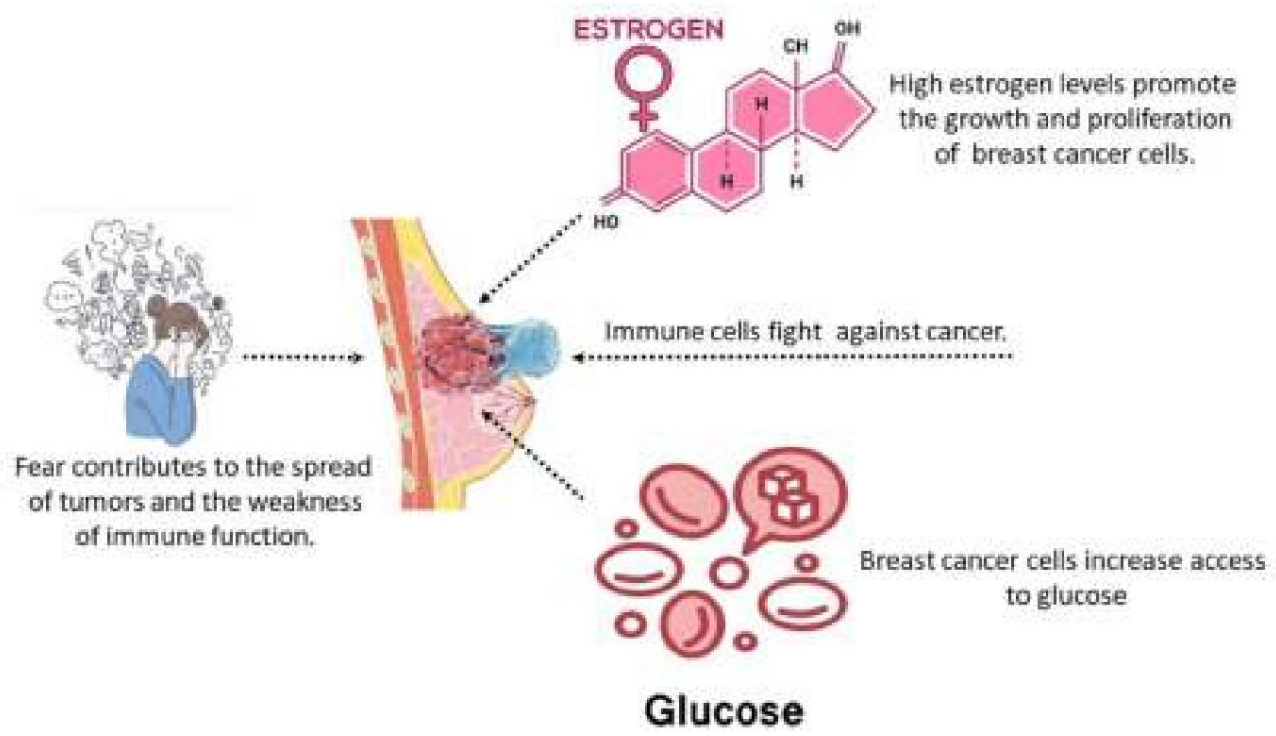


Figura 1. Croquis esquemático del modelo PPIGCNE.

La respuesta del sistema inmunológico es fundamental para proteger el tejido mamario contra tumores malignos y garantizar una respuesta adecuada tras el reconocimiento de las células tumorales. La presencia de células tumorales estimula la activación del sistema inmunológico. La representación dinámica de las células inmunes es

$$\frac{} = \frac{}{1+} + \frac{1}{1+} - \quad _2 \quad - \quad _3 \quad - (+ \quad _1). \tag{1}$$

El término (1 +／) denota la generación constante de células inmunes dentro del organismo, que se ve influenciada negativamente por el factor de miedo psicológico en presencia de cáncer. La función del miedo se integra mediante la función decreciente), concepto que Wang et al. [24]
(,) = 1 (1 +／ propuesto por primera vez. Dada su naturaleza biológica
implicaciones, (,) se considera adecuado ya que

Machine Translated by Google

$$(0,) = 1, (, 0) = 1, \quad \rightarrow\infty (,) = 0, \quad \rightarrow\infty (,) = 0, \quad \frac{(,)}{} < 0, \quad \frac{(,)}{} < 0.$$

En (1), 1/(1 +), denotado por el término de Michaelis-Menten [25], indica la pres-denota la medida del presencia de células tumorales que provocan una respuesta inmune [26]. 2

impacto de las células tumorales en las células inmunes al suprimir la respuesta inmune con células cancerosas [26]. se refiere a la tasa de supresión inmune inducida por el estrógeno [8]. (+) se refiere a la disminución de las células inmunes debido al exceso de glucosa y la muerte natural tasa [13].

Las células de cáncer de mama T(t) consisten en células aberrantes caracterizadas por inflamación y rápida proliferación de células mamarias, lo que conduce a la formación de tumores. Por tanto, definimos la ecuación que representa el tumor como:

$$\frac{}{} = \ (1 - \ )- \ + \ - \ + . \quad (2)$$

El término) representa la función logística de crecimiento de las células tumorales, donde es la tasa de crecimiento intrínseco del cáncer de mama y representa la capacidad de carga de las células de cáncer de mama. El término 4 significa erradicar las células cancerosas mediante el sistema inmunológico del cuerpo. El resultado del daño al ADN causado por el estrógeno es que las células normales que han sido dañadas se transformarán en células tumorales, lo que hará que la población de células tumorales aumente a un ritmo de 5 . Esto conduce a un factor de crecimiento de 5 en la población de células tumorales [8]. 2 designa la tasa de mortalidad de las células cancerosas de mama. células debido a niveles elevados de glucosa Indica la formación de un nuevo cáncer. dentro del cuerpo del paciente [13].

Las células mamarias sanas poseen ADN no modificado que gobierna las actividades de todas las células mamarias durante su crecimiento, división y desaparición [27]. Las células mamarias sanas y las células mamarias malignas compiten por la nutrición y otros recursos. Las células mamarias sanas se representan mediante

$$\frac{}{} = \ (1 - \ )- \ - \ . \quad (3)$$

El término (1 -) representa la función logística de crecimiento saludable de las células mamarias. término Representa la tasa de degradación de las células mamarias sanas causada por células tumorales. La disminución de células mamarias sanas debido a un mayor nivel de estrógeno provoca la conversión de células normales en células tumorales, lo que ocurre a un ritmo del [8].

El estrógeno, una hormona esteroide femenina, se produce en niveles bajos en la placenta de las mujeres y en los testículos de los hombres. Tiene varios propósitos importantes, incluido facilitar el desarrollo sexual, controlar el ciclo menstrual de la mujer y gestionar los cambios físicos asociados con la pubertad. Por tanto, se considera una hormona crucial para la transformación óptima de los tejidos mamarios. El estrógeno es reconocido como un factor de riesgo relacionado con el desarrollo del cáncer de mama. El estrógeno desempeña un papel en la activación de otras hormonas, como la relaxina, que a su vez estimula la proliferación de las células mamarias [28]. Los estrógenos han promovido la proliferación de células tumorales cuando hay células tumorales presentes. Funciona como carcinógeno al dañar el ADN y convertir las células epiteliales normales en células tumorales cancerosas [29,30]. La dinámica del estrógeno se puede describir de la siguiente manera:

$$\frac{}{} = - \ . \quad (4)$$

donde representa la velocidad a la que se produce un aumento de estrógeno y la velocidad a representa la que el estrógeno se elimina del sistema corporal.

Tras una evaluación cuidadosa de estos factores, proponemos el siguiente conjunto de ecuaciones diferenciales para determinar el comportamiento de las células de cáncer de mama:

Machine Translated by Google

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} &= \frac{}{1+} + \frac{1}{1+} - \quad - \quad - (+ \quad _1), \\ \frac{d}{dt} &= \quad _1 (1 - \quad _1) - \quad _4 + \quad _5 \quad - \quad _2 + \quad , \\ \frac{d}{dt} &= \quad _2 (1 - \quad _2) - \quad _6 \quad - \quad _7 \quad , \\ \frac{d}{dt} &= - \quad _3 . \end{aligned} \tag{5}$$

Los parámetros del modelo y sus interpretaciones se aclaran en la Tabla 1.

Tabla 1. Las interpretaciones de los parámetros del modelo PPIGCNE.

Parámetro	Interpretación La	Valores	Unidad	Fuente
	tasa de producción de células inmunitarias del cuerpo.	0,5	(células/día)	[30]
	Tasa de pánico psicológico por cáncer.	0.1	adimensional	Estimado
1	Tasa de obtención de células inmunitarias por parte de las células cancerosas.	0.1	1/(células·día)	[30]
1	Vida media de las células efectoras.	0,4	(día) 1/	[30]
2	Tasa de inactivación de las células inmunes debido al efecto de las células tumorales.	0,2	(células·día) 1/	[30]
3	Tasa de inhibición de las células inmunes debido a altos niveles de estrógeno.	0,09	(mg/dL·día) 1/(mg/	[8]
	Tasa de supresión de células inmunitarias por niveles altos de glucosa en sangre.	0,2	dL·día) (células/	[30]
1	Tasa de muerte de las células efectoras.	0,2	día) (células/	[30]
1	Tasa de crecimiento intrínseco del cáncer de mama.	0,4	día) (célula)	[8]
1	Capacidad de carga de las células de cáncer de mama.	1.5	1/	[8]
4	La velocidad a la que las células efectoras eliminan las células tumorales.	0,2	(células·día) 1/	[30]
5	La tasa de transformación de células normales dañadas en células tumorales causada por el estrógeno.	0,2	(ng/mL·día) (células/	[8]
2	Tasa de mortalidad de las células de cáncer de mama.	0,05	día) (células/	[8]
2	Tasa de crecimiento intrínseco de células mamarias sanas.	0,35	día) (célula)	[8]
2	Capacidad de carga de células mamarias sanas.	1	1/	[8]
6	La tasa de degradación de las células mamarias sanas causada por células tumorales.	0,25	(células·día) 1/	[30]
7	La disminución de las células mamarias sanas causada por un nivel más alto de estrógeno.	0.1	(ng/mL·día) ng/mL/	[29]
	La tasa de mayor producción de estrógeno.	0,19	día ng/ ml/día	[8]
3	La tasa de eliminación de estrógeno del cuerpo.	0,05		[8]

3. Resultados de la Evaluación

Dinámica 3.1. Positividad y limitación de la solución

En los siguientes teoremas, la positividad y uniformemente acotada de todas las soluciones del modelo PPIGCNE en $^4_+$ están confirmados.

Teorema 1. Todas las soluciones del modelo PPIGCNE ( ), ( ), ( ) y ( ) con las condiciones iniciales ((0), (0), (0), (0)) son positivamente invariantes. $^4_+$

Prueba del teorema 1. Sea = (, ,) y ( ) = [( ), ( ), ( )] , donde ( ): $^4_+ \to \quad ^4$ y + ∞(+ $_1$ ( ), $^4_+$), = 1,2,3,4. Entonces el sistema PPIGCNE queda:

$$= ( ),$$

con (0) = ((0), (0), (0), (0)) = 0 . Está claro para cualquier (0) entonces [( )] ≥ 0 $^4_+$, tal que = 0, (para = 1,2,3,4). Ahora para cualquier solución de con $_0$ $^4_+$, digamos ( ) = (; 0), es tal que ( ) $^4_+$, para todo > 0. Por lo tanto, el sistema PPIGCNE está positivamente influenciado variante [31]. □

Teorema 2. Todas las soluciones del modelo PPIGCNE están uniformemente acotadas.

Prueba del teorema 2. Sea ((0), (0), (0), (0)) $^4_+$ ser una condición inicial para el PPIGCNE, entonces, usando el método de Bernoulli, obtenemos

$$\frac{d}{dt} = \quad _2 (1 - \quad _2) - \quad _6 \quad - \quad _7 \quad \le \quad _2 (1 - \quad _2) \quad ( ) \le \quad \frac{1}{2 + (0) - \quad ^2}$$

De este modo,

$$\lim_{\to \infty} \quad [( )] \le \quad \frac{1}{2}.$$

Machine Translated by Google

Utilizando la teoría de comparación estándar [32] sobre la última ecuación del PPIGCNE, obtenemos

$$\lim_{\to\infty} [\ (\ )] \leq \frac{}{3}$$

De la segunda ecuación del PPIGCNE, tenemos

$$\frac{}{} = {}_{1}\ (1 - {}_{1}\ ) - {}_{4} + {}_{5} - {}_{2} + \leq {}_{1} - {}_{11}{}^{2} + .$$

Usando el método de Bernoulli, obtenemos

$$(\ ) \leq \frac{{}_{1}{}^{+}}{{}_{11} \quad +)\ (0) - (\ 1+\ ) + (\ 1}$$

De este modo,

$$\lim_{\to\infty} [\ (\ )] \leq \frac{{}_{1}{}^{+}}{{}_{11}}.$$

Ahora, utilizando la teoría de comparación estándar [32], obtenemos

$$\frac{}{} = \frac{}{1 +} + \frac{1}{{}_{1}{}^{+}} - {}_{2} - {}_{3} - (+ {}_{1}) \leq - (+ {}_{1})$$

$$\lim_{\to\infty} [\ (\ )] \leq \frac{}{(+ {}_{1})}.$$

Por lo tanto, la región de dominio correspondiente para el modelo PPIGCNE es

$$= \{(\ , \ , \ , \ ) \quad {}_{+}^{4} : (\ ) \leq \frac{}{(+ {}_{1})}, (\ ) \leq \frac{{}_{1}{}^{+}}{{}_{11}}, (\ ) \leq \frac{1}{{}_{2}}, (\ ) \leq \frac{}{{}_{3}}\}.$$

□

3.2. Existencia de equilibrios

Restablecer el lado izquierdo del modelo PPIGCNE a cero traerá las soluciones de las ecuaciones del modelo al equilibrio:

1. Punto de equilibrio libre de células tumorales y = (, 0,0,), donde = $\frac{3}{3 +(+1)3}$ y = $\frac{}{3}$ mamarias 1 . Es importante mencionar que la permanece constante durante expresión todos los puntos de equilibrio que contienen posición.

), 2. Punto de equilibrio libre de tumor 2 = (, 0, , dónde = $\frac{s}{e3\mu3+(g+\mu1\ )s}$, y = $\frac{2 - 73}{22}$. Para > 0, debemos tener

$${}_{2} > \frac{73} \quad (6)$$

En términos biológicos, este punto se refiere a un caso sano porque el tumor desaparece mientras el sistema inmunológico y las células normales permanecen. Lo siguiente justifica este punto. El bajo nivel de estrógeno hace que el entorno del tumor sea inadecuado para el crecimiento, lo que promueve la erradicación de las células cancerosas por parte de las células inmunitarias.

donde 3. El punto de equilibrio 3 sin células = (, , 0,), = $\frac{-1-11\quad 2+}{4}$ y mamarias es la raíz de la siguiente ecuación:

$$(\ ) = {}_{1}{}^{4} + {}_{2}{}^{3} + {}_{3}{}^{2} + {}_{4} + {}_{5},$$

dónde

$${}_{1} = {}_{112},$$

$${}_{2} = - {}_{12} - {}_{112} + {}_{1121} + {}_{1133} + {}_{22} - {}_{2},$$

$${}_{3} = {}_{11} {}_{12} {}_{121} - {}_{133} {}_{111} + {}_{1211} {}_{1133} + {}_{1131} - {}_{21} + {}_{22} + {}_{221} + {}_{233} + {}_{1} {}_{2} - {}_{21} - {}_{33},$$

$${}_{4} = 4 + {}_{11} {}_{121} + {}_{133} - {}_{1331} + {}_{11313} - {}_{21} + {}_{221} + {}_{33} + {}_{2331} {}_{1} {}_{21} {}_{33} {}_{331},$$

${}_{5} = [\ 4 - {}_{33}(1 \quad {}_{2} +)]\ 1$. Claramente,

Machine Translated by Google

(0) = 5,
( ) = ′ 11 4 + 21 3 + 31 2 + 41 + 5,
( ) = 4 1 3 + 3 2 2 + 2 3 + 4.

Por lo tanto, si se cumple alguno de los siguientes criterios, entonces ( ) tiene una raíz positiva única, digamos = , en el intervalo (0, 1) según el teorema del valor intermedio.

$$(0) > 0, (1) < 0 \text{ y } ' ( ) < 0, \quad (7)$$

$$(0) < 0, (1) > 0 \text{ y } ' ( ) > 0 \quad (8)$$

Para > 0, debemos tener

$$> 1, \quad (9)$$

dónde 1 = 1(1 − 1) + 2 . Biológicamente, la condición (9) significa que este punto se clasifica como un riesgo para la glucosa. Esto se debe a que el nivel de glucosa (g) es mayor que la tasa de crecimiento tumoral, que es un factor que conduce al crecimiento de células cancerosas a una tasa significativamente mayor que la de las células normales. Como resultado de la propagación del tumor, la paciente se encuentra en una situación grave que, en última instancia, resulta en una mastectomía o la muerte de la paciente.

4. El punto coexistente 4 = (, , ,), donde $= \frac{23-63 \quad -7}{22}$, =

$\frac{1^{2}+2 \quad +3}{4}$, y

1 = - 1212,
2 = 2 2(1 + − 2) − + 7), y 56,
3 = - 53(6 es una raíz de la siguiente ecuación

$$( ) = 1^{5} + (1 + 2)^{4} + (2 + 3)^{3} + (3 + 5)^{2} + (4 + 4 + 5) + 4$$

dónde

1 = - 21,
2 = −(1 2 +) 1 $- \frac{3}{3}$ − (1 + 2) 2 ,
3 = 1(1 = − 13 $\frac{-}{3}$ − 1 − 1 1) + 2(1 1 1), − 12 − 3 $\frac{-}{3}$ − − 1) − 23,
4 − 3(1 3 $\frac{}{3}$ + 1 +
5 = − 2(1 3 $\frac{}{3}$ + 1 + 1 1) + 3(1 − 12 − 3 $\frac{-}{3}$ − − 1).

Claramente,
(0) = 4 > 0
( ) = ′ 5 1 1 + (+ 4 4(2) 4 1 + (+ 2 2 + 3) 3 1 + ( ) 3 + 5) 2 1 + ( ) 4 + 4 + 5) 1 +) 4
( ) = 5 1 1 + 2 3(+ 2 3 + 2(+ 3 5 + (4 + + 4 5 ·

Por lo tanto, si se cumplen los siguientes criterios, entonces ( ) tiene una raíz positiva única, digamos = , en el intervalo (0, 1) según el teorema del valor intermedio

$$(1) < 0 \text{ y } ' ( ) < 0, \quad (10)$$

Para > 0 y > 0, debemos tener

$$23 > 63 + 7, \quad (11)$$

$$1 2 + 2 + 3 > 0. \quad (12)$$

El punto coexistente significa la etapa de interacción entre las células inmunes, malignas, normales y estrógenos. Cada célula participa en una feroz lucha por la supervivencia durante esta fase. La aparición de un tumor desencadena la activación de las células inmunitarias.

Machine Translated by Google

3.3. Análisis de estabilidad

El comportamiento de la estabilidad local alrededor de los puntos de equilibrio anteriores se examina en esta sección. La matriz jacobiana del modelo PPIGCNE se puede expresar de la siguiente manera:

$$= \begin{bmatrix} \frac{1}{} & \frac{1}{} & \frac{1}{} & \frac{1}{} \\ \frac{2}{} & \frac{2}{} & \frac{2}{} & \frac{2}{} \\ \frac{3}{} & \frac{3}{} & \frac{3}{} & \frac{3}{} \\ \frac{4}{} & \frac{4}{} & \frac{4}{} & \frac{4}{} \end{bmatrix} = ( )_{4\times4},$$

dónde $_{11} = \frac{1}{(1+)} - _2 - _3 - (+1)$, $_{12} = \frac{-}{(1+)^2} + \frac{11}{(1+)} - _2$, $_{13} = 0$, $_{14} = -_{3,21}$ $= -_{4,22}$ $= _1 - 2_{11} - _4 - 2 +$, $_{23} = _{5,24}$ $= _{5,31}$ $= 0$, $_{32} = _{6,33}$ $= -22_{22} - _6 - 7$, $_{34} = -_{7,41}$ $= _{42} = _{43} = 0$, $_{44} = -_3$.

El análisis local del sistema PPIGCNE en los tres puntos de equilibrio mencionados anteriormente se calcula como

(1) La matriz jacobiana en $_1 = (, 0, 0,)$ viene dado como:

$$(_1) = \begin{bmatrix} -_3 - (+1) & \frac{1}{} - _2 & 0 & 3 \\ 0 & _1 - _4 - 2 + & 5 & 0 \\ 0 & 0 & 2 - 7 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3 \end{bmatrix}$$

Los valores propios de $(y _1)$ son $_{11} = -_3 - (+ 1) < 0$, es $_{12} = _1 - _4 - 2 +$, $_{13} = 2 - 7$, $_{14} = -_3 0$. Entonces, $_1$ un estable localmente asintótico si

$$_2 < _7 , \quad (13)$$

$$< _2 \quad (14)$$

dónde $_2 = _4 + 2 + 1$. La condición (13) muestra que una mastectomía podría ocurrir cuando la tasa de disminución de las células mamarias sanas causada por un nivel más alto de estrógeno es mayor que la tasa de crecimiento intrínseco de las células mamarias sanas. Además, desde un punto de vista biológico, la condición (14) significa que las células cancerosas dependen de su capacidad para absorber glucosa y reproducirse. En consecuencia, una tasa de glucosa inferior inhibirá sustancialmente las células cancerosas, reduciendo así su fuerza y capacidad para reproducirse y propagarse. Por el $_{2,1}$ es contrario, para > un punto $_2$, entonces $(_1)$ tiene valor propio cero, lo que hace que 1 sea no hiperbólico de silla. Para = punto.

(2) La matriz jacobiana en $_2 = (, 0, ,)$ viene dado como:

$$(_2) = \begin{bmatrix} -_3 - (+1) - + & \frac{1}{} - _2 & 0 & -3 \\ 0 & _1 - _4 - 2 + & 5 & 5 \\ 0 & 6 & 2 - 2_{22} - 7 & -7 \\ 0 & 0 & 0 & -_3 \end{bmatrix}$$

Los valores propios de $(- _2)$ son

$_{21} = -_3 (+ 1) < 0$,

$_{22} + _{23} = (1 - _4 - 2 + + 2 - 2_{22} - 7)$,

$_{22.23} = 12 + -2_{122} - 27 - 24 - 2_{24} + 47 - 22 + 2_{222} 72 + 2 - 2_{22} - 7 56$,

$_{24} = -_3 < 0$.

Machine Translated by Google

Eso significa 2 es un punto localmente asintótico estable si, y sólo si, se satisfacen las siguientes condiciones:

$$< \quad {}_{3} \qquad (15)$$
$$_{22.23} > 0\},$$

dónde $_{3} = 2\ _{22} + \ _{7} + \ _{4} + \ _{2} - (1 + 2).$

(3) La matriz jacobiana en $_{3} = (\ , \ , 0, \ )$ viene dado como:

$$(\ _{3}) = \begin{bmatrix} \frac{1}{1+} - \ _{2} - \ _{3} & -(+1) & \frac{}{(1+\ )^{2}} + \frac{1\ 1}{(1+\ )^{2}} - \ _{2} & 0 & - \ _{3} \\ 4 & -2\ 1 & 1\ 1 - \ _{4} - \ _{2} + & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 2 - \ - \ _{7} & 0 & \\ 0 & 0 & 60 & - \ _{3} & \end{bmatrix}$$

Entonces, $(\ _{3})$ tiene los siguientes valores propios

$$_{31} + \ _{32} = (1\ _{1} + \frac{}{1\ 1)} + 2 + \ _{1} + \ _{1} - (\ _{3} + \ _{4} + 2),$$

$$_{31.32} = (1\ _{1} + \frac{}{} - \ _{2} - \ _{3} - -1)(1 - 2\ _{11} - \ _{4} - \ _{2} +) - (1 + \frac{4}{(1+\ )^{2}}) + \frac{1\ 1\ 4}{(1+\ )^{2}} + \ _{24}.$$

$$_{33} = \ _{2} - \ _{6} - \ _{7},$$

$$_{43} = - \ _{3} < 0.$$

Eso significa 3 es un punto estable localmente asintótico si, y sólo si, se cumplen las siguientes condiciones:

$$_{31} + \ _{32} < 0, \text{ y } \ _{31.32} > 0, \qquad (16)$$

$$_{2} > \ _{6} + \ _{7}. \qquad (17)$$

(4) La matriz jacobiana en $_{4} = (\ , \ , \ , \ )$ se puede escribir como:

$$(\ _{4}) = \begin{bmatrix} _{11} & _{12} & 0 & _{14} \\ _{21} & _{22} & _{23} & _{24} \\ 0 & _{32} & _{33} & _{34} \\ 1 & 1 & 0 & 0 - \ _{3} \end{bmatrix},$$

dónde

$$_{11} = \frac{1}{1+} - \ _{2} - \ _{3}, \quad _{1,12} = \frac{-}{(1+\ )^{2}} + \frac{1\ 1}{(1+\ )^{2}} - \ _{2},$$

$$_{14} = - \ _{3}, \ _{21} = - \ _{4}, \ _{22} = 1 - 2\ _{11} - \ _{4} - \ _{2} +, \ _{23} = \ _{5},$$

$$_{24} = \ _{5}, \ _{32} = - \ _{6}, \ _{33} = -2\ _{22} - \ _{6} - \ _{7}, \ _{34} = - \ _{7}.$$

Entonces, la ecuación característica de $(\ _{4})$ se puede escribir como:

$$(- \ _{3} -)(\ ^{3} + \ _{1}\ ^{2} + \ _{2} + \ _{3}) = 0, \qquad (18)$$

donde $= -$

$$_{1} = -(\ _{11} + \ _{22} + \ _{33}),$$

$$_{2} = \ _{11}\ _{22} + \ _{11}\ _{33} + \ _{22}\ _{33} - \ _{23}\ _{32},$$

$$_{3} = -(\ _{11}\ _{22}\ _{33} + \ _{23}\ _{32} - \ _{11}\ _{23}\ _{32}),$$

$$\Delta = \ _{1}\ _{2} - \ _{3} = -(\ _{11} + \ _{22} + \ _{33})[\ _{11}(\ _{22}\ _{33} - \ _{23}\ _{32}) + \ _{22}\ _{33} - \ _{23}\ _{32}] - (\ _{11}(\ _{22}\ _{33} - \ _{23}\ _{32})).$$

Machine Translated by Google

Por tanto, según la regla de Routh-Hurwitz, 4 será asintóticamente estable si

$$_1 > 0, \quad _2 > 0, \text{ y } \Delta > 0. \tag{19}$$

Para alcanzar un estado saludable, examinaremos la estabilidad global que rodea a 2 explorar la dinámica del sistema PPIGCNE en regiones alejadas del punto de equilibrio 2 .

Teorema 3. $_2$ es un estable asintótico global siempre que se cumplan las siguientes condiciones:

$$_{22} \geq \geq \max\left\{\frac{\frac{2}{6}}{4_{11}}, \frac{4\frac{2}{7}}{3}\right\} \tag{20}$$

dónde $_4 = \max\left\{\frac{\sqrt{\frac{-}{1+}} - \sqrt{\frac{-}{1+}} - {}_2)^2 - {}_3 - {}_1, \frac{4\frac{2}{3}}{3} - {}_3}{{}_{11}}, -1\right\}$.

Prueba del teorema 3. Contemplemos la función definida positiva que se da a continuación:

$$= \frac{(-)^2}{2} + + (- + - 1 \ln \bar{}) \frac{(-)^2}{2}.$$

De este modo,

$$\bar{} = (\frac{-}{1+} + \frac{1}{1+} - 2)(-) - {}_3(-)(-)-(-)2 ({}_3 + + {}_1) + {}_{11}{}^2 - {}_4 + {}_5 (-)+ 6 {}_5 (-) {}_2 + - 2\,2(-)^2 - (-) - {}_7 - (- -)(-) {}_3(-)^2$$

Por lo tanto,

$$\bar{} \leq -[\sqrt{3}\frac{\sqrt{+ +}}{2}{}_1(-) + \sqrt{2}\bar{3}(-)]^2 - [\sqrt{2}\frac{\sqrt{}}{2}{}_2(-) + \sqrt{3}\bar{2}(-)]^2 - [\sqrt{3}\frac{\sqrt{+ +}}{2}{}_1(-) + \sqrt{1}{}^2{}_1]^2 - [\sqrt{2}\frac{\sqrt{}}{2}{}_2(-) + \sqrt{3}\bar{2}(-)]^2 + {}_5(-) + {}_5(-) + - {}_4 - {}_2.$$

Entonces, < 0 se puede transformar en una forma definida negativa bajo las condiciones (20). Por tanto, es una función de Lyapunov y $_2$ es un GAS. □

Por lo tanto, el estado estacionario libre de cáncer cumple los requisitos de estabilidad local, lo que hace que el punto sea globalmente estable. Desde una perspectiva biológica, el sistema inmunológico se refiere al proceso de eliminación selectiva de células tumorales si se cumplen las condiciones (20).

Machine Translated by Google

3.4. Bifurcación transcrítica

Una bifurcación transcrítica ocurre cuando dos puntos de equilibrio chocan e intercambian su estabilidad. En los siguientes teoremas, investigaremos la posibilidad de que ocurra una división transcrítica. Muchos estudiosos utilizan el teorema de Sotomayor para determinar la existencia de TB con bifurcación transcrítica, por ejemplo, véase [31-38]. Para esta determinación, el modelo PPIGCNE se puede reformular en las siguientes formas vectoriales:

$$\dot{} = ( ) \text{ con } = ( ), \ y = \begin{pmatrix} 1(, , ,) \\ 2(, , ,) \\ 3(, , ,) \\ 4(, , ,)) \end{pmatrix},$$

donde $= 1,2,3,4$ son las ecuaciones del lado derecho del sistema PPIGCNE. Poseemos los resultados posteriores sobre la bifurcación local alrededor del punto de equilibrio libre de células mamarias 3 . Ahora, para un vector distinto de cero $= (\ _{1,2,3,4} \ )$:

$$^{2}(,) = \begin{bmatrix} 2 [\frac{}{(1+)} 1 \ ^{2} - \ _{2}] 1 2 & - \ _{3} 1 4 & + [\frac{2}{(2+)} \ ^{3} - \frac{2 \ _{11}}{(1+)} 3] \ ^{2} \\ -2 \ _{4} 1 2 & -2 \ _{2} 1 1 2 & + 2 \ _{5} 3 4 \\ - \ _{6} 2 3 & - 2 \ _{2} 2 2 3 & - 2 \ _{7} 3 4 \\ [\ 0 & &] \end{bmatrix},$$

El siguiente teorema determina el TB del modelo PPIGCNE cerca de 3 .

Teorema 4. Se cumplen , el modelo PPIGCNE, en 3 tiene una bifurcación transcrítica si se cumple lo siguiente: las condiciones para = ing

$$\begin{gathered} \ _{4} \ ^{2} = \ _{11} \\ \ _{1}^{[1]} \neq \frac{ \ _{11}}{ \ _{4}} \\ ( ) [2 \quad (\ _{3,} \quad)(, \quad)] \neq 0\}. \end{gathered} \tag{21}$$

Prueba del teorema 4. El modelo PPIGCNE, at tiene un valor 3 propio cero, digamos 31 donde en = , se puede calcular usando la siguiente ecuación:

$$\begin{aligned} {}^{31.32} = (\ _{1} 1 + \frac{}{} \ ^{-} \ _{2} \ ^{-} \ _{3} & - 2 \ _{11} \ ^{-} \ _{4} \ ^{-} \ _{2} +) \\ & - \frac{ \ _{4}}{(1 + \quad)^{2}} + \frac{ \ _{1} \ _{1} \ _{4}}{(1 + \quad)^{2}} + \ _{24} \quad = 0. \end{aligned}$$

Aquí, $^{31.32}$ está dada en la estabilidad local de 3 . La matriz jacobiana $(\ _{3}) = (\ _{3} , \quad)$, se convierte en:

$$(\ _{3}) = \begin{bmatrix} \ _{11} & \frac{-}{(1+ \ )^{2} (1+ \ )^{2}} + \frac{ \ _{11}}{ \ )^{2}} \ ^{-} \ _{2} & 0 & - \ _{3} \\ - \ _{4} & 22 & \ _{5} & 0 \\ 0 & 0 & 2 - \ _{6} \ ^{-} \ _{7} & 0 \\ [\ 0 & 0 & 0 & - \ _{3}] \end{bmatrix},$$

dónde $_{11} = \frac{1}{1+} - \ _{2} \ ^{-} \ _{3} - (\quad + \ 1)$ y $_{22} = \ -21 \ _{11} \ ^{-} \ _{4} + 2 \ ^{-}$. Ahora, deja = ($1^{[1]}, \ _{2}^{[1]}, \ _{3}^{[1]}, 4$ [1]) y = ($1^{[1]}, \ _{2}^{[1]}, \ _{3}^{[1]}$, [1]) representan los vectores propios correspondiente al valor propio cero de $(\ _{3})$ y $(\ _{3})$, respectivamente. Computación directa estación da = ($1 - 2 \ 1 \frac{ \ ^{-} \ _{4} \ ^{+} \ 2 -}{ \ _{4}}$, 1,0,0) y = (1, $11 \ \frac{ \ ^{-} \ _{5}}{ \ _{4}} \ ' \frac{11}{(2 - \ _{6} \ ^{-} \ _{7}) 4} \ ' \frac{ \ ^{-} \ _{3}}{ \ _{3}}$), dónde $_{2} - \ _{6} \ ^{-} \ _{7} \neq 0$. Entonces,

Machine Translated by Google

$$= (,) = (1 \quad , \frac{2}{}, \frac{3}{}, \frac{}{4}) = (- , \quad , 0,0).$$

Entonces, (3,) = (− , , 0,0) y por tanto,

$$( ) \quad (3,) = (1, 11 \cdot \frac{-5 \quad 11}{(2- \quad 6 \quad -7 \quad)4} \cdot \frac{-3}{3}) (- \quad , \quad , 0,0) = - \quad + 11 \frac{}{4}.$$

$$( ) [\quad (3,)] = (1, 11 \frac{}{4} \cdot \frac{-5 \quad 11}{(2- \quad 6 \quad -7 \quad)4} \cdot \frac{-3}{3}) (- \quad {}^{[1]}_{1}, 1,0,0) = - \quad {}^{[1]}_{1} + \frac{11}{4}.$$

$$( ) [2 \quad (3,)](,) = 2 (1 \quad [3] (\frac{}{(1+1 \quad)2} - 2) - \quad {}^{[3]}_{(2} \quad 4 + \quad 1 1)) + (2 \quad \frac{2}{(1+ \quad)3} - \frac{2}{(1+ \quad)3} \frac{11}{}).$$

Por lo tanto, los requisitos de bifurcación transcrítica se cumplen bajo la condición 21. □

3.5. Simulación numérica y debates

La verificación numérica es esencial para completar estudios analíticos. En esta sección, confirmamos visualmente la precisión de nuestros hallazgos analíticos para el sistema PPIGCNE utilizando el software MATLAB [39–44]. Las simulaciones se realizaron utilizando los valores de los parámetros especificados en la Tabla 1. Los valores de equilibrio correspondientes a los datos proporcionados en la Tabla 1 son = 1,74, = 0,59 y = 0,37. Ver Figura 2. = 0,41,

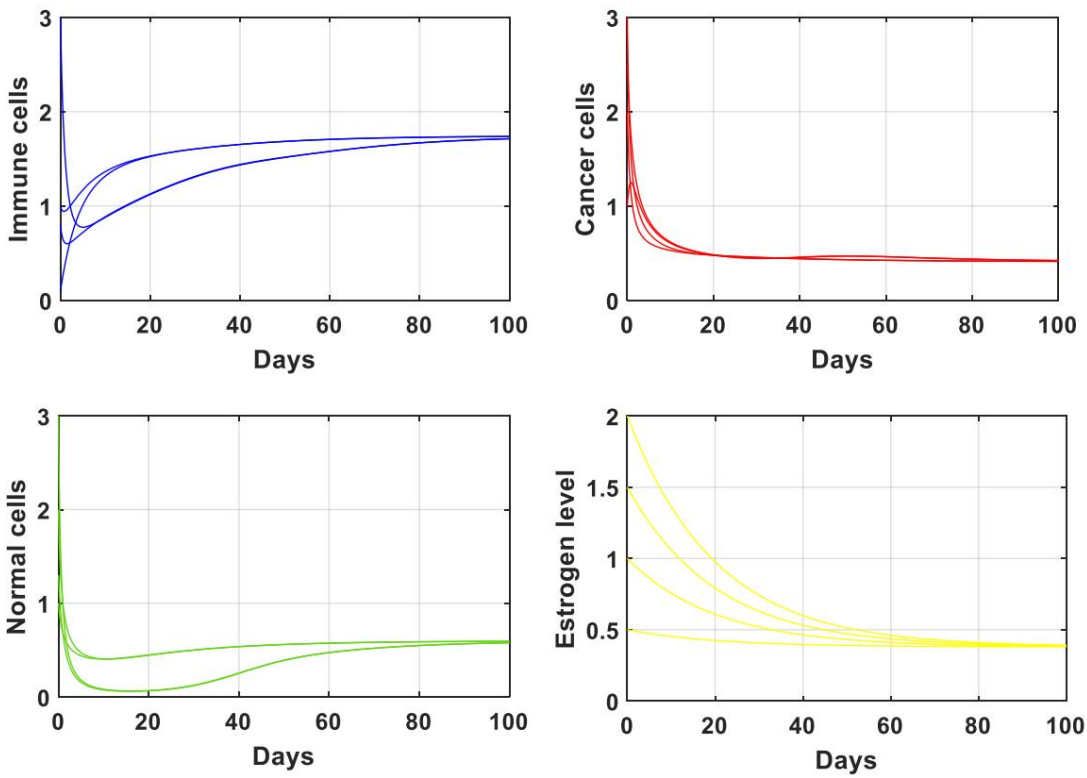


Figura 2. La solución del sistema PPIGCNE con los datos se muestra en la Tabla 1. Las condiciones iniciales de las células inmunitarias, las células de cáncer de mama, las células normales y el nivel de estrógeno son (0) = 0,25, 0,75,1,3,2,7 (células/ng), (0) = 0,8,1,4,1,6,2,4(células/ng), (0) = 0,94, 0,84 (células/ng), 0,74,1,4, y (0) = 0,5, 1,1,5, 2 ng/ml.

Ahora examinaremos tres escenarios para comprender el comportamiento dinámico del modelo PPIGCNE y evaluar el impacto del susto psicológico, los altos niveles de estrógeno y los altos niveles de glucosa en la progresión del tumor. Luego se compararán los resultados de los tres casos. Los siguientes tres casos son:

Machine Translated by Google

(a) El efecto del pánico psicológico

El objetivo de este caso es demostrar el impacto de los niveles de miedo psicológico en la interacción entre las células inmunes y las células del cáncer de mama. La Figura 3 explica el desempeño del modelo PPIGCNE con varios valores de la tasa de pánico psicológico por cáncer, es decir, . Se ha descubierto que el pánico psicológico tiene un impacto negativo en la eficiencia del sistema inmunológico. El aumento del estrés conduce a una disminución significativa de las células inmunes. Como resultado, las células tumorales crecen más rápido. A pesar de la notable disminución de la eficacia del sistema inmunológico, el modelo PPIGCNE, a pesar del exceso de niveles de miedo psicológico, no alcanzó el caos, pero se acercó asintóticamente al punto de coexistencia 4 . Además, la Figura 4 ilustra el impacto de la angustia psicológica en la funcionalidad de las células inmunes y la tasa de crecimiento y división de las células malignas con una representación más precisa. Para mitigar los riesgos para la salud que enfrentan los pacientes con cáncer de mama, se necesita tratamiento psiquiátrico. Además, se necesitan algunas estrategias externas para mejorar el desempeño del sistema inmunológico.

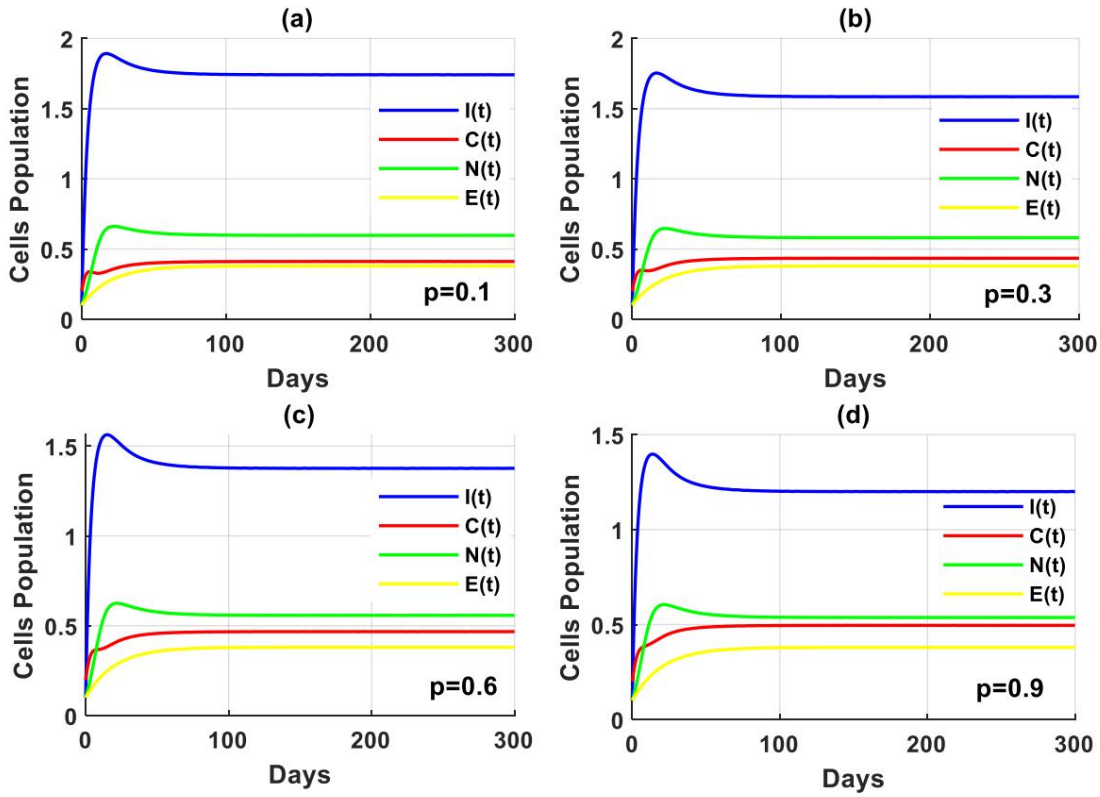


Figura 3. La solución del sistema PPIGCNE con varios valores de tasa de miedo psicológico y las condiciones iniciales de las células inmunes, las células de cáncer de mama, las células normales y el nivel de estrógeno son (0) = 0,25 (células/ng), (0) = 0,3 (células/ng), (0) = 0,3 (células/ng) y (0) = 0,12 ng/ml.

Machine Translated by Google

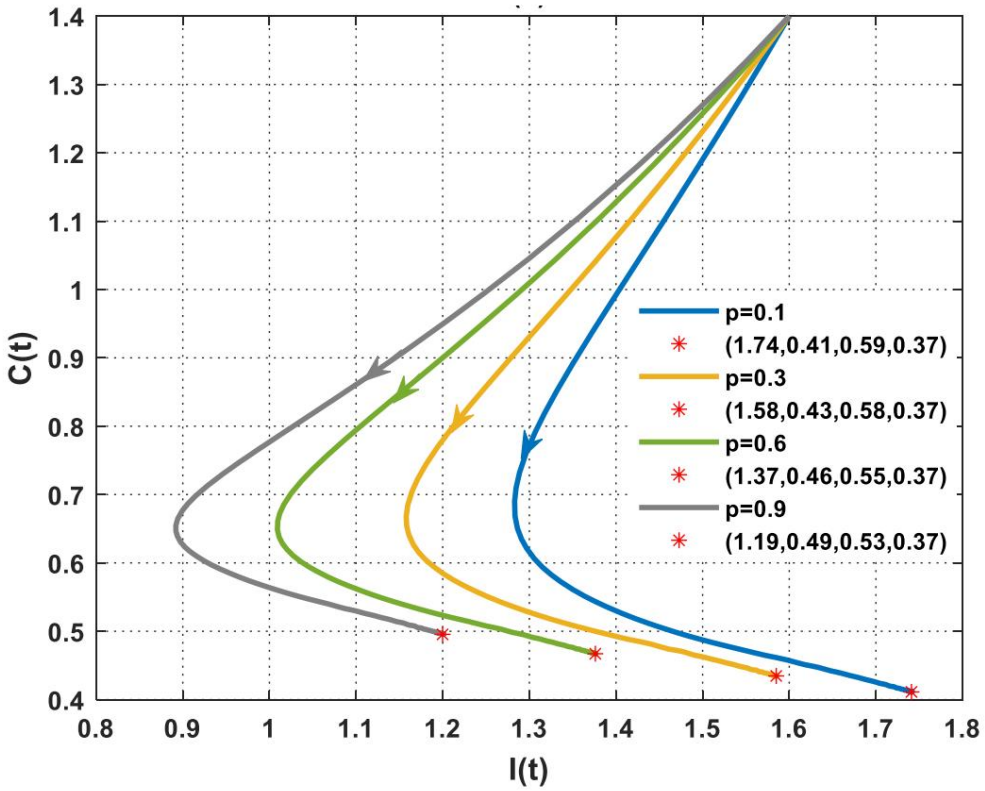


Figura 4. La dinámica de las células inmunes y cancerosas con diversos valores y las condiciones iniciales de las células inmunes, las células de cáncer de mama, las células normales y el nivel de estrógeno son (0) = 1,6 (células/ng), (0) = 1,4 (células/ng), (0) = 0,8 (células/ng) y (0) = 0,8 ng/ml. ( ) representa el estado final de la solución y el número entre paréntesis denota el punto de equilibrio con diferentes valores de .

(b) El impacto del exceso de glucosa

En ausencia de células tumorales, se observó que el impacto del exceso de glucosa perjudica la funcionalidad del sistema inmunológico (Figura 5). Además, la solución del sistema PPIGCNE, para varios valores de , inicialmente experimenta un crecimiento antes de converger asintóticamente al punto de cáncer libre 2 . Además, hubo una caída significativa de las células inmunes en presencia de células tumorales, como se ilustra en la Figura 6. Además, la solución del sistema PPIGCNE, como consecuencia del exceso de glucosa, cae hacia las células mamarias-= (, , 0,) = (0.51, 1.24, 0, 0.37) para ≥ del Teorema 4 que establece 046 el punto de equilibrio libre 3 confirma el resultado . este resultado que el sistema PPIGCNE enfrenta una bifurcación transcrítica en el parámetro de glucosa = 0.46 (por favor ver Figura 6). Lo anterior finalmente resulta en la muerte de la paciente o en una mastectomía. Con base en los hallazgos, se puede inferir que existe una correlación directa entre los niveles elevados de glucosa y la proliferación y tasa de división de las células cancerosas. Por el contrario, se puede observar una relación inversa entre el aumento de los niveles de glucosa y la respuesta del sistema inmunológico para combatir las células malignas. Consulte la Figura 7 para tener una mejor idea de lo que sucede cuando los niveles de glucosa son altos, tanto cuando no hay células cancerosas como cuando las hay.

Machine Translated by Google

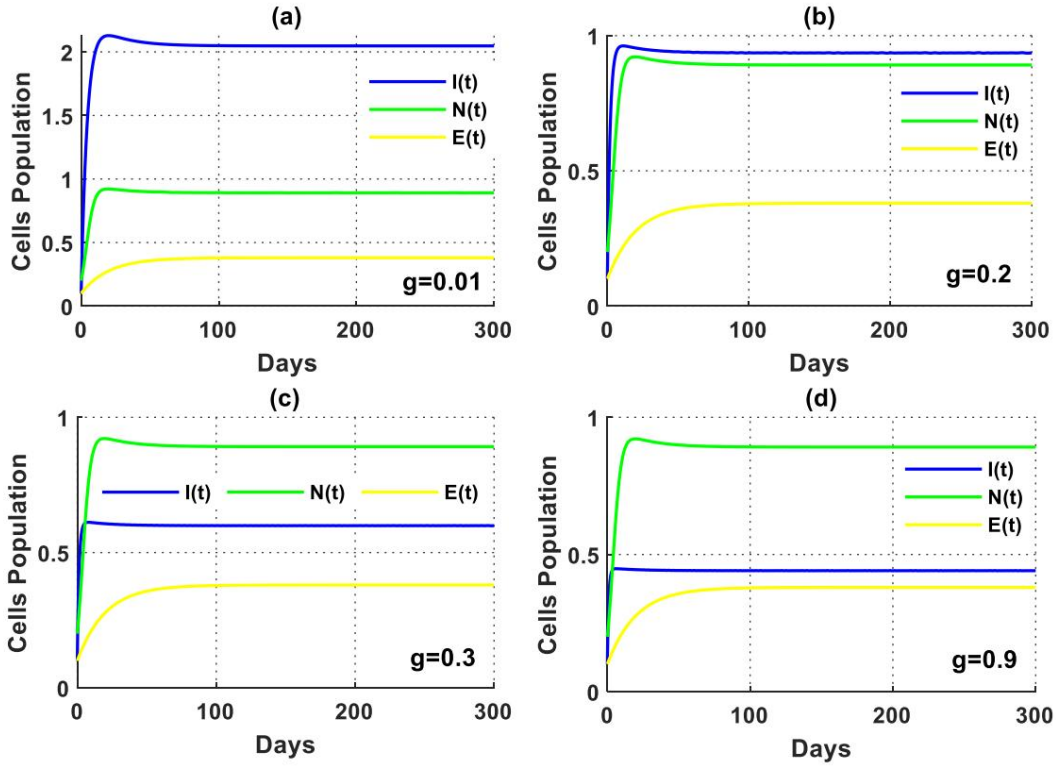


Figura 5. La solución del sistema PPIGCNE en ausencia de células tumorales con diversos valores y las condiciones iniciales de las células inmunes, las células de cáncer de mama, las células normales y el nivel de estrógeno son (0) = 0,25 (células/ng), (0) = 0,3 (células/ng) y (0) = 0,12 ng/ml.

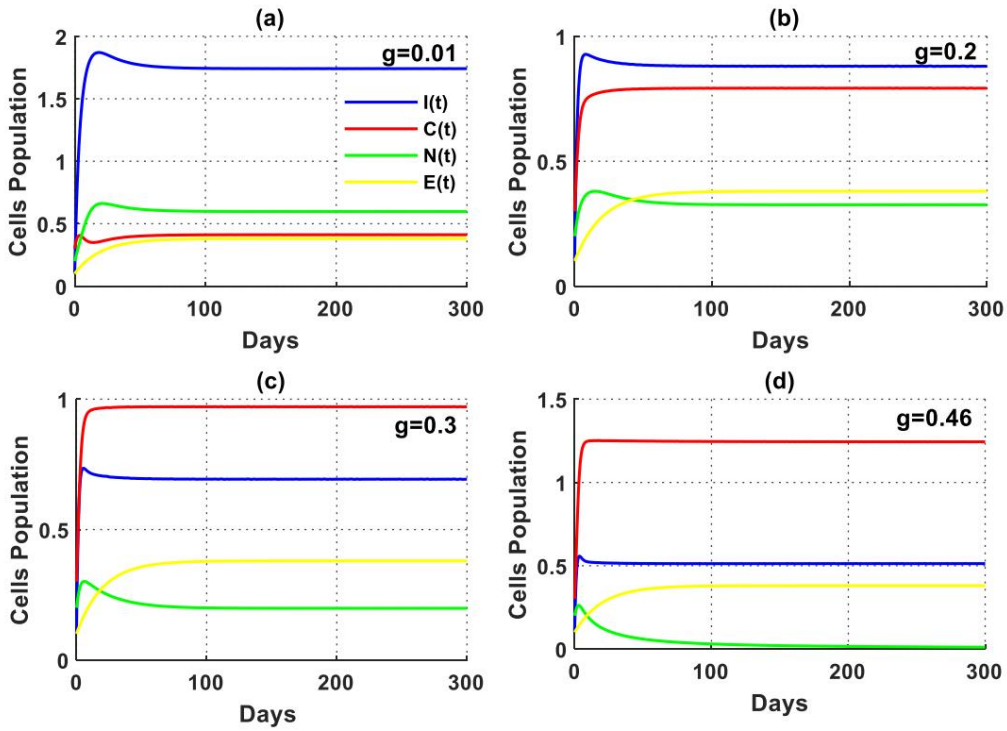
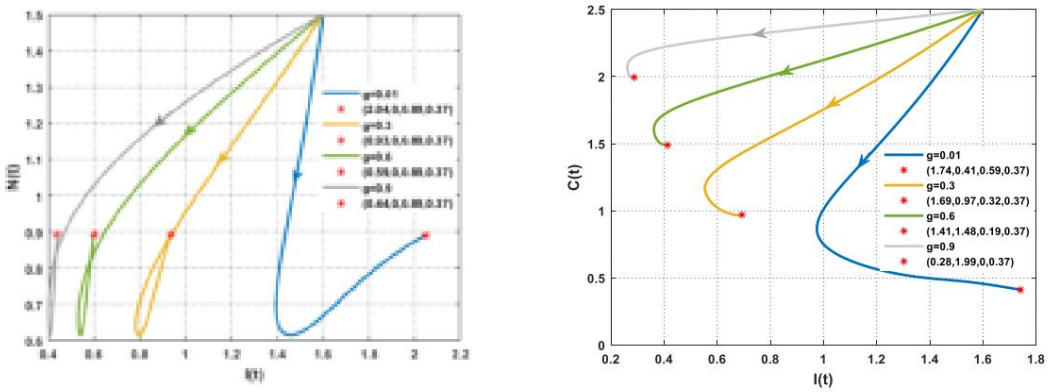


Figura 6. La solución del sistema PPIGCNE con varios valores y las condiciones iniciales de las células inmunes, las células de cáncer de mama, las células normales y el nivel de estrógeno son (0) = 0,25 (células/ng), (0) = 0,3 (células/ng), (0) = 0,3 (células/ng) y (0) = 0,12 ng/ml.

Machine Translated by Google



(a) (b)

Figura 7. El rendimiento del sistema PPIGCNE con varios valores de. (a) La dinámica de las células inmunes y normales en ausencia de células tumorales con diversos valores de y las condiciones iniciales son (0) = 1,6 (células/ng), (0) = 1,4 (células/ng), (0) = 1,5 (células/ng) y (0) = 0,8 ng/ml. (b) La dinámica de las células inmunes y cancerosas con diversos valores y las condiciones iniciales son (0) = 1,6 (células/ng), (0) = 2,4 (células/ng), (0) = 1,5 (células/ng) y (0) = 0,8 ng/ml.

(c) El impacto del exceso de estrógenos

En este escenario, la simulación se realiza variando los valores de la tasa de mayor producción de estrógenos tanto en ausencia como en presencia de células tumorales. En ausencia de células tumorales, la solución del sistema PPIGCNE se acerca asintóticamente al punto de equilibrio libre del tumor 3. con varios valores (ver Figura 8). Mientras que en presencia de células tumorales, la solución del sistema PPIGCNE converge al punto coexistente 4 cuando < 0,12. Para ≥ 0,12, la solución del sistema PPIGCNE se establece = (, , 0, asintóticamente al punto de equilibrio libre de células mamarias (1,01, 0,41, 0, 3) = 2,59). Consulte la Figura 9. Las soluciones numéricas generalmente mostraron que en presencia de exceso de estrógeno, las células inmunes y las células normales disminuyen, siendo las células normales las más afectadas (ver Figura 10a), mientras que las células tumorales crecen (ver Figura 10b).

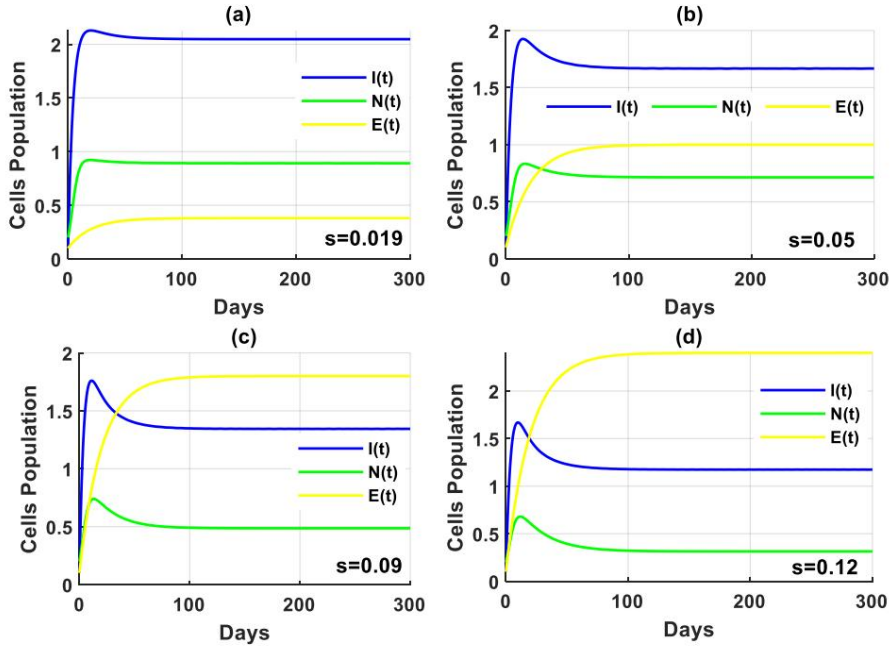


Figura 8. La solución del sistema PPIGCNE en ausencia de células tumorales con diversos valores y las condiciones iniciales de las células inmunes, las células de cáncer de mama, las células normales y el nivel de estrógeno son (0) = 0,25 (células/ng), (0) = 0,3 (células/ng) y (0) = 0,12 ng/ml.

Machine Translated by Google

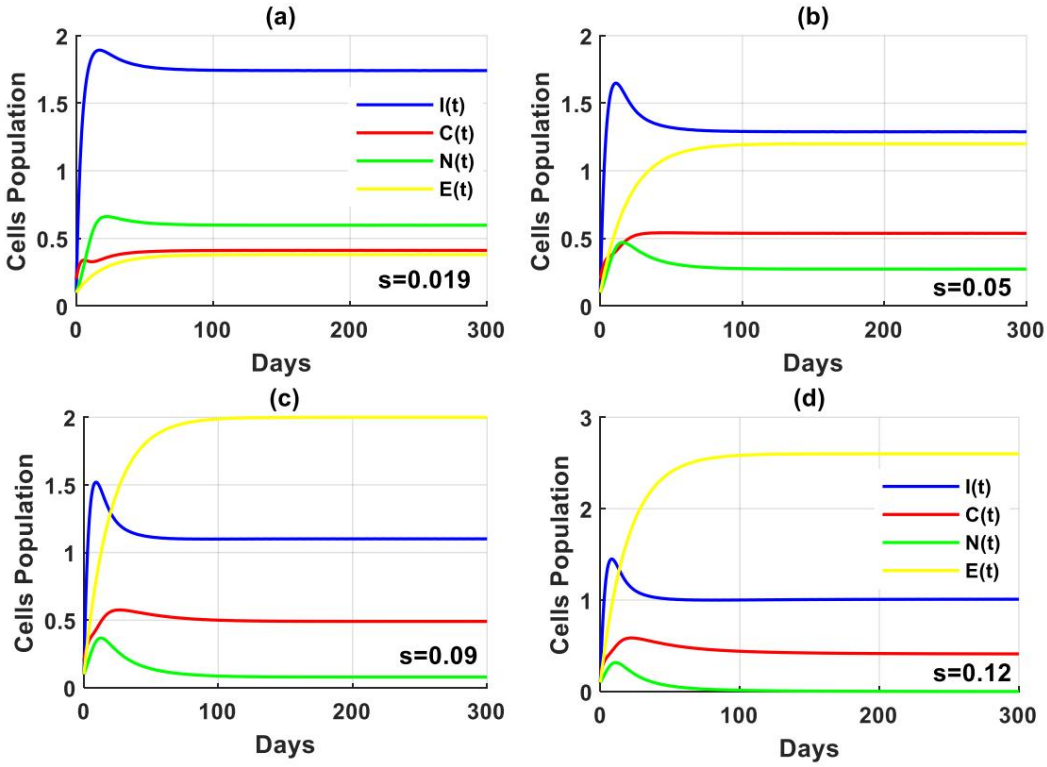
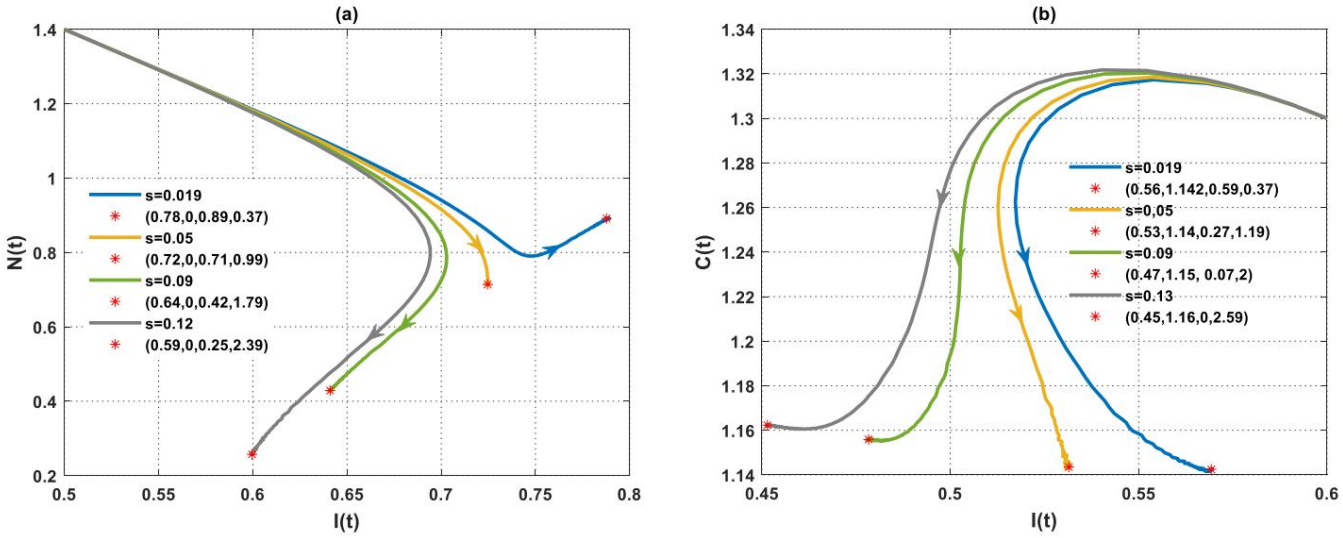


Figura 9. La solución del sistema PPIGCNE con varios valores y las condiciones iniciales de las células inmunes, las células de cáncer de mama, las células normales y el nivel de estrógeno son (0) = 0,25 (células/ng), (0) = 0,3 (células/ng), (0) = 0,3 (células/ng) y (0) = 0,12 ng/ml.



(a) (b)

Figura 10. El rendimiento del sistema PPIGCNE con varios valores de. (a) La dinámica de las células inmunes y normales en ausencia de células tumorales con diversos valores de y las condiciones iniciales son (0) = 0,5 (células/ng), (0) = 1,4 (células/ng), (0) = 1,4 (células/ng) y (0) = 0,8 ng/ml. (b) La dinámica de las células inmunes y cancerosas con varios valores de y las condiciones iniciales son (0) = 0,6 (células/ng), (0) = 1,3 (células/ng), (0) = 1,4 (células /ng), y (0) = 0,8 ng/ml.

Machine Translated by Google

Observación 1. La interpretación biológica de los valores iniciales que son menores que uno en un sistema canceroso que se han utilizado en las Figuras 2 a 10 se refieren a un parámetro asociado con el desarrollo o la propagación de las células cancerosas, como la tasa de proliferación o el factor de crecimiento. en un modelo matemático. Si este valor inicial es menor que uno, la división celular es más lenta que la muerte de las células cancerosas. Esto puede implicar un cáncer menos agresivo inicialmente (y viceversa si el valor inicial es mayor que uno). La misma interpretación es para el resto de variables.

4. Conclusiones

La dinámica del cáncer de mama en presencia de miedo psicológico, exceso de glucosa y exceso de estrógeno se ha presentado en forma de un sistema de ecuaciones diferenciales.
Se estableció la positividad y la delimitación del sistema propuesto. Se ilustraron las condiciones de existencia y la estabilidad local de los posibles equilibrios. Se ha estudiado la estabilidad global alrededor del punto de equilibrio libre del cáncer de mama. Se ha determinado el umbral necesario de nivel de glucosa para alcanzar un estado de salud. En términos matemáticos, este umbral equivale a una bifurcación transcrítica. Las simulaciones numéricas validaron los hallazgos analíticos. Precisamente, se calculó el valor umbral para la bifurcación transcrítica, que indica el punto en el que las células normales (células mamarias) pasan de persistir a erradicarse. El desarrollo del cáncer de mama en un individuo depende de la capacidad del sistema inmunológico para luchar contra las células tumorales. Se ha determinado que la abundancia de estrógeno y glucosa en el cuerpo provoca inestabilidad. Esto sugiere que un aumento en la cantidad de estrógeno y glucosa conduce a una mayor tasa de crecimiento tumoral, contribuyendo así al desarrollo del cáncer de mama. Se puede inferir que los niveles no regulados de estrógeno y glucosa pueden dar como resultado un sistema inmunológico que no puede combatir eficazmente las células cancerosas, lo que lleva a un fracaso en el control de la enfermedad. Los resultados de esta investigación podrían potencialmente dar como resultado el desarrollo de un protocolo óptimo para la terapia del cáncer, lo que sería de gran ayuda para los oncólogos en su práctica.

Nuestra próxima investigación se centrará en aumentar el sistema inmunológico mediante la ingesta regular de vitaminas.

Contribuciones de los autores: Conceptualización, ZA; Curación de datos, SJ; Análisis formal, SJ; Adquisición de financiación, AAL; Investigación, ZA y BB; Metodología, ZA y SJ; Administración de proyectos, AHA; Recursos, BB y AAL; Software, AHA; Supervisión, FG; Validación, BB y FG; Visualización, AHA; Redacción: borrador original, ZA y SJ; Redacción: revisión y edición, AHA, FG y AAL Todos los autores han leído y aceptado la versión publicada del manuscrito.

Financiamiento: La publicación de esta investigación fue apoyada por la Universidad de Oradea.

Declaración de la Junta de Revisión Institucional: No aplicable.

Declaración de Consentimiento Informado: No aplicable.

Declaración de disponibilidad de datos: los datos están contenidos en el artículo.

Conflictos de intereses: Los autores declaran no tener conflictos de intereses.

Referencias

1. Abernathy, K.; Abernathy, Z.; Baxter, A.; Stevens, M. Dinámica global de un modelo de competencia de cáncer de mama. Diferir de. Ecuación. Din. Sistema. 2020, 28, 791–805.
2. Organización Mundial de la Salud. Plan de Acción Mundial para la Prevención y el Control de Enfermedades No Transmisibles 2013-2020; Mundo Organización de la Salud: Ginebra, Suiza, 2013.
3. Tarver, T. Sociedad americana del cáncer. Datos y cifras sobre el cáncer 2014. J. Consum. Internet de la salud 2012, 16, 366–367. 4. Patel, M.; Nagl, S. El papel de la integración de modelos en el modelado de sistemas complejos: un ejemplo de la biología del cáncer; Springer: Berlín/ Heidelberg, Alemania, 2010; ISBN 3642156037.
5. Dehingia, K.; Yao, S.-W.; Sadri, K.; Das, A.; Sarmah, HK; Zeb, A.; Inc, M. Un estudio sobre el modelo de tratamiento del cáncer y la obesidad con enfoque de control óptimo cuadrático para obtener mejores resultados. Resultados Fís. 2022, 42, 105963.
6. Alnahdi, AS; Idrees, M. Dinámica no lineal del cáncer de mama con receptor de estrógeno positivo que integra datos experimentales: una novela enfoque de modelado espacial. Matemáticas. Biosci. Ing. 2023, 20, 21163–21186.
7. Miziak, P.; Barán, M.; Błaszczak, E.; Przybyszewska-Podstawka, A.; Kałafut, J.; Smok-Kalwat, J.; Dmoszyńska-Graniczka, M.; Kiełbus, M.; Stepulak, A. Señalización del receptor de estrógeno en el cáncer de mama. Cánceres 2023, 15, 4689.

Machine Translated by Google

8. Mufudza, C.; Sorofa, W.; Chiyaka, ET Evaluación de los efectos del estrógeno en la dinámica del cáncer de mama. Computadora. Matemáticas. Métodos Medicina. 2012, 2012, 473572.
9. Almeida, L.; Denis, JA; Ferrán, N.; Lorenzi, T.; Prunet, A.; Sabbah, M.; Villa, C. Dinámica evolutiva de las células cancerosas privadas de glucosa: conocimientos a partir de modelos matemáticos informados experimentalmente. JR Soc. Interfaz 2024, 21, 20230587.
10. Barbosa, AM; Martel, F. Dirigirse a los transportadores de glucosa para la terapia del cáncer de mama: el efecto de lo natural y lo sintético compuestos. Cánceres 2020, 12, 154.
11. Sol, S.; Sol, Y.; Rong, X.; Bai, L. La glucosa alta promueve la proliferación y metástasis del cáncer de mama al alterar el angiotensinógeno expresión. Biosci. Rep. 2019, 39, BSR20190436.
12. Shomali, N.; Mahmoudi, J.; Mahmoodpoor, A.; Zamiri, RE; Akbari, M.; Xu, H.; Shotorbani, SS Efectos nocivos de altas cantidades de glucosa en el sistema inmunológico: una revisión actualizada. Biotecnología. Aplica. Bioquímica. 2021, 68, 404–410.
13. Alblowy, AH; Maan, N.; Alharbi, SA Papel de los factores de riesgo de glucosa en el cáncer de mama humano: evaluación de un modelo dinámico no lineal. Matemáticas 2022, 10, 3640.
14. Thirtar, AA; Abboubakar, H.; Khan, A.; Abdeljawad, T. Modelado matemático de la epidemia de COVID-19 con impacto del miedo. OBJETIVOS Matemáticas. 2023, 8, 6447–6465.
15. Doshi, D.; Karunakar, P.; Sukhabogi, JR; Prasanna, JS; Mahajan, SV Evaluación del miedo al coronavirus en la población india utilizando El miedo a la escala del COVID-19. Int. J.ment. Adicto a la salud. 2021, 19, 2383–2391.
16. Vrinten, C.; McGregor, LM; Heinrich, M.; von Wagner, C.; Waller, J.; Wardle, J.; Black, GB ¿Qué teme la gente sobre el cáncer? Una revisión sistemática y metasíntesis de los temores al cáncer en la población general. Psicooncología 2017, 26, 1070–1079.
17. Niknamian, S. El impacto del estrés, la ansiedad, el miedo y la depresión en la causa del cáncer en humanos. Soy. J. Biomed. Ciencia. Res. 2019, 3, 363–370.
18. Gormley, M.; Knobf, MT; Vorderstrasse, A.; Aouizerat, B.; Martillo, M.; Fletcher, J.; D'Eramo Melkus, G. Explorando los efectos de las pruebas genómicas sobre el miedo a la recurrencia del cáncer entre los sobrevivientes de cáncer de mama. Psicooncología 2021, 30, 1322–1331.
19. Lebel, S.; Tomei, C.; Feldstain, A.; Beattie, S.; McCallum, M. ¿El miedo a la recurrencia del cáncer predice la atención médica de los sobrevivientes de cáncer? ¿usar? Apoyo. Care Cancer 2013, 21, 901–906.
20. Von Ah Morano, AE; Dorneles, médico de cabecera; Peres, A.; Lira, FS El papel de la homeostasis de la glucosa en la función inmune en respuesta al ejercicio: el impacto de condiciones energéticas bajas o altas. J. Fisiol celular. 2020, 235, 3169–3188.
21. Jawad, S.; Invierno, M.; Rahman, Z.-ASA; Al-Yasir, YIA; Zeb, A. Comportamiento dinámico de un modelo de crecimiento del cáncer con Quimioterapia y refuerzo del sistema inmunológico. Matemáticas 2023, 11, 406.
22. Tang, T.-Q.; Shah, Z.; Bonyah, E.; Enero, R.; Shutaywi, M.; Alreshidi, N. Modelado y análisis del cáncer de mama con reacciones adversas al tratamiento de quimioterapia mediante derivados fraccionados. Computadora. Matemáticas. Métodos Med. 2022, 2022, 5636844.
23. Alharbí, SA; Rambely, COMO un nuevo modelo basado en ODE para la competencia de células tumorales y sistemas inmunológicos. Matemáticas 2020, 8, 1285.
24. Wang, X.; Zanette, L.; Zou, X. Modelado del efecto del miedo en las interacciones depredador-presa. J. Matemáticas. Biol. 2016, 73, 1179–1204.
25. Kuznetsov, VA; Makalkin, IA; Taylor, MA; Perelson, AS Dinámica no lineal de tumores inmunogénicos: parámetro estimación y análisis de bifurcación global. Toro. Matemáticas. Biol. 1994, 56, 295–321.
26. De Pillis, LG; Radunskaya, A. Un modelo matemático de tumor con resistencia inmune y terapia con medicamentos: un enfoque de control óptimo. Computadora. Matemáticas. Métodos Med. 2001, 3, 79-100.
27. Gatenby, RA El papel potencial de los cambios metabólicos inducidos por la transformación en la interacción tumor-huésped. Res. Cáncer. 1995, 55, 4151–4156.
28. Abdulkream Alharbi, S.; Dehingia, K.; Jahman Alqarni, A.; Alsulami, M.; Al Qarni, AA; Das, A.; Hinçal, E. Un estudio sobre ODE- Modelo basado en riesgo de cáncer de mama con masa corporal. Aplica. Matemáticas. Ciencia. Ing. 2023, 31, 2259059.
29. Ouifki, R.; Oke, SI Modelo matemático de la paradoja del estrógeno en el tratamiento del cáncer de mama. J. Matemáticas. Biol. 2022, 84, 28.
30. Das, A.; Dehingia, K.; Rayo, N.; Sarmah, HK Análisis de estabilidad de un modelo de quimioterapia dirigida contra cáncer. Matemáticas. Modelo. Control 2023, 3, 116–126.
31. Sahoo, B.; Poria, S. Modelo de depredador presa enfermo con interacciones generales de tipo Holling. Aplica. Matemáticas. Computadora. 2014, 226, 83–100.
32. Hubbard, JH; West, BH Ecuaciones diferenciales: un enfoque de sistemas dinámicos: ecuaciones diferenciales ordinarias; Saltador: Berlín/Heidelberg, Alemania, 2013; Volumen 5.
33. Alebraheem, J.; Ibrahim, TQ; Arif, GE; Hamdi, AA; Bazighifan, O.; Ali, AH El efecto estabilizador de la inmigración de presas pequeñas sobre la dinámica competitiva depredador-presa. Matemáticas. Computadora. Modelo. Din. Sistema. 2024, 30, 605–625.
34. Ahmed, M.; Jawad, S. Análisis de bifurcación del papel de las bacterias buenas y malas en la descomposición de toxinas en el intestino con el impacto de los suplementos de antibióticos y probióticos. En Actas de la Conferencia AIP; Publicación AIP: Melville, Nueva York, EE. UU., 2024; Volumen 3097.
35. Bassim, WB; Salem, AJ; Ali, AH Un nuevo estudio analítico de los sistemas dinámicos presa-depredador que involucran los efectos de Hide- y-Aumento de habilidades de escape y depredación. Optim. control de resultados. 2024, 16, 100449.
36. Thirtar, AA; Jawad, S.; Majeed, SJ; Nisar, KS Impacto del flujo de viento y el calentamiento global en la dinámica presa-depredador modelo. Optim. control de resultados. 2024, 15, 100424.
37. Jawad, SR; Al Nuaimi, M. Análisis de persistencia y bifurcación entre cuatro interacciones de especies con la influencia de competencia, depredación y recolección. J. iraquí Sci. 2023, 64, 1369–1390.
38. Hassan, SK; Jawad, SR El efecto de la interacción mutua y la cosecha en el modelo de la cadena alimentaria. J. iraquí Sci. 2022, 63, 2641–2649.

Machine Translated by Google

39. Thirtar, AA; Jawad, S.; Shah, K.; Abdeljawad, T. ¿Cómo afecta la cobertura de los medios a un modelo pandémico de COVID-19 con directo?
y transmisión indirecta? J. Matemáticas. Computadora. Ciencia. 2024, 35, 169–181.
40. Ali, A.; Jawad, S. Análisis de estabilidad del agotamiento de oxígeno disuelto para el modelo Fitoplancton-Zooplancton en un entorno acuático.
ambiente. J. iraquí Sci. 2024, 65, 2736–2748.
41. Mondal, B.; Thirtar, AA; Sk, N.; Alqudah, MA; Abdeljawad, T. Dinámica compleja en un sistema de dos especies con Crowley–
Función de respuesta de Martin: papel de la cooperación, alimentos adicionales y perturbaciones estacionales. Matemáticas. Computadora. Simultáneo. 2024, 221, 415–
434.
42. Pakhira, R.; Mondal, B.; Thirtar, AA; Alqudah, MA; Abdeljawad, T. Desarrollo de un costo de emisión de carbono basado en lógica difusa
incorporó modelo de inventario con efectos de memoria. Ain Shams Ing. J. 2024, 15, 102746.
43. Thirthar, AA Un modelado matemático de una comunidad de plantas herbívoras con efectos adicionales de los alimentos en el medio ambiente.
J. iraquí Sci. 2023, 64, 3551–3566.
44. Sk, N.; Mondal, B.; Thirtar, AA; Alqudah, MA; Abdeljawad, T. Bestabilidad y triestabilidad en un modelo determinista presa-depredador: transiciones y patrones emergentes
en su contraparte estocástica. Fractales de Solitones del Caos 2023, 176, 114073.

Descargo de responsabilidad/Nota del editor: Las declaraciones, opiniones y datos contenidos en todas las publicaciones son únicamente de los autores y contribuyentes individuales y no de MDPI ni de los editores. MDPI y/o los editores renuncian a toda responsabilidad por cualquier daño a personas o propiedad que resulte de cualquier idea, método, instrucción o producto mencionado en el contenido.