

ISSN 2520-6141



ТРУДЫ БГТУ

Научный журнал



Серия 3

**ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ
НАУКИ И ИНФОРМАТИКА**

№ 1 (254) 2022 год

Рубрики номера:

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ

Математика

Механика

Физика

ИНФОРМАТИКА И ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ

Моделирование процессов

и управление в технических системах

Алгоритмизация и программирование



Минск 2022

Учреждение образования
«Белорусский государственный
технологический университет»

ТРУДЫ БГТУ

Научный журнал

Издается с июля 1993 года

Серия 3

**ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ
НАУКИ И ИНФОРМАТИКА**

№ 1 (254) 2022 год

Выходит два раза в год

Минск 2022

Учредитель – учреждение образования «Белорусский государственный технологический университет»

Главный редактор журнала – Войтов Игорь Витальевич, доктор технических наук, профессор, Республика Беларусь

Редакционная коллегия журнала:

Шетько С. В., кандидат технических наук, доцент (заместитель главного редактора), Республика Беларусь;
Жарский И. М., кандидат химических наук, профессор (заместитель главного редактора), Республика Беларусь;
Черная Н. В., доктор технических наук, профессор, Республика Беларусь;
Прокопчук Н. Р., член-корреспондент НАН Беларуси, доктор химических наук, профессор, Республика Беларусь;
Водошнянов П. А., член-корреспондент НАН Беларуси, доктор философских наук, профессор, Республика Беларусь;
Новикова И. В., доктор экономических наук, профессор, Республика Беларусь;
Наркевич И. И., доктор физико-математических наук, профессор, Республика Беларусь;
Куликович В. И., кандидат филологических наук, доцент, Республика Беларусь;
Торчик В. И., доктор биологических наук, Республика Беларусь;
Барчик Стэфан, доктор наук, профессор, Словацкая Республика;
Жантасов К. Т., доктор технических наук, профессор, Республика Казахстан;
Харша Ратнавира, доктор наук, профессор, Королевство Норвегия;
Пайвинен Ристо, доктор наук, профессор, Финляндская Республика;
Шкляр Б. Ш., профессор, Государство Израиль;
Кох Барбара, доктор наук, профессор, Федеративная Республика Германия;
Лакида П. И., доктор сельскохозяйственных наук, профессор, Украина;
Головко М. Ф., член-корреспондент НАН Украины, доктор физико-математических наук, профессор, Украина;
Бир Петр, доктор технических наук, профессор, Республика Польша;
Савельев А. Г., кандидат технических наук, профессор, Латвийская Республика;
Агриракис Панос, доктор наук, Греческая Республика;
Горинштейн Ш., доктор наук, профессор, Государство Израиль;
Эркаев А. У., доктор технических наук, профессор, Республика Узбекистан;
Башкиров В. Н., доктор технических наук, профессор, Российская Федерация;
Каклаускас А., доктор экономических наук, профессор, Литовская Республика;
Каухова И. Е., доктор фармацевтических наук, профессор, Российская Федерация;
Хассель Л. Г., доктор наук, профессор, Королевство Швеция;
Флюрик Е. А., кандидат биологических наук, доцент (секретарь), Республика Беларусь.

Редакционная коллегия серии:

Наркевич И. И., доктор физико-математических наук, профессор (главный редактор серии), Республика Беларусь;
Урбанович П. П., доктор технических наук, профессор (заместитель главного редактора серии), Республика Беларусь;
Карпович Д. С., кандидат технических наук, доцент, Республика Беларусь;
Романенко Д. М., кандидат технических наук, доцент, Республика Беларусь;
Пацей Н. В., кандидат технических наук, доцент, Республика Беларусь;
Грода Я. Г., кандидат физико-математических наук, доцент, Республика Беларусь;
Асмыкович И. К., кандидат физико-математических наук, доцент, Республика Беларусь;
Калинин А. И., доктор физико-математических наук, профессор, Республика Беларусь;
Сайко А. П., доктор физико-математических наук, Республика Беларусь;
Квасов Н. Т., доктор физико-математических наук, профессор, Республика Беларусь;
Минченко Л. И., доктор физико-математических наук, профессор, Республика Беларусь;
Леваков А. А., доктор физико-математических наук, профессор, Республика Беларусь;
Мазаник С. А., доктор физико-математических наук, профессор, Республика Беларусь;
Щекин А. К., член-корреспондент, доктор физико-математических наук, профессор, Российская Федерация;
Головко М. Ф., член-корреспондент, доктор физико-математических наук, профессор, Украина;
Бартосевич Збигнев, доктор габилитованный, Республика Польша;
Шкляр Бенцион, профессор, Государство Израиль;
Агриракис Панос, доктор наук, профессор, Греческая Республика;
Орлюкас Антанас Феликас, доктор наук, профессор, Литовская Республика;
Соловьева И. Ф., кандидат физико-математических наук, доцент (ответственный секретарь), Республика Беларусь.

Адрес редакции: ул. Свердлова, 13а, 220006, г. Минск.

Телефоны: главного редактора журнала – (+375 17) 343-94-32;

главного редактора серии – (+375 17) 399-49-60.

E-mail: root@belstu.by, <http://www.belstu.by>

Свидетельство о государственной регистрации средств массовой информации

№ 1329 от 23.04.2010, выданное Министерством информации Республики Беларусь.

Журнал включен в «Перечень научных изданий Республики Беларусь для опубликования результатов диссертационных исследований»

Educational institution
“Belarusian State Technological University”

PROCEEDINGS OF BSTU

Scientific Journal

Published monthly since July 1993

Issue 3

**PHYSICS
AND MATHEMATICS.
INFORMATICS**

No. 1 (254) 2022

Published biannually

Minsk 2022

Publisher – educational institution “Belarusian State Technological University”

Editor-in-chief – Voitau Ihar Vital’evich, DSc (Engineering), Professor, Republic of Belarus

Editorial (Journal):

Shet’ko S. V., PhD (Engineering), Associate Professor (deputy editor-in-chief), Republic of Belarus;
Zharskiy I. M., PhD (Chemistry), Professor (deputy editor-in-chief), Republic of Belarus;
Chernaya N. V., DSc (Engineering), Professor, Republic of Belarus;
Prokopchuk N. R., Corresponding Member of the National Academy of Sciences of Belarus, DSc (Chemistry), Professor, Republic of Belarus;
Vodop’yanov P. A., Corresponding Member of the National Academy of Sciences of Belarus, DSc (Philosophy), Professor, Republic of Belarus;
Novikova I. V., DSc (Economics), Professor, Republic of Belarus;
Narkevich I. I., DSc (Physics and Mathematics), Professor, Republic of Belarus;
Kulikovich V. I., PhD (Philology), Associate Professor, Republic of Belarus;
Torchik V. I., DSc (Biology), Republic of Belarus;
Barcik Štefan, DSc, Professor, Slovak Republic;
Zhantasov K. T., DSc (Engineering), Professor, Republic of Kazakhstan;
Harsha Ratnaweera, DSc, Professor, Kingdom of Norway;
Paivinen Risto, DSc, Professor, Republic of Finland;
Shklyar B. Sh., Professor, State of Israel;
Koch Barbara, DSc, Professor, Federal Republic of Germany;
Lakida P. I., DSc (Agriculture), Professor, Ukraine;
Golovko M. F., Corresponding Member of the National Academy of Sciences of Ukraine, DSc (Physics and Mathematics), Professor, Ukraine;
Beer Piotr, DSc (Engineering), Professor, Republic of Poland;
Savel’ev A. G., PhD (Engineering), Professor, Republic of Latvia;
Agryrakis Panos, DSc, Republic of Greece;
Gorinshteyn Sh., DSc, Professor, State of Israel;
Erkayev A. U., DSc (Engineering), Professor, Republic of Uzbekistan;
Bashkirov V. N., DSc (Engineering), Professor, Russian Federation;
Kaklauskas A., DSc (Economics), Professor, Republic of Lithuania;
Kaukhova I. E., DSc (Pharmaceutics), Professor, Russian Federation;
Hassel L. G., DSc, Professor, Kingdom of Sweden;
Flyurik E. A., PhD (Biology), Associate Professor (secretary), Republic of Belarus.

Editorial (Issue):

Narkevich I. I., DSc (Physics and Mathematics), Professor (managing editor), Republic of Belarus;
Urbanovich P. P., DSc (Engineering), Professor, (sub-editor), Republic of Belarus;
Karpovich D. S., PhD (Engineering), Associate Professor, Republic of Belarus;
Romanenko D. M., PhD (Engineering), Associate Professor, Republic of Belarus;
Patsei N. V., PhD (Engineering), Associate Professor, Republic of Belarus;
Groda Ja. G., PhD (Physics and Mathematics), Associate Professor, Republic of Belarus;
Asmykovich I. K., PhD (Physics and Mathematics), Associate Professor, Republic of Belarus;
Kalinin A. I., DSc (Physics and Mathematics), Professor, Republic of Belarus;
Sayko A. P., DSc (Physics and Mathematics), Republic of Belarus;
Kvasov N. T., DSc (Physics and Mathematics), Professor, Republic of Belarus;
Minchenko L. I., DSc (Physics and Mathematics), Professor, Republic of Belarus;
Levakov A. A., DSc (Physics and Mathematics), Professor, Republic of Belarus;
Mazanik S. A., DSc (Physics and Mathematics), Professor, Republic of Belarus;
Shechekin A. K., Corresponding Member, DSc (Physics and Mathematics), Professor, Russian Federation;
Golovko M. F., Corresponding Member, DSc (Physics and Mathematics), Professor, Ukraine;
Bartosevich Zbigniew, DSc, Republic of Poland;
Shklyar Benzion, Professor, State of Israel;
Argyarakis Panos, DSc, Professor, Republic of Greece;
Orlukas Antanas Feliksas, DSc, Professor, Republic of Lithuania;
Solov’yeva I. F., PhD (Physics and Mathematics), Associate Professor (executive editor), Republic of Belarus.

Contact: 13a, Sverdlova str., 220006, Minsk.

Telephones: editor-in-chief (+375 17) 343-94-32;

managing editor (+375 17) 399-49-60.

E-mail: root@belstu.by, <http://www.belstu.by>

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ PHYSICAL AND MATHEMATICAL SCIENCES

МАТЕМАТИКА MATHEMATICS

УДК 514.76

Н. П. Можей

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники

СОВЕРШЕННЫЕ АЛГЕБРЫ ГОЛОНОМИИ ТРИВИАЛЬНЫХ СВЯЗНОСТЕЙ НА ОДНОРОДНЫХ ПРОСТРАНСТВАХ НЕРАЗРЕШИМЫХ ГРУПП ЛИ

Во введении указан объект исследования – алгебры голономии аффинных связностей на однородных пространствах. Определены основные понятия: инвариантная аффинная связность, тензор кручения и тензор кривизны, алгебра голономии. Целью работы является описание совершенных алгебр голономии тривиальных связностей на однородных пространствах. Рассмотрены пространства, на которых действует неразрешимая группа преобразований. В основной части работы приведено локальное описание трехмерных однородных пространств, на которых действует неразрешимая группа преобразований, допускающих только тривиальную аффинную связность с совершенной алгеброй голономии, что эквивалентно описанию соответствующих эффективных пар алгебр Ли. Описаны в явном виде тензоры кривизны и сами совершенные алгебры голономии указанных связностей. Исследования основаны на использовании свойств алгебр Ли, групп Ли и однородных пространств и носят, главным образом, локальный характер. Полученные результаты могут быть использованы при исследовании многообразий, а также иметь приложения в различных областях геометрии, топологии, дифференциальных уравнений, анализа, алгебры, в общей теории относительности, в ядерной физике, физике элементарных частиц и других, поскольку многие фундаментальные задачи в этих областях связаны с изучением однородных пространств и структур на них.

Ключевые слова: алгебра голономии, однородное пространство, группа преобразований, аффинная связность, тензор кривизны.

Для цитирования: Можей Н. П. Совершенные алгебры голономии тривиальных связностей на однородных пространствах неразрешимых групп Ли // Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика. 2022. № 1 (254). С. 5–9.

N. P. Mozhey

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics

PERFECT HOLONOMY ALGEBRAS OF TRIVIAL CONNECTIONS ON HOMOGENEOUS SPACES OF UNSOLVABLE LIE GROUPS

In the introduction, an object of research is indicated – the holonomy algebras of affine connections on homogeneous spaces. The basic notions, such as an invariant affine connection, torsion and curvature tensors, a holonomy algebra are defined. The aim of this work is to describe perfect holonomy algebras of trivial connections on homogeneous spaces. We have concerned the case of the unsolvable Lie group of transformations. In the main part of the work a local description of three-dimensional homogeneous spaces, admitting only trivial affine connections with the perfect holonomy algebra, on which an unsolvable Lie group of transformations acts, is given. It is equivalent to describing the corresponding effective pairs of Lie algebras. The curvature tensors and the perfect holonomy algebras of the indicated connections are described explicitly. Studies are based on the use of properties of the Lie algebras, Lie groups

and homogeneous spaces and they mainly have local character. The results obtained can be used in the study of manifolds, as well as have applications in various fields of geometry, topology, differential equations, analysis, algebra, in general relativity, in nuclear physics, elementary particle physics, etc., since many fundamental problems in these areas related to the study of homogeneous spaces and structures on them.

Key words: holonomy algebra, homogeneous space, transformation group, affine connection, curvature tensor.

For citation: Mozhey N. P. Perfect holonomy algebras of trivial connections on homogeneous spaces of unsolvable Lie groups. *Proceedings of BSTU, issue 3, Physics and Mathematics. Informatics, 2022*, no. 1 (254), pp. 5–9 (In Russian).

Введение. Первое упоминание о голономии (в классической механике) датируется 1895 г. и принадлежит Г. Герцу, в математических работах понятие голономии возникло в 1923 г. у Э. Картана применительно к римановым многообразиям, каждой специальной группе голономии отвечает та или иная геометрия. Говорят, что многообразие обладает совершенной группой голономии, если вся алгебра голономии порождается только операторами кривизны. Исследования структуры кривизны многообразий с совершенной группой голономии проводились, например, в работах [1–3]. Связь совершенной группы голономии лоренцевых пространств с рекуррентными тензорными полями рассматривается, например, в источнике [4]. С описанием алгебр голономии тривиальных связностей на однородных пространствах с неразрешимыми группами преобразований можно ознакомиться в работе [5], целью же данной статьи является определение, при каких условиях алгебра голономии является совершенной. В работе рассматриваются пространства, на которых действует неразрешимая группа преобразований.

Основная часть. Пусть M – дифференцируемое многообразие, на котором транзитивно действует группа \bar{G} , $G = \bar{G}_x$ – стабилизатор произвольной точки $x \in M$. Пусть $\bar{\mathfrak{g}}$ – алгебра Ли группы Ли \bar{G} , а \mathfrak{g} – подалгебра, соответствующая подгруппе G . Там, где это не будет вызывать разночтения, будем отождествлять подпространство, дополнительное к \mathfrak{g} в $\bar{\mathfrak{g}}$, и факторпространство $\mathfrak{m} = \bar{\mathfrak{g}}/\mathfrak{g}$. *Аффинной связностью* на паре $(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g})$ называется такое отображение $\Lambda : \bar{\mathfrak{g}} \rightarrow \mathfrak{gl}(\mathfrak{m})$, что его ограничение на \mathfrak{g} есть изотропное представление подалгебры, а все отображение является \mathfrak{g} -инвариантным. *Тензор кручения* $T \in \text{Inv}T_2^1(\mathfrak{m})$ и *тензор кривизны* $R \in \text{Inv}T_3^1(\mathfrak{m})$ для всех $x, y \in \bar{\mathfrak{g}}$ имеют вид

$$T(x_m, y_m) = \Lambda(x)y_m - \Lambda(y)x_m - [x, y]_m;$$

$$R(x_m, y_m) = [\Lambda(x), \Lambda(y)] - \Lambda([x, y]).$$

Одной из важнейших характеристик связности является группа голономии. Переформулируем теорему Вана [6] об алгебре голономии: *алгебра Ли \mathfrak{h}^* группы голономии инвариантной связности*

$\Lambda : \bar{\mathfrak{g}} \rightarrow \mathfrak{gl}(3, \mathbb{R})$ на паре $(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g})$ – это подалгебра алгебры $\mathfrak{gl}(3, \mathbb{R})$ вида

$$V + [\Lambda(\bar{\mathfrak{g}}), V] + [\Lambda(\bar{\mathfrak{g}}), [\Lambda(\bar{\mathfrak{g}}), V]] + \dots,$$

где V – подпространство, порожденное множеством $\{[\Lambda(x), \Lambda(y)] - \Lambda([x, y]) \mid x, y \in \bar{\mathfrak{g}}\}$. Обозначим через $\mathfrak{a}_{\bar{\mathfrak{g}}}$ подалгебру в $\mathfrak{gl}(3, \mathbb{R})$, порожденную $\{\Lambda(x); x \in \bar{\mathfrak{g}}\}$.

Многообразие обладает *совершенной группой голономии*, если алгебра голономии порождается лишь операторами кривизны.

Будем описывать пару $(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g})$ при помощи таблицы умножения алгебры Ли $\bar{\mathfrak{g}}$ в базисе $\{e_1, \dots, e_n\}$, $n = \dim \bar{\mathfrak{g}}$, причем $\{e_1, \dots, e_{n-3}\}$ – базис \mathfrak{g} , а $\{u_1 = e_{n-2}, u_2 = e_{n-1}, u_3 = e_n\}$ – базис \mathfrak{m} . Для нумерации подалгебр используем запись $d.n$, а для нумерации пар – запись $d.n.m$, здесь d – размерность подалгебры, n – номер подалгебры в $\mathfrak{gl}(3, \mathbb{R})$, а m – номер пары $(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g})$. В дальнейшем, если на параметры, появляющиеся в процессе классификации, накладываются дополнительные условия, то они записываются в таблице умножения, в противном случае предполагается, что параметры пробегает все \mathbb{R} . Будем выписывать аффинную связность через $\Lambda(u_1), \Lambda(u_2), \Lambda(u_3)$, а тензор кривизны R – через $R(u_1, u_2), R(u_1, u_3), R(u_2, u_3)$. Все приведенные далее связности оказываются связностями без кручения.

Пусть группа, действующая на однородном пространстве, не является разрешимой. Далее везде по умолчанию будет предполагаться, что алгебра голономии является ненулевой. Непосредственными вычислениями получаем, что полупростой группа преобразований на трехмерном однородном пространстве, допускающем только тривиальную аффинную связность с ненулевой алгеброй голономии, оказаться не может.

Теорема. *Трехмерные однородные пространства, допускающие только тривиальную аффинную связность с совершенной алгеброй голономии, такие, что $\bar{\mathfrak{g}}$ не является разрешимой, имеют следующий вид:*

2.9.12	e_1	e_2	u_1	u_2	u_3
e_1	0	$-e_2$	u_1	$-2u_2$	$2u_3$
e_2	e_2	0	0	0	u_1
u_1	$-u_1$	0	0	e_2	0

u_2	$2u_2$	0	$-e_2$	0	$-e_1$
u_3	$-2u_3$	$-u_1$	0	e_1	0
2.1.2	e_1	e_2	u_1	u_2	u_3
e_1	0	0	u_1	$-u_2$	0
e_2	0	0	0	0	u_3
u_1	$-u_1$	0	0	e_1	0
u_2	u_2	0	$-e_1$	0	0
u_3	0	$-u_3$	0	0	0

2.3.2	e_1	e_2	u_1	u_2	u_3
e_1	0	0	$-u_2$	u_1	0
e_2	0	0	0	0	u_3
u_1	u_2	0	0	e_1	0
u_2	$-u_1$	0	$-e_1$	0	0
u_3	0	$-u_3$	0	0	0

2.3.3	e_1	e_2	u_1	u_2	u_3
e_1	0	0	$-u_2$	u_1	0
e_2	0	0	0	0	u_3
u_1	u_2	0	0	$-e_1$	0
u_2	$-u_1$	0	e_1	0	0
u_3	0	$-u_3$	0	0	0

3.8.8	e_1	e_2	e_3	u_1	u_2	u_3
e_1	0	0	e_3	u_1	0	0
e_2	0	0	e_3	0	u_2	$-u_3$
e_3	$-e_3$	$-e_3$	0	0	0	u_1
u_1	$-u_1$	0	0	0	e_3	0
u_2	0	$-u_2$	0	$-e_3$	0	$2e_2 - e_1$
u_3	0	u_3	$-u_1$	0	$e_1 - 2e_2$	0

4.11.2	e_1	e_2	e_3	e_4	u_1	u_2	u_3
e_1	0	0	e_3	e_4	u_1	0	0
e_2	0	0	$-e_3$	e_4	0	u_2	$-u_3$
e_3	$-e_3$	e_3	0	0	0	u_1	0
e_4	$-e_4$	$-e_4$	0	0	0	0	u_1
u_1	$-u_1$	0	0	0	0	e_4	e_3
u_2	0	$-u_2$	$-u_1$	0	$-e_4$	0	e_2
u_3	0	u_3	0	$-u_1$	$-e_3$	$-e_2$	0

4.13.2	e_1	e_2	e_3	e_4	u_1	u_2	u_3
e_1	0	e_2	e_3	0	u_1	0	0
e_2	$-e_2$	0	0	e_3	0	u_1	0
e_3	$-e_3$	0	0	$-e_2$	0	0	u_1
e_4	0	$-e_3$	e_2	0	0	$-u_3$	u_2
u_1	$-u_1$	0	0	0	0	e_2	e_3
u_2	0	$-u_1$	0	u_3	$-e_2$	0	e_4
u_3	0	0	$-u_1$	$-u_2$	$-e_3$	$-e_4$	0

4.13.3	e_1	e_2	e_3	e_4	u_1	u_2	u_3
e_1	0	e_2	e_3	0	u_1	0	0
e_2	$-e_2$	0	0	e_3	0	u_1	0
e_3	$-e_3$	0	0	$-e_2$	0	0	u_1
e_4	0	$-e_3$	e_2	0	0	$-u_3$	u_2

u_1	$-u_1$	0	0	0	0	$-e_2$	$-e_3$
u_2	0	$-u_1$	0	u_3	e_2	0	$-e_4$
u_3	0	0	$-u_1$	$-u_2$	e_3	e_4	0

Совершенные алгебры голономии тривиальных связностей представлены в табл. 1.

Таблица 1

Совершенные алгебры голономии

Пара	Алгебра голономии
4.11.2	$\begin{pmatrix} 0 & p_2 & p_1 \\ 0 & -p_3 & 0 \\ 0 & 0 & p_3 \end{pmatrix}$
3.8.8 2.9.12	$\begin{pmatrix} p_2 & 0 & -p_1 \\ 0 & -2p_2 & 0 \\ 0 & 0 & 2p_2 \end{pmatrix}$
4.13.2 4.13.3	$\begin{pmatrix} 0 & p_1 & p_2 \\ 0 & 0 & -p_3 \\ 0 & p_3 & 0 \end{pmatrix}$
2.1.2	$\begin{pmatrix} p_1 & 0 & 0 \\ 0 & -p_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
2.3.2 2.3.3	$\begin{pmatrix} 0 & -p_1 & 0 \\ p_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$

Примечание. Здесь $p_1, p_2, p_3 \in \mathbb{R}$.

Доказательство. Алгебры голономии тривиальных связностей на однородных пространствах с неразрешимыми группами преобразований описаны в работе [5]. Определим, при каких условиях алгебра голономии является совершенной.

Рассмотрим, например, случай 4.13, где

$$\mathfrak{g} = \left\{ \begin{pmatrix} x & z & u \\ 0 & \lambda y & y \\ 0 & -y & \lambda y \end{pmatrix} \middle| x, y, z, u \in \mathbb{R}, \lambda \geq 0 \right\}.$$

Базис подалгебры выберем, придав одной из латинских переменных значение 1, а остальным – 0, нумерация базисных векторов соответствует алфавиту. Если $\lambda \neq 0$, то пара $(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g})$ тривиальна (т. е. существует коммутативный идеал \mathfrak{m} алгебры Ли $\bar{\mathfrak{g}}$, такой, что $\mathfrak{g} \oplus \mathfrak{m} = \bar{\mathfrak{g}}$). Связность на этой паре, тензоры кривизны и кручения, алгебра голономии нулевые, поэтому пара не входит в рассматриваемый в работе класс. Если $\lambda = 0$, то $[u_1, u_2] = a_2 e_2$, $[u_1, u_3] = a_2 e_3$, $[u_2, u_3] = a_2 e_4$. При $a_2 = 0$ пара $(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g})$ эквивалентна тривиальной паре (связность на этой паре, тензоры кривизны и кручения, алгебра голономии нулевые). При $a_2 > 0$ эквивалентность

пара (\bar{g}, g) и 4.13.2 устанавливается посредством $\pi: \bar{g}_2 \rightarrow \bar{g}, \pi(e_i) = e_i, i = 1, 4, \pi(u_j) = a_2^{-1/2} u_j, j = 1, 3$. Связность на этой паре и ее тензор кручения нулевые, тензор кривизны выписан в табл. 2.

Таблица 2

Тензоры кривизны

Пара	Тензор кривизны
4.11.2	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$
4.13.2	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$
4.13.3	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$
3.8.8 2.9.12	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$
2.1.2	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
2.3.2 2.3.3	$\begin{pmatrix} 0 & \mp 1 & 0 \\ \pm 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$

Алгебра, порожденная множеством $R(u_i, u_j)$, т. е. $V = \{[\Lambda(x), \Lambda(y)] - \Lambda([x, y]) \mid x, y \in \bar{g}\}$, совпадает с алгеброй голономии (таким образом, группа голономии совершенна) и имеет вид, приведенный в теореме. При $a_2 < 0$ пара (\bar{g}, g) эквивалентна паре 4.13.3. Связность на этой паре и ее тензор кручения также нулевые, тензор кривизны выписан в табл. 2. Алгебра голономии порождается лишь операторами кривизны (т. е. группа голономии совершенна) и имеет вид, указанный в теореме.

Остальные случаи рассматриваются аналогично. Рассмотрим теперь, например, случай 2.9.12. Тензор кривизны имеет вид, указанный в табл. 2. Алгебра, порожденная множеством $R(u_i, u_j)$, совпадает с алгеброй голономии (таким образом, группа голономии совершенна) и имеет вид, приведенный в теореме. Действительно, поскольку связность тривиальна, $\Lambda(\bar{g}) = \Lambda(g), [\Lambda(\bar{g}), V] = [\Lambda(g), V] = V$, так как $\Lambda(g)$ совпадает с V . В данном случае $\alpha_{\bar{g}} = \Lambda(g)$ и $\eta^* = \alpha_{\bar{g}}$. Тензор кручения нулевой.

Других трехмерных однородных пространств с неразрешимой \bar{g} , допускающих только тривиальную аффинную связность с совершенной алгеброй голономии, кроме указанных в теореме, нет.

Заключение. Таким образом, найдены все трехмерные однородные пространства, на которых действует неразрешимая группа преобразований, допускающие только тривиальную аффинную связность с совершенной алгеброй голономии, что эквивалентно описанию соответствующих эффективных пар алгебр Ли. Описаны в явном виде тензоры кривизны и сами совершенные алгебры голономии указанных связностей.

Список литературы

1. Кайгородов В. Р. Римановы пространства. Структура кривизны пространств типа А // Изв. вузов. Математика. 1974. № 5. С. 117–127.
2. Кайгородов В. Р. Структура кривизны пространств типа В // Изв. вузов. Математика. 1975. № 1. С. 104–107.
3. Кайгородов В. Р. Римановы пространства. Рекуррентность второго порядка // Изв. вузов. Математика. 1975. № 2. С. 112–115.
4. Кайгородов В. Р. Полусимметрические лоренцевы пространства с совершенной группой голономии // Гравитация и теория относительн. 1978. № 14–15. С. 113–120.
5. Можей Н. П. Ненулевые алгебры голономии тривиальных связностей на однородных пространствах с неразрешимыми группами преобразований // Известия Гомельского государственного университета. 2018. № 6 (111). С. 81–88.
6. Wang H. C. On invariant connections over a principal fibre bundle // Nagoya Math. J. 1958. № 13. P. 1–19.

References

1. Kaygorodov V. R. Riemannian spaces. Curvature structure of spaces of type A. *Izvestiya vuzov. Matematika* [Russian Mathematics], 1974, no 5, pp. 117–127 (In Russian).
2. Kaygorodov V. R. Curvature structure of spaces of type B. *Izvestiya vuzov. Matematika* [Russian Mathematics], 1975, no 1, pp. 104–107 (In Russian).

3. Kaygorodov V. R. Riemannian spaces. Second order recurrence. *Izvestiya vuzov. Matematika* [Russian Mathematics], 1975, no 2, pp. 112–115 (In Russian).

4. Kaygorodov V. R. Semi-symmetric Lorentzian spaces with perfect holonomy group. *Gravitatsiya i teoriya otноситel'nosti* [Gravity and the theory of relativity], 1978, no 14–15, pp. 113–120 (In Russian).

5. Mozhey N. P. Nonzero holonomy algebras of trivial connections on homogeneous spaces with unsolvable transformation groups. *Izvestiya Gomel'skogo gosudarstvennogo universiteta* [Proceedings of Francisk Scorina Gomel State University], 2018, no 6 (111), pp. 81–88 (In Russian).

6. Wang H. C. On invariant connections over a principal fibre bundle. *Nagoya Math. J.*, 1958, no 13, pp. 1–19.

Информация об авторе

Можей Наталья Павловна – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры программного обеспечения информационных технологий. Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники (220013, г. Минск, ул. П. Бровки, 6, Республика Беларусь). E-mail: mozheynatalya@mail.ru

Information about the author

Mozhey Natalya Pavlovna – PhD (Physics and Mathematics), Associate Professor, Assistant Professor, the Department of Software for Information Technologies. Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics (6, P. Brovki str., 220013, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: mozheynatalya@mail.ru

Поступила после доработки 29.10.2021

УДК 517.977

С. И. Сиротко, А. В. Пашук

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники

**К УСЛОВИЯМ РЕГУЛЯРНОСТИ
В ЗАДАЧАХ МАТЕМАТИЧЕСКОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ**

Условия регулярности играют важную роль в исследовании задач математического программирования, поскольку гарантируют выполнение необходимых условий оптимальности Каруша – Куна – Таккера. Несмотря на сравнительную эффективность известных условий регулярности, существуют достаточно широкие классы задач оптимизации, в которых эти условия не выполняются. С другой стороны, можно указать иные более слабые условия регулярности, гарантирующие справедливость необходимых условий Каруша – Куна – Таккера. Одним из таких условий является ослабленное условие постоянной положительно линейной зависимости (RCPLD). В данной заметке предлагается модификация RCPLD, позволяющая ослабить требования к ограничениям задачи математического программирования. Также в заметке доказываются достаточные условия R-регулярности (error bound property).

Ключевые слова: условия регулярности, оптимизация, множители Лагранжа.

Для цитирования: Сиротко С. И., Пашук А. В. К условиям регулярности в задачах математического программирования // Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика. 2021. № 1 (254). С. 10–14.

S. I. Sirotko, A. V. Pashuk

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics

ON CONSTRAINT QUALIFICATIONS IN MATHEMATICAL PROGRAMMING

Constraint qualifications play an important role in investigation of mathematical programs since they guarantee the validity of the Karush – Kuhn – Tucker necessary optimality conditions. In spite of effectivity of known constraint qualifications there are vast classes of optimization problems in which these conditions are not fulfilled. On the other hand one can point other weaker constraint qualifications which provide the validity of Karush – Kuhn – Tucker conditions. One of such CQs is the relaxed constant positive linear dependence constraint qualification (RCPLD). In this article we propose a modification of RCPLD which allows to weaken the requirements to constraint in mathematical programs. We also prove sufficient conditions of error bound property.

Key words: constraint qualifications, optimization, Lagrange multipliers.

For citation: Sirotko S. I., Pashuk A. V. On constraint qualifications in mathematical programming. *Proceedings of BSTU, issue 3, Physics and Mathematics. Informatics*, 2021, no. 1 (254), pp. 10–14 (In Russian).

Введение. Пусть f и h_i $i = 1, \dots, p$ – непрерывно дифференцируемые функции из R^m в R . Рассмотрим задачу математического программирования

$$f(y) \rightarrow \min, y \in C$$

с непустым множеством допустимых точек

$$C = \{y \in R^m \mid h_i(y) \leq 0 \quad i \in I, \quad h_i(y) = 0 \quad i \in I_0\},$$

где $I = \{1, \dots, s\}$, $I_0 = \{s + 1, \dots, p\}$.

Основным необходимым условием оптимальности в задачах математического программирования является условие Каруша – Куна – Таккера (ККТ) [1]. Однако ККТ справедливо лишь при наличии условий регулярности ограничений задачи.

Наиболее известным из условий регулярности является условие Мангасаряна – Фромова (MFCQ) [2]. В литературе известны также более слабые условия регулярности, имеющие отличный

от MFCQ характер. К таким условиям, в частности, относится ослабленное условие положительно-линейной зависимости (RCPLD) [3].

Важную роль в построения численных алгоритмов решения задачи оптимизации, в анализе их сходимости, в анализе устойчивости и чувствительности решений играет условие R-регулярности (error bound property) [4–7]. В данной публикации предлагается новая модификация условия RCPLD с более слабыми требованиями к ограничениям и новое достаточное условие R-регулярности.

Основные определения и вспомогательные утверждения. Обозначим $\|y\|$ евклидову норму вектора y и положим

$$d_C(y) = \inf_{v \in C} \|v - y\|.$$

Через $I(y)$ обозначим множество активных в точке $y \in C$ индексов из I .

Определение 1. Множество C будем называть R -регулярным в точке $y^0 \in C$, если найдутся число $\alpha > 0$ и окрестность $V(y^0)$ такие, что

$$d_C(y) \leq \alpha \max \{0, h_i(y) \mid i \in I, |h_i(y)| \mid i \in I_0\}$$

для всех $y \in V(y^0)$.

Множество

$$\Gamma_C(y) = \{ \bar{y} \in R^m \mid \langle \nabla h_i(y), \bar{y} \rangle \leq 0 \mid i \in I(y) \\ \langle \nabla h_i(y), \bar{y} \rangle = 0 \mid i \in I_0 \}$$

будем называть линеаризованным касательным конусом к множеству C в точке $y \in C$.

Следуя источникам [8, 9], введем множество $I^a(y)$ всех существенно активных индексов из $I(y)$, т. е. таких, что $\langle \nabla h_i(y), \bar{y} \rangle = 0$ для любого $\bar{y} \in \Gamma_C(y)$.

Лемма 1 [9]. Пусть $y^0 \in C$. Тогда существует вектор $\bar{y} \in \Gamma_C(y)$ такой, что

$$\langle \nabla h_i(y^0), \bar{y} \rangle = 0 \text{ для всех } i \in I_0 \cup I^a(y^0);$$

$$\langle \nabla h_i(y^0), \bar{y} \rangle < 0 \text{ для всех } i \in I(y^0) \setminus I^a(y^0).$$

Лемма 2 [9]. Пусть $y^0 \in C$. Тогда

$$I^a(y^0) = \{i \in I(y^0) \mid$$

$$\exists \lambda \in \Lambda_0(y^0) \text{ такой, что } \lambda_i > 0\},$$

где

$$\Lambda_0(y^0) = \{ \lambda \in R^p \mid$$

$$\sum_{i \in I_0 \cup I^a(y^0)} \lambda_i \nabla h_i(y) = 0, \lambda_i \geq 0 \text{ и } \lambda_i h_i(y^0) = 0 \mid i \in I \}.$$

Нам нужна также следующая лемма Каратеодори.

Лемма 3 [3]. Пусть

$$0 \neq y = \sum_{i \in J} \alpha_i v^i + \sum_{i \in K} \alpha_i v^i$$

для всех $i \in K$, где векторы $\{v^i \mid i \in J\}$ линейно независимы. Тогда существуют множество $S \subset K$ и числа $\beta_i \mid i \in J \cup S$ такие, что векторы $\{v^i \mid i \in J \cup S\}$ линейно независимы, и

$$y = \sum_{i \in J} \beta_i v^i + \sum_{i \in S} \beta_i v^i,$$

где $\alpha_i \beta_i > 0$ при всех $i \in S$.

Пусть $S_0 \subset I_0, S \subset I$. Система векторов

$$\{\nabla h_i(y) \mid i \in S_0 \cup S\}$$

называется положительно-линейно зависимой, если найдутся не все равные нулю числа $\{\lambda_i \mid i \in S_0 \cup S\}$ такие, что $\lambda_i \geq 0$ для $i \in S$ и

$$\sum_{i \in S_0 \cup S} \lambda_i \nabla h_i(y) = 0.$$

Определение 2. Пусть множество $I_{00} \subset I_0$ такое, что $\{\nabla h_i(y^0) \mid i \in I_{00}\}$ является базисом системы векторов $\{\nabla h_i(y^0) \mid i \in I_0\}$. Точка $y^0 \in C$ удовлетворяет

условию RCPLD, если найдется окрестность $V(y^0)$ точки y^0 такая, что:

1) ранг системы $\{\nabla h_i(y) \mid i \in I_0\}$ один и тот же для любого $y \in V(y^0)$;

2) при любом $K \subset I(y^0) \setminus I_{00}$, если система векторов $\{\nabla h_i(y^0) \mid i \in I_{00} \cup K\}$ положительно-линейно зависима, то $\{\nabla h_i(y) \mid i \in I_{00} \cup K\}$ является линейно зависимой при всех $y \in V(y^0)$.

Следующее определение мотивировано определением RCPLD [3], рассматривающим положительно-линейно зависимые системы.

Определение 3. Пусть для множества $I_{00} \subset I_0$ векторная система $\{\nabla h_i(y^0) \mid i \in I_{00}\}$ является базисом системы $\{\nabla h_i(y^0) \mid i \in I_0\}$. Будем говорить, что точка $y^0 \in C$ удовлетворяет условию положительно-линейной зависимости (PLD), если найдется окрестность $V(y^0)$ такая, что

1) $\{\nabla h_i(y) \mid i \in I_0\}$ имеет одинаковый ранг для всех $y \in V(y^0)$;

2) для любого $K \subset I(y^0) \setminus I_{00}$, если система $\{\nabla h_i(y^0) \mid i \in I_{00} \cup K\}$ положительно-линейно зависима, то система $\{\nabla h_i(y) \mid i \in I_{00} \cup K\}$ линейно зависима для всех $y^0 \in V(y^0)$.

Будем говорить, что точка $y^0 \in C$ удовлетворяет условию положительно-линейной зависимости на множестве C (PLD $_C$), если оба требования определения PLD выполняются для всех $y \in V(y^0) \cap C$.

Основная часть. Рассмотрим задачу

$$(P): f(y) \rightarrow \min, y \in C,$$

и докажем, что PLD является условием регулярности.

Определение 4. Следуя источнику [3], будем говорить, что точка $y^0 \in C$ удовлетворяет аппроксимативному условию Каруша – Куна – Таккера (АККТ) в задаче (P), если существуют последовательности $y^k \rightarrow y^0, \lambda_i^k \in R \mid i \in I_0, \lambda_i^k \geq 0 \mid i \in I$ такие, что

$$\nabla f(y^k) + \sum_{i \in I_0} \lambda_i^k \nabla h_i(y^k) + \sum_{i \in I(y^0)} \lambda_i^k \nabla h_i(y^k) \rightarrow 0.$$

Известно (см. [3]), что любое решение задачи (P) удовлетворяет АККТ.

Теорема 1. Пусть y^0 является решением задачи (P). Если y^0 удовлетворяет условию PLD, то АККТ выполняется в данной точке.

Доказательство. Из определения АККТ следует существование последовательностей $y^k \rightarrow y^0, \lambda_i^k \in R \mid i \in I_0, \lambda_i^k \geq 0 \mid i \in I$, для которых

$$-\nabla f(y^k) - \sum_{i \in I(y^0) \setminus I^a(y^0)} \lambda_i^k \nabla h_i(y^k) - \varepsilon_k = \\ = \sum_{i \in I_0} \lambda_i^k \nabla h_i(y^k) + \sum_{i \in I^a(y^0) \cap K} \lambda_i^k \nabla h_i(y^k), \quad (1)$$

где $\varepsilon_k \rightarrow 0$.

Пусть векторная система $\{\nabla h_i(y^0) \mid i \in I_{00}\}$ является базисом системы $\{\nabla h_i(y^0) \mid i \in I_0\}$. Тогда из формулы (1) следует

$$\begin{aligned}
& -\nabla f(y^k) - \sum_{i \in I(y^0) \setminus I^a(y^0)} \lambda_i^k \nabla h_i(y^k) - \varepsilon_k = \\
& = \sum_{i \in I_{00}} \alpha_i^k \nabla h_i(y^k) + \sum_{i \in I^a(y^0)} \lambda_i^k \nabla h_i(y^k), \quad (2)
\end{aligned}$$

где $\lambda_i^k \geq 0 \quad i \in I(y^0)$, $\alpha_i^k \in R \quad i \in I_{00}$.

1) Предположим, что

$$-\nabla f(y^k) + \sum_{i \in I(y^0) \setminus I^a(y^0)} \lambda_i^k \nabla h_i(y^k) - \varepsilon_k \neq 0$$

для всех $k = 1, 2, \dots$, начиная с некоторого k_0 .

В соответствии с леммой 3 для любого k найдется множество $J(k) \subset I^a(y^0)$, при котором

$$\begin{aligned}
& -\nabla f(y^k) - \sum_{i \in I(y^0) \setminus I^a(y^0)} \lambda_i^k \nabla h_i(y^k) - \varepsilon_k = \\
& = \sum_{i \in I_{00}} \alpha_i^k \nabla h_i(y^k) + \sum_{i \in J(k)} \alpha_i^k \nabla h_i(y^k), \quad (3)
\end{aligned}$$

где $\alpha_i^k \geq 0 \quad i \in J(k)$ и векторы $\{\nabla h_i(y^k) \quad i \in I_{00} \cup J(k)\}$ линейно независимы.

Ввиду конечности индексного множества I можно, не ограничивая общности, считать, что $J(k)$ одно и то же при всех k , т. е. $J(k) = J$.

Пусть

$$\begin{aligned}
M_k &= \max \{ \lambda_i^k \quad i \in I(y^0) \setminus I^a(y^0); \\
& \alpha_i^k \quad i \in J, |\alpha_i^k| \quad i \in I_{00} \} \rightarrow \infty.
\end{aligned}$$

Тогда, разделив (3) на M_k и перейдя к пределу, получим

$$\begin{aligned}
& \sum_{i \in I(y^0) \setminus I^a(y^0)} \lambda_i \nabla h_i(y^0) + \sum_{i \in I_{00}} \lambda_i \nabla h_i(y^0) + \\
& + \sum_{i \in J} \lambda_i \nabla h_i(y^0) = 0, \quad (4)
\end{aligned}$$

где не все λ_i равны нулю.

Пусть \bar{y} удовлетворяет условиям леммы 1. Тогда

$$\sum_{i \in I(y^0) \setminus I^a(y^0)} \lambda_i \langle \nabla h_i(y^0), \bar{y} \rangle = 0,$$

где $\langle \nabla h_i(y^0), \bar{y} \rangle < 0$ для всех $i \in I(y^0) \setminus I^a(y^0)$.

Отсюда $\lambda_i = 0$ при $i \in I(y^0) \setminus I^a(y^0)$, и из равенства (4) следует

$$\sum_{i \in I_{00}} \lambda_i \nabla h_i(y^0) + \sum_{i \in J} \lambda_i \nabla h_i(y^0) = 0,$$

т. е. векторы $\{\nabla h_i(y^0) \quad i \in I_{00} \cup J\}$ линейно зависимы, что противоречит условию PLD.

Следовательно, существует ограниченная подпоследовательность в $\{M_k\}$ (для простоты обозначим ее также $\{M_k\}$), и без потери общности можно считать

$$\begin{aligned}
\lambda_i^k &\rightarrow \lambda_i \geq 0 \quad i \in I(y^0) \setminus I^a(y^0); \\
\alpha_i^k &\rightarrow \lambda_i \geq 0 \quad i \in J; \\
\alpha_i^k &\rightarrow \lambda_i \in R \quad i \in I_{00}.
\end{aligned}$$

Тогда предел в формуле (3) дает

$$\begin{aligned}
& \nabla f(y^k) + \sum_{i \in I(y^0) \setminus I^a(y^0)} \lambda_i \nabla h_i(y^0) + \\
& + \sum_{i \in I_{00}} \lambda_i \nabla h_i(y^0) + \sum_{i \in J} \lambda_i \nabla h_i(y^0) = 0,
\end{aligned}$$

т. е. ККТ выполняется в точке y^0 .

2) Предположим, что

$$-\nabla f(y^k) - \sum_{i \in I(y^0) \setminus I^a(y^0)} \lambda_i^k \nabla h_i(y^k) - \varepsilon_k = 0 \quad (5)$$

при бесконечно большом наборе k (для простоты при всех k). Тогда, если $\{\lambda_i^k\}$ ограничена, то без потери общности можно принять $\lambda_i^k \rightarrow \lambda_i \geq 0$ и, значит,

$$\nabla f(y^0) + \sum_{i \in I(y^0) \setminus I^a(y^0)} \lambda_i \nabla h_i(y^0) = 0.$$

Следовательно, ККТ выполняется в y^0 .

Если $\{\lambda_i^k\}$ не ограничена, то из формулы (5) следует, что

$$\sum_{i \in I(y^0) \setminus I^a(y^0)} \lambda_i \nabla h_i(y^0) = 0,$$

где среди λ_i найдутся $\lambda_i \neq 0$.

Последнее невозможно ввиду леммы 2.

Теорема 2. Пусть $y^0 \in C$. Предположим, что существует окрестность $V(y^0)$ такая, что

а) некоторое условие регулярности справедливо в любой допустимой точке из $V(y^0)$;

б) точка y^0 удовлетворяет PLD.

Тогда условие R-регулярности выполняется в точке $V(y^0)$.

Доказательство. Предположим, что условие R-регулярности не выполняется в $V(y^0)$. Тогда существует последовательность $v^k \rightarrow y^0$, $v^k \notin C$ такая, что

$$d_C(v^k) > k \max \{0, h_i(v^k) \quad i \in I, |h_i(v^k)| \quad i \in I_0\}$$

для всех $k = 1, 2, \dots$.

Пусть y^k – решение задачи

$$|y - v^k| \rightarrow \min, \quad y \in C.$$

Тогда $|v^k - y^k| \leq |v^k - y^0|$ и, следовательно, $y^k \rightarrow y^0$. Положим

$$\bar{v}^k = \frac{v^k - y^k}{|v^k - y^k|} \rightarrow \bar{v};$$

$$I(y^k) = K \subset I(y^0).$$

Вследствие условия а) существуют векторы $\lambda^k \in R^p$ такие, что

$$\frac{v^k - y^k}{|v^k - y^k|} = \sum_{i=1}^p \lambda_i^k \nabla h_i(y^k),$$

где $\lambda_i^k \geq 0$ при $i \in I$ и $\lambda_i^k = 0$ при $i \in I \setminus K$.

Тогда

$$\begin{aligned} \bar{v}^k &= \sum_{i \in I_0 \cup K} \lambda_i^k \nabla h_i(y^k); \\ \lambda_i^k &\geq 0 \quad i \in K, \lambda_i^k = 0 \quad i \in I \setminus K. \end{aligned} \quad (6)$$

Из (6) следует

$$\begin{aligned} \bar{v}^k - \sum_{i \in K \setminus I^a(y^0)} \lambda_i^k \nabla h_i(y^k) &= \\ = \sum_{i \in I_0} \alpha_i^k \nabla h_i(y^k) + \sum_{i \in I^a(y^0) \cap K} \alpha_i^k \nabla h_i(y^k), \end{aligned} \quad (7)$$

где $\lambda_i^k \geq 0 \quad i \in K, \alpha_i^k \in R \quad i \in I_0$.

1) Предположим, что в формуле (7)

$$\bar{v}^k - \sum_{i \in K \setminus I^a(y^0)} \lambda_i^k \nabla h_i(y^k) \neq 0$$

для всех $k = 1, 2, \dots$, начиная с некоторого k_0 .

Тогда, исходя из леммы 3, для любого k найдется множество $J(k) \subset I^a(y^0) \cap K$ такое, что

$$\begin{aligned} \bar{v}^k - \sum_{i \in K \setminus I^a(y^0)} \lambda_i^k \nabla h_i(y^k) &= \\ = \sum_{i \in I_0} \alpha_i^k \nabla h_i(y^k) + \sum_{i \in J(k)} \alpha_i^k \nabla h_i(y^k), \end{aligned}$$

где $\alpha_i^k > 0$ для всех $i \in J(k)$, и векторы $\{\nabla h_i(y^k) \mid i \in I_0 \cup J(k)\}$ линейно независимы.

Без потери общности можно считать $J(k)$ не зависящим от k , т. е. $J(k) = J$. Тогда

$$\begin{aligned} \bar{v}^k &= \sum_{i \in K \setminus I^a(y^0)} \alpha_i^k \nabla h_i(y^k) + \\ + \sum_{i \in I_0} \alpha_i^k \nabla h_i(y^k) + \sum_{i \in J} \alpha_i^k \nabla h_i(y^k), \end{aligned} \quad (8)$$

где векторы $\{\nabla h_i(y^k) \mid i \in I_0 \cup J\}$ линейно независимы, $\alpha_i^k \geq 0 \quad i \in K$ и $\alpha_i^k > 0$ для всех $i \in J$.

Так как уравнение (8) представляет собой условие ККТ в точке y^k , то в соответствии с критерием R-регулярности [10, 11] последовательность $\{\alpha_i^k\}$ является неограниченной, т. е. $|\alpha_i^k| \rightarrow \infty$.

Тогда, разделив (8) на $|\alpha_i^k|$ и перейдя к пределу, получим

$$\begin{aligned} \sum_{i \in K \setminus I^a(y^0)} \lambda_i \nabla h_i(y^0) + \sum_{i \in I_0} \lambda_i \nabla h_i(y^0) + \\ + \sum_{i \in J} \lambda_i \nabla h_i(y^0) = 0, \end{aligned} \quad (9)$$

где $\lambda_i \geq 0 \quad i \in J \cup (K \setminus I^a(y^0)), \lambda_i \in R \quad i \in I_0$, и найдутся $\lambda_i \neq 0$.

В соответствии с леммой 2, $\lambda_i = 0$ при $i \in K \setminus I^a(y^0)$, следовательно, уравнение (9) принимает вид

$$\sum_{i \in I_0} \lambda_i \nabla h_i(y^0) + \sum_{i \in J} \lambda_i \nabla h_i(y^0) = 0,$$

где среди λ_i есть ненулевые.

Поскольку $\{\nabla h_i(y^k) \mid i \in I_0 \cup J\}$ линейно независимы, последнее противоречит PLD_C.

2) Пусть в уравнении (7) для бесконечного множества индексов k (для простоты для всех k)

$$\bar{v}^k = \sum_{i \in K \setminus I^a(y^0)} \lambda_i^k \nabla h_i(y^k) \neq 0. \quad (10)$$

Тогда в соответствии с критериями [10, 11] последовательность $\{\lambda_i^k\}$ не ограничена. Разделив (10) на $\max\{\lambda_i^k \mid i \in K \setminus I^a(y^0)\}$ и перейдя к пределу, получим

$$\sum_{i \in K \setminus I^a(y^0)} \lambda_i \nabla h_i(y^0) = 0,$$

где присутствуют $\lambda_i \neq 0$.

Но, исходя из леммы 2, $\lambda_i = 0$ для всех $i \in K \setminus I^a(y^0)$. Таким образом, условие (10) невозможно.

Заключение. В статье получена новая модификация известного условия регулярности RCPLD. Это условие регулярности содержит более слабые требования к ограничениям задачи математического программирования, а также меньший объем вычислений при его проверке. Также доказаны достаточные условия R-регулярности в задаче оптимизации, которые расширяют известные ранее результаты, посвященные R-регулярности (error bound property).

Список литературы

1. Kuhn H. W., Tucker A. W. Nonlinear Programming // Proceedings of the Second Berkeley Symposium on Mathematics, Statistics and Probability. Berkeley: University of California Press, 1951. P. 481–492.
2. Mangasarian O. L., Fromovitz S. The Fritz-John necessary optimality conditions in presence of equality and inequality constraints // Journal of Mathematical Analysis and Applications. 1967. Vol. 7. P. 37–47.
3. A relaxed constant positive linear dependence constraint qualification and applications / R. Andreani [et al.]. Mathematical Programming. 2012. Vol. 135. P. 255–273.
4. Pang J. Error bounds in mathematical programming // Mathematical Programming. 1997. Vol. 79. P. 299–332.
5. Luderer B., Minchenko L., Satsura T. Multivalued analysis and nonlinear programming problems with perturbations. Dordrecht: Kluwer Academic Publisher, 2002. 220 p.
6. Kruger A. Y. Error Bounds and Metric Subregularity // Optimization. 2015. Vol. 64, no. 1. P. 49–79.
7. Error bounds: necessary and sufficient conditions / M. J. Fabian [et al.] // Set-Valued and Variational Analysis. 2010. Vol. 18, no. 2. P. 121–149.

8. Kruger A. Y., Minchenko L. I., Outrata J. V. On relaxing the Mangasarian-Fromovitz constraint qualification // *Positivity*. 2014. Vol. 18. P. 171–189.
9. Minchenko L. I. Note on MFCQ-like constraint qualifications // *Journal of Optimization Theory and Applications*. 2019. Vol. 182, no. 3. P. 1199–1204.
10. Bednarchuk E. M., Minchenko L. I., Rutkowski K. E. On Lipschitz-like continuity of a class of set-valued mappings // *Optimization*. 2020. Vol. 69, no. 12. P. 2535–2549.
11. Minchenko L., Stakhovski S. Parametric nonlinear programming problems under relaxed constant rank regularity condition // *SIAM Journal on Optimization*. 2011. Vol. 21, no. 1. P. 314–332.

References

1. Kuhn H. W., Tucker A. W. *Nonlinear Programming. Proceedings of the Second Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability*. Berkeley, University of California Press, 1951, pp. 481–492.
2. Mangasarian O. L., Fromovitz S. The Fritz-John necessary optimality conditions in presence of equality and inequality constraints. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 1967, vol. 7, pp. 37–47.
3. Andreani R., Haeser G., Schuverdt M.L., Silva P. J. S. A relaxed constant positive linear dependence constraint qualification and applications. *Mathematical Programming*, 2012, vol. 135, pp. 255–273.
4. Pang J. Error bounds in mathematical programming. *Mathematical Programming*, 1997, vol. 79, pp. 299–332.
5. Luderer B., Minchenko L., Satsura T. *Multivalued analysis and nonlinear programming problems with perturbations*. Dordrecht, Kluwer Academic Publisher, 2002. 220 p.
6. Kruger A. Y. Error Bounds and Metric Subregularity. *Optimization*, 2015, vol. 64, no. 1, pp. 49–79.
7. Fabian M. J., Henrion R., Kruger A. Y., Outrata J. V. Error bounds: necessary and sufficient conditions. *Set-Valued and Variational Analysis*, 2010, vol. 18, no. 2, pp. 121–149.
8. Kruger A. Y., Minchenko L. I., Outrata J. V. On relaxing the Mangasarian-Fromovitz constraint qualification. *Positivity*, 2014, vol. 18, pp. 171–189.
9. Minchenko L. I. Note on MFCQ-like constraint qualifications. *Journal of Optimization Theory and Applications*, 2019, vol. 182, no. 3, pp. 1199–1204.
10. Bednarchuk E. M., Minchenko L. I., Rutkowski K. E. On Lipschitz-like continuity of a class of set-valued mappings. *Optimization*, 2020, vol. 69, no. 12, pp. 2535–2549.
11. Minchenko L., Stakhovski S. Parametric nonlinear programming problems under relaxed constant rank regularity condition. *SIAM Journal on Optimization*, 2011, vol. 21, no. 1, pp. 314–332.

Информация об авторах

Сиротко Сергей Иванович – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры информатики. Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники (220013, г. Минск, ул. П. Бровки, 6, Республика Беларусь). E-mail: sergeyis@bsuir.by

Пашук Александр Владимирович – старший преподаватель кафедры информатики. Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники (220013, г. Минск, ул. П. Бровки, 6, Республика Беларусь). E-mail: pashuk@bsuir.by

Information about the authors

Sirotko Sergey Ivanovich – PhD (Physics and Mathematics), Associate Professor, Assistant Professor, the Department of Informatics. Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics (6, P. Brovki str., 220013, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: sergeyis@bsuir.by

Pashuk Aleksandr Vladimirovich – Senior Lecturer, the Department of Informatics. Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics (6, P. Brovki str., 220013, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: pashuk@bsuir.by

Поступила после доработки 04.01.2022

УДК 511.172

Thiha Bo

Mandalar University (Myanmar)

THE VISUALIZE FORMULATION OF DIVISIBILITY

For the purposes of cryptography it is necessary to develop effective methods and algorithms: to check the simplicity of integers; to find large prime numbers; to factorize integers.

This paper studies a generalized method for constructing algorithms to check the divisibility of integers by a given number b in various number systems by analyzing the sets of divisors of base (a given number b), prebase (number $b - 1$), and postbase (number $b + 1$). It is indicated that the rules for testing divisibility by a given number may have different complexity depending on the number system used.

The paper introduces the formulations of some theorems with proofs. The theorems are supported by concrete examples.

These theorems can formulate for many divisibility rules for any number over the any base. Some numbers are although difficult over base 10, they are easy over another base. Some numbers, such as primes, have direct rules, but some composites have combined rules.

Key words: base factors, prebase factors, postbase factors, rise, visualize array.

For citation: Thiha Bo. The visualize formulation of divisibility. *Proceedings of BSTU, issue 3, Physics and Mathematics. Informatics*, 2022, no. 1 (254), pp. 15–18.

Тиха Бо

Университет Мандалая (Мьянма)

ВИЗУАЛИЗИРУЕМАЯ ФОРМУЛИРОВКА ДЕЛИМОСТИ

Для целей криптографии необходимо разрабатывать эффективные методы и алгоритмы: проверки простоты целых чисел; поиска больших простых чисел; факторизации целых чисел.

В данной статье изучается обобщенный способ построения алгоритмов проверки делимости целых чисел на заданное число b в различных системах счисления путем анализа множеств делителей базы (заданного числа b), предбазы (числа $b - 1$) и постбазы (числа $b + 1$). Указано, что правила проверки делимости на данное число могут иметь разную сложность в зависимости от используемой системы счисления.

В статье приводятся формулировки некоторых теорем с доказательствами. Теоремы подкреплены конкретными примерами. Эти теоремы позволяют сформулировать множество правил делимости для любого числа в любой системе счисления. Некоторые числа, хотя и являются сложными при делении в системе счисления по основанию 10, легко делятся в системе счисления по другому основанию.

Ключевые слова: делители базы, делители предбазы, делители постбазы, рост, визуализация массива.

Для цитирования: Тиха Бо. Визуализируемая формулировка делимости // Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика. 2022. № 1 (254). С. 15–18.

Introduction. In number theory, the properties of integers are studied. In this paper, a shorthand way of determining whether a given integer is divisible by a fixed divisor without performing the division, usually by examining its digits, were developed generally. For base 10 (decimal system), Martin Gardner explained and popularized these rules in his September 1962 “Mathematical Games” column in Scientific American. In this paper, the divisibility rules for any number, any base and the best formulae are derived by visualization. Today, all of the calculations are calculated by electronic devices. But these devices are made by human. If the algorithms of the calculation of the devices are reduced to simplest way by using the theorems in this paper, it will be great benefit for us [1–3].

Main part. To get the sense of divisibility, some definitions and notations are defined and introduced.

The properties of numbers over any base are characterized.

The prime divisors or the power of prime divisors of a base b is called the *base factors of b* .

B_b is the notation of the set of all base factors of b . For examples: $B_{10} = \{2, 5\}$.

Suppose the digit of base 8 are order triple pair of zero and one, i. e.

$$0 = 000, 1 = 001, 2 = 010, 3 = 011, 4 = 100,$$

$$5 = 101, 6 = 110, 7 = 111, 8 = 1000,$$

$$B_8 = \{010, 100, 1000\} = \{2, 4, 8\}.$$

The divisors of $b - 1$ is called the *prebase factors of b* . P_b is the notation of the set of all prebase factors of b . For examples:

$$P_{10} = \{3, 9\}, P_8 = \{111\} = \{7\}.$$

The divisors of $b + 1$ is called the *postbase factors of b* . Q_b is the notation of the set of all postbase factors of b . For examples:

$$Q_{10} = \{11\}, Q_8 = \{011, 1001\} = \{3, 9\}.$$

The different form one's digit of a multiply of number n to one's digit of another multiply n is called *run of n over base b* . The different between ten's digit of a multiply of number n and ten's digit of another multiply n is called *rise of n over base b* . $r_b(p, q)_n = y : x$ is the notation of the simplest integral ratio of rise y and run x of pn and qn over base b , where $x \neq 0$ and $y \neq 0$. $R_b(n)$ is the notation of the set of all ratios $r_b(p, q)_n$ for n and base b . For examples:

For 7 and 14 over base 10, run is -3 and rise is 1, i. e., $r_{10}(1, 2)_7 = 1 : -3$.

For 7 and 21 over base 10, run is -6 and rise is 2, i. e., $r_{10}(1, 3)_7 = 1 : -3$.

For 7 and 28 over base 10, run is 1 and rise is 2, i. e., $r_{10}(1, 4)_7 = 2 : 1$.

For 7 and 35 over base 10, run is -2 and rise is 3, i. e., $r_{10}(1, 5)_7 = 3 : -2$.

Then

$$R_{10}(7) = \{-1 : 3, 2 : 1, -3 : 2, -4 : 5, 1 : 4, -6 : 1, \dots\}.$$

Similarity

$$R_{10}(9) = \{-1 : 1, -10 : 1, 8 : 1, 7 : 2, \dots\},$$

$$R_{10}(11) = \{1 : 1, 12 : 1, -10 : 1, -9 : 2, \dots\},$$

$$R_{10}(3) = \{-1 : 1, -10 : 1, 8 : 1, 7 : 2, \dots\}.$$

The element of $R_b(n)$ is defined as the best coefficient or best ratio of n over base b , if its denominator 1 and the modulus of numerator is minimum. For examples: $2 : 1$ is the best coefficient of 7 over base 10. $1 : 1$ is the best coefficient of 11 over base 10. $-1 : 1$ is the best coefficient of 3 and 9 over base 10.

The best coefficient of a prebase factor of a base b is always $-1 : 1$ and the best coefficient of a postbase factor of a base b is always $1 : 1$.

Lemma. If $y : x \in R_b(n)$, then $n \mid x + by$.

Proof. By definition, $y : x = r_b(p, q)_n$.

Let $pn = \alpha b + \beta$ and $qn = \gamma b + \delta$.

So, $x = \delta - \beta$ and $y = \gamma - \alpha$.

$$x + by = \delta - \beta + b(\gamma - \alpha) =$$

$$= \gamma b + \delta - (\alpha b + \beta) = qn - pn = (q - p)n.$$

Depend on the characteristics of a number over a given base, the divisibility rules were different each other. But we need only four theorems which are developed generally as follow.

Base Factor Theorem. If n is a base factor of b and $m = \sum_{i=0}^p a_i b^i = a_0 b_0 + a_1 b_1 + \dots + a_p b_p$, then $n \mid m$ if and only if $n \mid a_0$.

Proof. Since n is a base factor of b , $n \mid b$. The result is obviously.

Prebase Factor Theorem. If n is a prebase factor of b and $m = \sum_{i=0}^p a_i b^i = a_0 + a_1 b + \dots + a_p b^p$, then $n \mid m$

if and only if $n \mid \sum_{i=0}^p a_i$.

Proof. Since n is a prebase factor, $n \mid b - 1$.

Since $b - 1 \mid 1 - b^i$, for $i = 1, 2, 3, \dots$

So, $n \mid (1 - b)a_1 + \dots + (1 - b^p)a_p$ and let $(1 - b)a_1 + \dots + (1 - b^p)a_p = sn$.

Suppose $n \mid m$. Let $m = kn$.

$$\sum_{i=0}^p a_i = a_0 + a_1 + \dots + a_p =$$

$$= a_0 + a_1 + \dots + a_p + a_1 b + \dots + a_p b^p - a_1 b - \dots -$$

$$- a_p b^p = a_0 + a_1 b + \dots + a_p b^p + (1 - b)a_1 + \dots +$$

$$+ (1 - b^p)a_p = kn + sn = (k + s)n.$$

$$m = \sum_{i=0}^p a_i b^i = a_0 + a_1 b + \dots + a_p b^p =$$

$$= a_0 + a_1 b + \dots + a_p b^p - a_1 - \dots - a_p + a_1 + \dots + a_p =$$

$$= a_1(b - 1) + \dots + a_p(b^p - 1) + a_0 + a_1 + \dots + a_p =$$

$$= -sn + tn = (t - s)n.$$

Postbase Factor Theorem. If n is a postbase factor of b and $m = \sum_{i=0}^p a_i b^i = a_0 + a_1 b + \dots + a_p b^p$, then

$n \mid m$ if and only if $n \mid \sum_{i=0}^p (-1)^i a_i$.

Proof. Since n is a postbase factor, $n \mid b + 1$.

Since $b + 1 \mid 1 + b^i$, for $i = 1, 3, 5, \dots$ and $b + 1 \mid 1 - b^i$, for $i = 2, 4, 6, \dots$

So, $n \mid -a_1(1 + b) + a_2(1 - b^2) - a_3(1 + b^3) + \dots + a_p((-1)^p - b^p) = sn$.

Suppose $n \mid m$. Let $m = kn$.

$$\sum_{i=0}^p (-1)^i a_i = a_0 - a_1 + \dots + (-1)^p a_p =$$

$$= a_0 - a_1 + a_2 - a_3 + \dots + (-1)^p a_p + a_1 b + a_2 b^2 \dots +$$

$$+ a_p b^p - a_1 b - \dots - a_p b^p = -a_1(1 + b) +$$

$$+ a_2(1 - b^2) - a_3(1 + b^3) + \dots + a_p((-1)^p - b^p) =$$

$$= kn + sn = (k + s)n.$$

Conversely, suppose $n \mid \sum_{i=0}^p (-1)^i a_i$. Let

$$\sum_{i=0}^p (-1)^i a_i = tn.$$

$$m = \sum_{i=0}^p a_i b^i = a_0 + a_1 b + \dots + a_p b^p = a_0 + a_1 b + \dots + a_p b^p - a_1 + a_2 - a_3 + \dots + (-1)^p a_p + a_1 - a_2 + a_3 - \dots - (-1)^p a_p = a_0 - a_1 + a_2 - a_3 + \dots + (-1)^p a_p + a_1(b+1) - a_2(1-b^2) + a_1(1+b^3) + \dots - a_p((-1)^p - b^p) = tn - sn = (t-s)n.$$

Visualize Divisibility Theorem. If $y : x \in R_b(n)$, $(n, y) = 1$, $(n, b) = 1$, $m = bp + q$, then $n \mid m$ if and only if $n \mid qy - xp$.

Proof. Let, by Lemma, $x + by = \mu n$, for some integer μ . Suppose $n \mid m$, i. e., $bp + q = \lambda n$, for some integer λ .

$$\begin{aligned} bpy + qy &= \lambda ny; \\ bpy + xp - xp + qy &= \lambda ny; \\ (x + by)p + (qy - xp) &= \lambda ny; \\ \mu np + (qy - xp) &= \lambda ny; \\ qy - xp &= (\lambda y - \mu p)n. \end{aligned}$$

Conversely, suppose $n \mid qy - xp$, i. e., $qy - xp = kn$, for some integer k .

$$\begin{aligned} \mu np + qy - xp &= \mu np + kn; \\ (x + by)p + qy - xp &= (\mu p + k)n; \\ xp + byp + qy - xp &= (\mu p + k)n; \\ (bp + q)y &= (\mu p + k)n. \end{aligned}$$

Since $(n, y) = 1$, $n \mid bp + q$, i. e. $n \mid m$.

Convergence of Formulae. Using the best coefficient of a number n of a base b , and using the Visualize Divisibility Theorem, we will have a convergence formula for divisibility of the number n . For a number n belong to none of the set B_b , P_b or Q_b and $(n, b) \neq 1$, using combination formula of the formulae of its prime and power of prime factors.

Some Visualize Array and Some Examples.

1) *Finding ratio of 7 over base 10 on visualize array of base 10.*

Table 1

The visualize array of $R_{10}(7) = \{2 : 1, \dots\}$

101	102	103	104	105	106	107
91	92	93	94	95	96	97	98	99	100
81	82	83	84	85	86	87	88	89	90
71	72	73	74	75	76	77	78	79	80
61	62	63	64	65	66	67	68	69	70
51	52	53	54	55	56	57	58	59	60
41	42	43	44	45	46	47	48	49	50
31	32	33	34	35	36	37	38	39	40
21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10

Note. Negative (gray) and positive (boundary).

2) *Some formulae of 7 over base 10.*

There were many convergence formulae of 7. The best formula is using $2 : 1$.

By Visualize Divisibility Theorem, $x = 1, y = 2, n = 7, b = 10, (7, 2) = 1, (7, 10) = 1$ and let $m = 10p + q$. Then 7 divides $p - 2q$ if and only if 7 divides m .

Another convergence formula is using $-5 : 1$.

By Visualize Divisibility Theorem, $x = 1, y = -5, n = 7, b = 10, (7, -5) = 1, (7, 10) = 1$ and let $m = 10p + q$. Then 7 divides $p + 5q$ if and only if 7 divides m .

3) *A formula of 43 over base 300.*

Table 2

The visualize array of $R_{300}(43) = \{1 : 1, \dots\}$

2001	2002	2003	2004	2005	2006	...	2298	2299	3000
601	602	603	604	605	606	...	898	899	900
1001	1002	1003	1004	1005	1006	...	1298	1299	2000
301	302	303	304	305	306	...	598	599	600
1	2	3	4	5	6	...	298	299	1000
1	2	3	4	5	6	...	298	299	300

Note. Base 10 (gray), base 300 (white) and the best ratio (boundary).

We easily see that $n = 43$ is the postbase factor of $b = 300$, because $43 \cdot 7 = 300 + 1$.

$$271\ 818\ 611\ 107_{10} = 33\ 167\ 106\ 237\ 007_{300}.$$

By Postbase Factor Theorem, we use the different of alternate sum of digit, $33 - 167 + 106 - 237 + 7 = -258 = -43 \times 6$.

So, 271 818 611 107 is divisible by 43.

4) *Some formulae of 13 over base 1 000 000 and base 10.*

Table 3

The visualize array of $R_{1000000}(13) = \{-1 : 1, \dots\}$

1'1	1'2	1'3	1'4	1'5	1'6	...	1'999 998	1'999 999	2'0
1	2	3	4	5	6	...	999 998	999 999	1'0

Note. Best ratio (boundary).

We see that $n = 13$ is the prebase factor of $b = 1000000$, because $13 \cdot 76\ 923 = 1\ 000\ 000 - 1$.

Consider $3\ 937\ 376\ 385\ 699\ 289_{10} = 3\ 937'376\ 385'699\ 289_{1000000}$.

By Prebase Factor Theorem, we use the sum of digit, $3\ 937 + 376\ 385 + 699\ 289 = 1'079\ 611$.

$$1 + 79\ 611 = 79\ 612.$$

The best ratio is $-4 : 1$.

By Visualize Divisibility Theorem, $x = 1, y = -4, n = 13, b = 10, (13, 4) = 1, (13, 10) = 1$ and let $m = 10p + q$.

If 13 divides $p + 4q$, then 13 divides m . So, $79612 \Rightarrow 7961 + 4(2) = 7969$;

$$\Rightarrow 796 + 4(9) = 832;$$

$$\Rightarrow 83 + 4(2) = 91;$$

$$\Rightarrow 9 + 4(1) = 13.$$

Table 4
The visualize array of $R_{10}(13) = \{-4 : 1, \dots\}$

51	52	53	54	55	56	57	58	59	60
41	42	43	44	45	46	47	48	49	50
31	32	33	34	35	36	37	38	39	40
21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10

Note. Best ratio (boundary).

5) A formula for 24 combining 8 over base 1000 and 3 over base 10.

Since 24 is the product of prime number 3 and power of prime 8.

So the number which is divisible by 8 and 3 is also divisible by 24.

Consider the number 229986788520 is divisible by 24 or not. Since 3 is prebase factor of 10, adding all digits, the result 66 is divisible by 3. Since 8 is base factor of 1000, the last digit 520 is divisible by 8.

Therefore, 229986788520 is divisible by 24.

Conclusion. The above four theorems can formulate for many divisibility rules for any number over the any base. Some numbers are although difficult over base 10, they are easy over another base. Some numbers, such as primes, have direct rules, but some composites have combined rules. It is useful for all learners and teachers in mental calculating and in manipulate.

Список литературы

1. Davenport H. The Higher Arithmetic. Cambridge: Cambridge University Press, 1999. 251 p.
2. Rina Zazkis. Divisibility: a problem solving approach through generalizing and specializing // Humanistic Mathematics Network Journal. Issue 21. 1999. Article 15. P. 34–38.
3. William Stein. Elementary number theory: primes, congruence, and secrets, a computational approach. Springer, 2009. 168 p.

References

1. Davenport H. The Higher Arithmetic. Cambridge, Cambridge University Press, 1999. 251 p.
2. Zazkis Rina. Divisibility: a problem solving approach through generalizing and specializing. *Humanistic Mathematics Network Journal*, issue 21, 1999, article 15, pp. 34–38.
3. William Stein. Elementary number theory: primes, congruence, and secrets, a computational approach. Springer, 2009. 168 p.

Информация об авторе

Тиха Бо – доктор философии (математика). Университет Мандалая (Yangon-Mandalay Street, Nat Yay Kan Village, Amarapura Township Mandalay). E-mail: tbo290483@gmail.com

Information about the author

Thiha Bo – Doctor of Philosophy (Mathematics). Mandalay University (Yangon-Mandalay Street, Nat Yay Kan Village, Amarapura Township Mandalay). E-mail: tbo290483@gmail.com

Поступила после доработки 10.01.2022

МЕХАНИКА MECHANICS

УДК 531.19

Я. Г. Грода, Н. Г. Грода, Э. Э. Бильданов

Белорусский государственный технологический университет

АНАЛИТИЧЕСКИЕ ПРИБЛИЖЕНИЯ ДЛЯ ОЦЕНКИ СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ РЕШЕТОЧНОГО ФЛЮИДА НА ДВУХУРОВНЕВОЙ НЕПРЯМОУГОЛЬНОЙ РЕШЕТКЕ

На базе кристаллической плотноупакованной плоской треугольной решетки предложена модель двухуровневой решеточной системы с энергетически неэквивалентными узлами, отвечающими потенциальным ямам двух типов, различающимся глубиной и образующим плоскую периодическую структуру. Для аналитического описания исследуемой решеточной системы предложено ее разбиение на систему двух плоских треугольных решеток, содержащих энергетически эквивалентные решеточные узлы и отличающихся как расстоянием между ближайшими узлами в подрешетке, так и общим числом узлов на ней. Для решеточного флюида с взаимодействием ближайших соседей на предложенной двухуровневой решетке развиты квазихимическое и диаграммное аналитические приближения для оценки свободной энергии системы. Предложен алгоритм моделирования равновесных свойств решеточного флюида на двухуровневой решетке по методу Монте-Карло, основанный на трансформации исходной двухуровневой решетки путем добавления к ней фиктивных решеточных узлов и ее преобразования в квадратную решетку. Построены фазовые диаграммы модели с притяжением и отталкиванием ближайших соседей. Результаты аналитических расчетов сопоставлены с данными моделирования. Установлено, что в отличие от системы с энергетически эквивалентными узлами, в решеточном флюиде с отталкиванием ближайших соседей на двухуровневой решетке имеет место фазовый переход первого рода.

Ключевые слова: решеточный флюид, двухуровневая решетка, квазихимическое приближение, диаграммное приближение, фазовая диаграмма, алгоритм Монте-Карло.

Для цитирования: Грода Я. Г., Грода Н. Г., Бильданов Э. Э. Аналитические приближения для оценки свободной энергии решеточного флюида на двухуровневой непрямоугольной решетке // Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика. 2022. № 1 (254). С. 19–27.

Ya. G. Groda, N. G. Groda, E. E. Bildanau

Belarusian State Technological University

ANALYTICAL APPROXIMATIONS FOR ESTIMATING THE FREE ENERGY OF A LATTICE FLUID ON A TWO-LEVEL NON-RECTANGULAR LATTICE

On the basis of the crystal close-packed plane triangular lattice, the model of a two-level lattice system with energetically non-equivalent sites corresponding to potential wells of two types, differing in depth and forming a plane periodic structure, is proposed. For an analytical description of the studied lattice system, it is proposed to divide it into the system of two plane triangular lattices containing energetically equivalent lattice sites and differing both in the distance between the nearest nodes in the sub-lattice and in the total number of sites on it. For the lattice fluid with interaction of the nearest neighbors on the proposed two-level lattice, quasi-chemical and diagram analytical approximations are developed to estimate the free energy of the system. An algorithm for modeling the equilibrium properties of the lattice fluid on the two-level lattice using the Monte Carlo method is proposed, based on the transformation of the original two-level lattice by adding shadow lattice sites to it and transforming it into a square lattice. The phase diagrams of the model with attraction and repulsion of the nearest neighbors are constructed. The results of analytical calculations are compared with simulation data. It has been established that, in contrast to a system with energetically equivalent nodes, a first-order phase transition takes place in a lattice fluid with repulsion of the nearest ones on a two-level lattice.

Key words: two-level lattice, quasi-chemical approximation, diagram approximation, phase diagram, Monte Carlo simulation.

For citation: Groda Ya. G., Groda N. G., Bildanau E. E. Analytical approximations for estimating the free energy of a lattice fluid on a two-level non-rectangular lattice. *Proceedings of BSTU, issue, Physics and Mathematics. Informatics*, 2022, no. 1 (254), pp. 19–27 (In Russian).

Введение. Модель решеточного газа широко используется для интерпретации экспериментальных результатов при изучении электрохимических систем [1–5]. Несмотря на то, что эта модель существенно упрощает описание протекающих в реальной физической системе процессов, даже она не допускает строго аналитического рассмотрения при учете взаимодействия между частицами. Поэтому во многих случаях межчастичные взаимодействия игнорируются вообще или учитываются в простейших приближениях среднего поля.

Большое количество и разнообразие электрохимических систем требует для их описания различных вариантов решеточных моделей – как по отношению к их симметрии (квадратные, кубические, ГЦК, ОЦК и т. д. решетки), так и по отношению к их энергетической однородности (решетки с энергетически эквивалентными и неэквивалентными узлами).

Ранее было представлено несколько версий моделей решеточного газа на решетках с энергетически неэквивалентными узлами [2–4, 6–10]. Так, например, были предложены модели [2, 3, 6, 8] со случайным распределением энергетически более глубоких и менее глубоких узлов, а также модели [4, 7, 9, 10], в которых узлы различных типов образуют симметричные структуры. В последнем случае было показано [4], что модель решеточного флюида на двухуровневой решетке может быть использована для исследования слоев интеркаляционных соединений, например графита, интеркалированного ионами лития.

При учете межчастичных взаимодействий двухуровневые решеточные модели становятся более сложными для их аналитического описания по сравнению с системами с одинаковыми решеточными узлами. Хотя последние также допускают получение точных аналитических решений лишь в случае двумерных систем при некоторых фиксированных значениях концентрации примесных частиц.

В работе [11] такая двухуровневая модель исследована с помощью декорационно-итерационного преобразования, которое позволило свести задачу к рассмотрению решеточного газа на плоской однородной квадратной решетке и провести аналитическое исследование вида фазовой диаграммы. Другие равновесные [10, 11] и диффузионные [12–19] свойства изучались с помощью компьютерного моделирования системы по методу Монте-Карло.

Ранее, в работах [20, 21], было выполнено обобщение квазихимического, диаграммного и самосогласованного диаграммного приближений для определения равновесных свойств решеточных флюидов на случай решеточных флюидов на двухуровневых решетках. В рамках предложенных приближенных подходов были исследованы термодинамические, структурные и транспортные свойства систем с взаимодействием ближайших соседей [21]. Вместе с тем необходимо отметить, что во всех указанных выше работах рассматривалась двухуровневая система, построенная на базе квадратной решетки. В настоящей работе представлены результаты развития указанных приближенных подходов для решеток с неортогональной геометрией. В частности, рассмотрено построение квазихимического и диаграммного приближений для исследования равновесных свойств решеточного флюида на двухуровневой решетке, построенной на базе плотноупакованной треугольной решетки.

Основную часть. В качестве основы для построения двухуровневой решеточной системы может быть рассмотрена кристаллическая плоскость (1, 1, 1) простой кубической решетки. В указанной плоскости атомы кристалла образуют плоскую треугольную решетку, как это изображено на рис. 1.

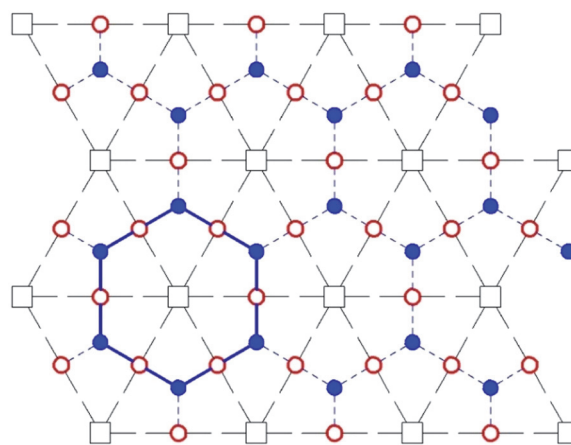


Рис. 1. Схематический вид решетки с двумя типами узлов. Квадраты соответствуют атомам кристаллической поверхности, светлые и темные круги – α - и γ -узлам решеточной модели

Взаимодействие между атомами поверхности формирует энергетический профиль, минимумы которого и являются узлами исследуемой решеточной модели, т. е. местами размещения на

поверхности примесных частиц (*adparticles*), поскольку адсорбированная на поверхности кристалла частица будет стремиться занять положение, отвечающее минимуму потенциальной энергии. Поэтому для описания поведения ансамбля таких частиц на временных интервалах, больших характерного времени релаксации системы, может быть использована модель решеточного газа. В ней минимумы потенциальной энергии отвечают модельным решеточным узлам, каждый из которых может быть либо занят частицей (и только одной), либо быть вакантным.

Геометрические особенности исходной решетки позволяют выделить два типа узлов решеточной модели. Одни из них – α -узлы – расположены между двумя соседними атомами поверхности и представлены на рис. 1 светлыми кругами. Второй тип узлов – γ -узлы – расположены в центре правильного треугольника, построенного на трех соседних атомах кристаллической поверхности. На рис. 1 γ -узлы изображены в виде темных кругов.

Таким образом, построенная решеточная система представляет собой совокупность двух плоских шестиугольных подрешеток. При этом α -подрешетка имеет решеточную постоянную $a/2$, а γ -подрешетка – $a/\sqrt{3}$, где a – расстояние между атомами поверхности.

В общем случае глубины потенциальных ям, отвечающие α - и γ -узлам, могут быть различными:

$$\varepsilon_\alpha \neq \varepsilon_\gamma; \quad \delta\varepsilon = \varepsilon_\alpha - \varepsilon_\gamma, \quad (1)$$

где $\varepsilon_\alpha, \varepsilon_\gamma$ – глубина потенциальной ямы, отвечающей решеточному узлу определенного типа; $\delta\varepsilon$ – разность глубин потенциальных ям.

Подсчет узлов на каждой из подрешеток также не представляет никакого труда. Если предположить, что исходная кристаллическая поверхность содержит M атомов, формирующих плоскую треугольную решетку с первым координационным числом $z_M = 6$, то число пар ее ближайших атомов, а значит, и число α -узлов равно

$$N_\alpha = \frac{z_M M}{2} = 3M. \quad (2)$$

В свою очередь, число γ -узлов равно числу треугольных графов, построенных на тройках ближайших узлов, которые могут быть размещены на решетке. Методика вычисления подобных величин подробно описана в монографии [21]. В частности, в рассматриваемом случае получаем

$$N_\gamma = 2M. \quad (3)$$

Таким образом, для решетки, содержащей $N = N_\alpha + N_\gamma$ решеточных узлов, получаем

$$N_\alpha = \frac{3}{5}N; \quad N_\gamma = \frac{2}{5}N. \quad (4)$$

На основании введенной подрешеточной структуры определяются концентрации частиц на подрешетках c_1^ξ ($\xi = \alpha, \gamma$), средняя концентрация частиц в системе c и параметр порядка системы δc :

$$c_1^\alpha = \frac{n_\alpha}{N_\alpha}; \quad c_1^\gamma = \frac{n_\gamma}{N_\gamma}; \quad (5)$$

$$\delta c = c_1^\gamma - c_1^\alpha; \quad c = c_1 = \frac{n_\alpha + n_\gamma}{N} = \frac{3}{5}c_1^\alpha + \frac{2}{5}c_1^\gamma; \quad (6)$$

$$c_1^\alpha = c - \frac{2}{5}\delta c; \quad c_1^\gamma = c + \frac{3}{5}\delta c, \quad (7)$$

где n_ξ ($\xi = \alpha, \gamma$) – число примесных частиц на подрешетке ξ .

Средняя концентрация вакансий в системе и концентрации вакансий на подрешетках определяются как

$$c_0 = 1 - c_1; \quad c_0^\xi = 1 - c_1^\xi; \quad \xi = \alpha, \gamma. \quad (8)$$

К особенностям построенной решеточной модели можно отнести тот факт, что при рассмотрении систем с взаимодействием только ближайших соседей решеточный флюид является невзаимодействующим в пределах каждой из подрешеток. Вместе с тем сами подрешетки взаимодействуют друг с другом, поскольку ближайшими соседями частицы, занимающей узел на подрешетке α , например, являются узлы подрешетки γ , и наоборот. Энергия такого взаимодействия в дальнейшем обозначается как J_1 .

Также можно отметить, что первое координационное число, т. е. число ближайших соседних узлов, является различным для введенных выше подрешеток. Так, например, узел подрешетки α имеет $z_\alpha = 2$ ближайших соседних узла на подрешетке γ . С другой стороны, для γ -узла число ближайших узлов на α -подрешетке равно $z_\gamma = 3$. Среднее число ближайших соседей z_1 произвольного решеточного узла определяется как

$$z_1 N = z_\alpha N_\alpha + z_\gamma N_\gamma; \quad z_1 = \frac{12}{5}. \quad (9)$$

Термодинамическое состояние построенной решеточной модели определяется заданием набора чисел заполнения $\{n_i\}$, принимающих значения $n_i = 1$ либо $n_i = 0$, если i -й узел решетки занят частицей либо вакантен, соответственно.

Компьютерное моделирование равновесных свойств рассматриваемой решеточной системы по методу Монте-Карло (МК-моделирование) выполняется в рамках стандартного алгоритма Метрополиса [22], применение которого к решеточным флюидам различных типов детально описано, например, в работе [21]. В данном случае моделирование ведется в большом каноническом ансамбле, т. е. при фиксированном химическом потенциале

системы μ и переменном числе частиц в системе. При этом исходное распределение частиц по решетке выбирается произвольным.

Процесс моделирования заключается в выборе произвольного узла решетки и изменении его состояния на противоположное (добавлении частицы, если узел был вакантен, и ее изъятии, если он был занят). После этого определяется изменение энергии δE_N , соответствующее произошедшему изменению состояния узла:

$$\delta E_N = \pm (J_1 s_1 - \mu + \varepsilon_\alpha - \delta \varepsilon_{\gamma\xi}), \quad (10)$$

где знак плюс соответствует добавлению частицы, а минус ее изъятию; s_1 – число частиц, занимающих ближайшие решеточные узлы; $\delta_{\gamma\xi}$ – символ Кронекера; индекс ξ обозначает тип подрешетки, которой принадлежит произвольно выбранный узел.

К особенностям моделирования рассматриваемой системы может быть отнесен тот факт, что для устранения различий в значениях координационных чисел для подрешеток α и γ моделируемая решеточная система может быть дополнена так называемыми фиктивными решеточными узлами, как это показано на рис. 2. Фиктивные решеточные узлы представлены на этом рисунке темными квадратами.

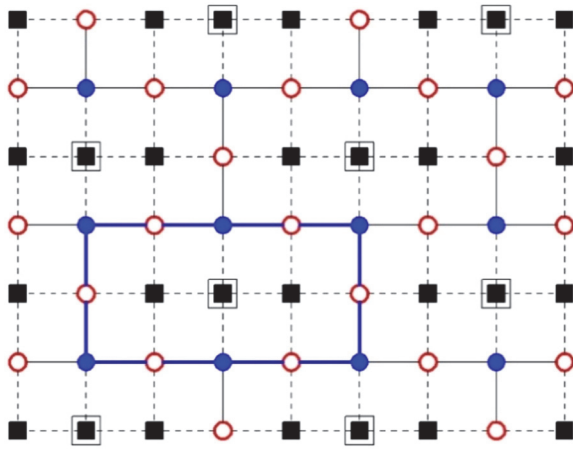


Рис. 2. Схематический вид трансформированной решетки. Светлые квадраты соответствуют атомам кристаллической поверхности, темные – фиктивным решеточным узлам, светлые и темные круги – α - и γ -узлам решеточной модели соответственно

Введение фиктивных решеточных узлов фактически позволяет преобразовать исходную решеточную структуру в квадратную решетку, в которой каждый решеточный узел имеет 4 ближайших соседа. При этом любой узел подрешетки α имеет 2 фиктивных узла среди своих ближайших соседей, а узел подрешетки γ только один соседний фиктивный узел.

При учете фиктивных решеточных узлов каждый узел моделируемой системы $m(i, j)$ может

находиться в одном из 3 возможных состояний: $m(i, j) = 1$ соответствует узлу (i, j) , занятому частицей, $m(i, j) = 0$ – вакантному решеточному узлу, $m(i, j) = -1$ – фиктивному решеточному узлу. Очевидно, что в ходе моделирования состояние фиктивных решеточных узлов не изменяется. Фактически, при случайном выборе решеточного узла системы, отвечающего фиктивному решеточному узлу, этот выбор не учитывается и узел выбирается повторно.

Если изменение состояния узла решетки приводит к понижению энергии системы ($\delta E_N \leq 0$), то новая конфигурация принимается. Если энергия системы возрастает ($\delta E_N > 0$), то изменение состояния узла принимается с вероятностью

$$W = \exp(-\beta \delta E_N); \quad \beta = (k_B T)^{-1}, \quad (11)$$

где k_B – постоянная Больцмана; T – температура.

В последнем случае, для принятия либо отклонения предлагаемого изменения состояния решеточного узла генерируется случайное число W_0 из интервала $[0; 1]$, и если $W \geq W_0$, то новая конфигурация принимается. В противном случае система возвращается в прежнее состояние. Повторение описанной процедуры n раз, где n равно числу частиц на решетке, формирует один шаг алгоритма Монте-Карло (МКШ).

В целом моделируемая система содержит $128 \times 128 = 2^{14}$ решеточных узлов. Из которых 5×2^{11} узлов являются решеточными узлами двухуровневой системы, а 3×2^{11} – фиктивными решеточными узлами. Полная процедура моделирования состоит из 30 000 шагов алгоритма Монте-Карло (МКШ). Поскольку процедура моделирования начинается со случайного распределения частиц на решетке, первые 10 000 МКШ отводятся на процедуру эквilibризации системы – переход системы из произвольного начального состояния в равновесное, и не учитываются в дальнейшем моделировании. Для уменьшения влияния размеров моделируемой системы на получаемые значения равновесных характеристик использованы периодические граничные условия.

В основе развитого в [21] подхода к построению приближенных методов определения равновесных характеристик решеточных систем лежит рассмотрение наряду с исследуемой решеточной системой подобной ей базисной решеточной системы, определяемой одночастичными средними потенциалами $\phi^{(k)}(n_i^\xi)$ взаимодействия частицы ($n_i^\xi = 1$) или вакансии ($n_i^\xi = 0$), находящейся в узле i ξ -подрешетки с узлом j , являющимся соседом порядка k ($\xi = \alpha, \gamma$; $k = 1$ соответствует ближайшим соседям и т. д.). Совместное рассмотрение двух решеточных систем позволяет представить свободную энергию исходной решетки в расчете на один решеточный узел в виде суммы двух слагаемых:

$$F = F^{(0)} + F^{(d)}, \quad (12)$$

где $F^{(0)}$ и $F^{(d)}$ – базисная и диаграммная части свободной энергии соответственно.

В силу одночастичности базисной системы выражение для соответствующей ей части свободной энергии факторизуется [20, 21]:

$$F^{(0)} = \frac{1}{5} (3c_1^\alpha \epsilon_\alpha + 2c_1^\gamma \epsilon_\gamma) + \frac{3}{5} k_B T \sum_{i=0}^1 c_i^\alpha \left(\ln c_i^\alpha - \sum_k z_k^\alpha \ln X_i^{\alpha(k)} \right) + \frac{2}{5} k_B T \sum_{i=0}^1 c_i^\gamma \left(\ln c_i^\gamma - \sum_k z_k^\gamma \ln X_i^{\gamma(k)} \right), \quad (13)$$

где

$$X_{n_i}^{\xi(k)} = \exp(-\beta \phi^{(k)}(n_i^\xi)), \quad \xi = \alpha, \gamma, \quad (14)$$

z_k^ξ – k -е координационное число для подрешетки ξ , т. е. число узлов-соседей порядка k на подрешетке ξ ($z_1^\alpha = z_\alpha, z_1^\gamma = z_\gamma$).

Диаграммная часть свободной энергии $F^{(d)}$ допускает разложение в ряд по степеням перенормированных с помощью средних потенциалов базисной системы функций Майера [21]:

$$f_{ij}^{(k)}(n_i^\xi, n_j^\zeta) = e^{-\beta(J_k n_i^\xi n_j^\zeta - \phi^{(k)}(n_i^\xi) - \phi^{(k)}(n_j^\zeta))} - 1, \quad (15)$$

где узлы i и j являются соседями порядка k ; J_k – энергия взаимодействия частиц, занимающих узлы-соседи k -го порядка; $\xi, \zeta = \alpha, \gamma$.

При этом получающийся ряд имеет наглядную графическую интерпретацию, при которой каждому его члену ставится в соответствие диаграмма-граф определенного типа. Методика построения данных графов и вычисления соответствующих весовых коэффициентов подробно описана в монографии [21].

Определяющие базисную решеточную систему средние потенциалы рассчитываются из принципа минимальной восприимчивости свободной энергии к их вариациям [23]:

$$\left(\frac{\partial F}{\partial \phi^{(k)}(n_i^\xi)} \right)_T = 0. \quad (16)$$

В свою очередь введенный соотношением (6) параметр порядка δc находится из условия экстремальности свободной энергии [21, 24]:

$$\left(\frac{\partial F(c, \delta c)}{\partial \delta c} \right)_{T, X_i^{\xi(k)}} = 0, \quad (17)$$

которое эквивалентно условию равенства химических потенциалов на подрешетках.

Удерживая различные фрагменты разложения диаграммной части свободной энергии, можно построить ряд приближенных методов вычисления свободной энергии решеточной системы. В частности, квазихимическое приближение (КХП) соответствует учету в диаграммной части свободной энергии вклада только двухвершинных графов. Характерными особенностями КХП является равенство нулю вклада в свободную энергию любой диаграммы, содержащей свободную вершину, т. е. вершину, связанную только с одной иной вершиной. В силу указанного свойства и вида удерживаемого диаграммного ряда в рамках квазихимического приближения вклад диаграммной части свободной энергии оказывается равным нулю. Еще одним важным свойством КХП является совпадение радиусов действия средних потенциалов базисной системы с радиусом действия потенциала взаимодействия в исходной решеточной системе. Последнее условие позволяет записать, что

$$X_{n_i}^\xi = X_{n_i}^{\xi(1)}; \quad X_{n_i}^{\xi(k)} = 1; \quad k > 1; \quad \xi = \alpha, \gamma. \quad (18)$$

В свою очередь применение принципа минимальной восприимчивости (16) приводит к следующей системе уравнения для определения средних потенциалов ближайших соседей:

$$X_i^\alpha = \sum_{j=0}^1 c_j^\gamma \frac{W_{ij}}{X_j^\gamma}; \quad X_i^\gamma = \sum_{j=0}^1 c_j^\alpha \frac{W_{ij}}{X_j^\alpha}, \quad (19)$$

где

$$W_{ij} = \exp(-\beta J_1 n_i^{\alpha(\gamma)} n_j^{\gamma(\alpha)}). \quad (20)$$

При заданном значении параметра порядка δc система уравнений (19) допускает аналитическое решение, что позволяет получить следующее выражение для свободной энергии системы:

$$F_{\text{КХП}} = \frac{1}{5} (2\epsilon_\gamma c_1^\gamma + 3\epsilon_\alpha c_1^\alpha) + \frac{2}{5} k_B T \sum_{i=0}^1 c_i^\gamma \ln c_i^\gamma + \frac{3}{5} k_B T \sum_{i=0}^1 c_i^\alpha \ln c_i^\alpha - \frac{6}{5} (c_1^\alpha \ln \eta_\alpha + c_1^\gamma \ln \eta_\gamma + \ln(X_0^\alpha X_0^\gamma)), \quad (21)$$

где

$$\eta_{\alpha(\gamma)} = -\frac{c_1^{\gamma(\alpha)} - c_0^{\alpha(\gamma)} - W(c_0^{\alpha(\gamma)} - c_0^{\gamma(\alpha)})}{2c_0^{\alpha(\gamma)}} + \sqrt{\left(\frac{c_1^{\gamma(\alpha)} - c_0^{\alpha(\gamma)} - W(c_0^{\alpha(\gamma)} - c_0^{\gamma(\alpha)})}{2c_0^{\alpha(\gamma)}} \right)^2 + \frac{c_1^{\alpha(\gamma)}}{c_0^{\alpha(\gamma)}} W};$$

$$X_0^\alpha X_0^\gamma = c_0^\alpha + \frac{c_1^\alpha}{\eta_\alpha} = c_0^\gamma + \frac{c_1^\gamma}{\eta_\gamma}, \quad (22)$$

$$W = \exp(-\beta J_1). \quad (23)$$

Наиболее очевидным способом уточнения результатов КХП является учет дополнительных слагаемых в разложении диаграммной части свободной энергии. В простейшем варианте такая стратегия реализуется в рамках так называемого диаграммного приближения (ДП) [25], показавшего свою эффективность для одноуровневых решеточных систем [21].

Суть диаграммного приближения состоит в том, что при его использовании средние потенциалы базисной системы принимаются равными их значениям, полученным в рамках рассмотренного выше квазихимического приближения. При этом для диаграммной части свободной энергии выдвигается дополнительное предположение о том, что вклад в свободную энергию ее диаграммной части является пропорциональным вкладу простейшего, отличного от нуля в квазихимическом приближении графа. Коэффициент пропорциональности λ определяется из условия равенства критического параметра модели $J_1 / k_B T_c$ в диаграммном приближении к его значению, полученному в ходе моделирования решеточного флюида по методу Монте-Карло.

В силу описанных ранее характерных свойств КХП первым ненулевым графом является простейший кольцевой граф. В рассматриваемом случае такой граф содержит 12 вершин, из которых 6 принадлежат α -подрешетке и 6 γ -подрешетке, и имеет весовой коэффициент, равный $1/5$. Графически указанный объект представлен на рис. 1. С учетом (22) и (23) выражение для диаграммной части свободной энергии имеет вид [25]

$$F^{(d)} = -\frac{1}{5} \lambda d^m; \quad d = (W - 1) \frac{\sqrt{c_0^\alpha c_1^\alpha c_0^\gamma c_1^\gamma}}{X_0^\alpha X_0^\gamma X_1^\alpha X_1^\gamma}, \quad (24)$$

где m – число вершин в простейшей кольцевой диаграмме. В рассматриваемом случае $m = 12$.

Таким образом, окончательное выражение для свободной энергии записывается в форме

$$F_{\text{ДП}} = F_{\text{КХП}} - \frac{1}{5} \lambda d^m. \quad (25)$$

В качестве примера решеточного флюида на двухуровневой решетке с энергетически неэквивалентными узлами рассмотрим решеточный флюид с взаимодействием ближайших соседей, на энергию взаимодействия которых наложено дополнительное условие

$$\delta \varepsilon = \frac{J_1}{2}. \quad (26)$$

Выполнение указанного условия приводит к тому, что фазовая диаграмма модели становится симметричной относительно концентрации 0,5.

Также можно отметить, что в случае системы с притяжением между частицами из условия (26) следует, что $3/5$ всех узлов составляют более глубокие узлы и $2/5$ – менее глубокие. Очевидно, что при рассмотрении системы с отталкиванием между частицами соотношение между долей более и менее глубоких решеточных узлов будет обратным.

Моделирование равновесных параметров решеточного флюида с взаимодействием ближайших соседей на представленной на рис. 3 двухуровневой решетке дает возможность определить критический параметр системы $|J_1| / k_B T_c$, который при выполнении условия (26) оказался равным 3,737.

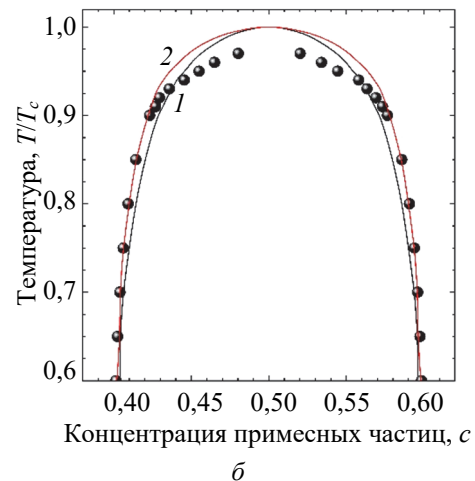
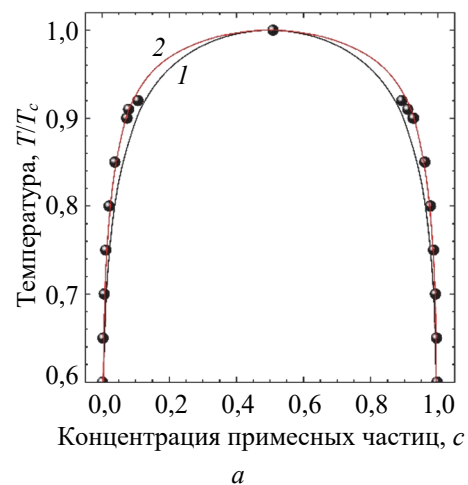


Рис. 3. Фазовая диаграмма решеточного флюида с притяжением (а) и отталкиванием (б) ближайших соседей на двухуровневой решетке. Сплошными линиями представлены результаты квазихимического (кривая 1) и диаграммного (2) приближений, точками – данные МК-моделирования

В рамках предложенного квазихимического приближения эта величина оказывается равной 3,513. Таким образом, погрешность в определении критической температуры в квазихимическом

приближении составляет около 6% как в случае притяжения, так и отталкивания между ближайшими соседями.

Введение параметра λ обеспечивает равенство критических параметров системы, найденных при ее моделировании и вычисленных в рамках диаграммного приближения. Непосредственными вычислениями установлено, что $\lambda \approx 1,10$. Достаточно малое отличие этого параметра от 1 свидетельствует о том, что даже без его введения учет первого кольцевого графа в разложении диаграммной части свободной энергии существенно повышает точность получаемых результатов. В частности, проведенные дополнительные вычисления показали, что точность в определении критического параметра системы улучшается практически на порядок и погрешность не превышает 0,8%.

Сопоставление результатов свидетельствует о том, что переход от КХП к ДП положительно сказывается на виде фазовой диаграммы, приближая ее к данным моделирования. Вместе с тем следует отметить, что отличия между результатами двух вышеуказанных приближений не столь существенны, как, например, в случае двухуровневой системы, построенной на базе квадратной решетки [20].

Заключение. Сопоставление результатов аналитических расчетов и данных моделирования для определения критической температуры модели позволяет надеяться, что развитые приближенные подходы, в первую очередь ДП, дадут возможность определять свободную энергию исследуемой системы, а значит, и все ее равновесные свойства с достаточно высокой степенью точности.

Также следует указать, что в случае решеточного флюида с отталкиванием ближайших соседей на решетке с двумя типами энергетически неэквивалентных решеточных узлов имеет место фазовый переход первого рода, что принципиально

отличает данную систему от аналогичной модели с энергетически эквивалентными узлами, в которой имеет место фазовый переход второго рода между упорядоченным и не упорядоченным состояниями системы.

Для интерпретации этого факта следует отметить, что в системе с отталкиванием решетка содержит 40% более глубоких γ -узлов и 60% менее глубоких α -узлов. При низких температурах примесные частицы занимают в первую очередь более глубокие решеточные узлы. По этой причине увеличение химического потенциала приводит к быстрому росту концентрации примесных частиц.

Очевидно, что при концентрации более 0,40 все примесные частицы не могут быть размещены только по γ -узлам. Часть избыточных частиц попадет в менее глубокие α -узлы и при этом получит 2 соседние частицы на ближайших γ -узлах. Поскольку частицы отталкиваются друг от друга, то они будут вытолкнуты в вакантные α -узлы, после чего указанный процесс повторится. В целом это приведет к тому, что при химическом потенциале $\mu > J_1$ происходит скачкообразный переход системы из состояния с преимущественно заполненными γ -узлами в состояние, при которых занятыми оказываются α -узлы. Следовательно, концентрация скачкообразно изменится с 0,4 до 0,6 и на изотерме химического потенциала имеет место плато, отвечающее фазовому переходу первого рода.

Таким образом, фазовый переход в рассматриваемой системе является фазовым переходом между двумя упорядоченными состояниями. Предложенный механизм фазового перехода полностью подтверждается данными моделирования.

Публикация выполнена при поддержке научно-исследовательского учреждения «Институт ядерных проблем» Белорусского государственного университета (проект № ХД 21-408 от 15.09.2021).

Список литературы

1. Stromme M. Li insertion into WO₃: introduction of a new electrochemical analysis method and comparison with impedance spectroscopy and the galvanostatic intermittent titration technique // *Solid State Ionics*. 2000. Vol. 131. P. 261–273.
2. Vakarin E. V., Holovko M. F. Adsorption of HCl on ice. Effects of the surface heterogeneity // *Chem. Phys. Lett.* 2001. Vol. 349. P. 13–18.
3. Bisquert J., Vikhrenko V. S. Analysis of the kinetics of ion intercalation. Two state model describing the coupling of solid state ion diffusion and ion binding processes // *Electrochim. Acta*. 2002. Vol. 47. P. 3977–3988.
4. Levi M. D., Wang C., Aurbach D., Chvoj Z. Effect of temperature on the kinetics and thermodynamics of electrochemical insertion of Li-ions into a graphite electrode // *J. Electroanal. Chem.* 2004. Vol. 562. P. 187–203.
5. Garcia-Belmonte G., Vikhrenko V., Garcia-Canadas J. Bisquert Interpretation of variations of jump diffusion coefficient of lithium intercalated into amorphous WO₃ electrochromic films // *Solid State Ionics*. 2004. Vol. 170. P. 123–127.
6. Vorotyntsev M. A., Badiali J. P. Short-range electron-ion interaction effects in charging the electroactive polymer films // *Electrochim. Acta*. 1994. Vol. 39. P. 289–306.
7. Chvoj Z., Conrad H., Chab V. Thermodynamics of adatoms diffusing on a surface with two different sites: a new type of phase transition // *Surf. Sci.* 1997. Vol. 376. P. 205–218.

8. Chvoj Z., Conrad H., Chab V. Analysis of the Arrhenius shape of adatom diffusion coefficient in surface model with two energy barriers // *Surf. Sci.* 1999. Vol. 442. P. 455–462.
9. Masin M., Chvoj Z., Conrad H. Diffusion on a face-centered cubic (111) surface in the presence of two non-equivalent adsorption sites // *Surf. Sci.* 2000. Vol. 457. P. 185–198.
10. Thermodynamic properties of a system of interacting particles adsorbed on a lattice with two nonequivalent sites / A. A. Tarasenko [et al.] // *Phys. Rev. B.* 2001. Vol. 63, art. no. 165423 (11 p.).
11. Phase diagram of a system of particles adsorbed on a lattice with two non-equivalent sites: repulsive interaction / A. A. Tarasenko [et al.] // *Surf. Sci.* 2001. Vol. 482–485. P. 396–401.
12. Tarasenko A. A., Jastrabik L. Surface diffusion of particles adsorbed on a lattice with two non-equivalent sites // *Surf. Sci.* 2002. Vol. 507–510. P. 108–113.
13. Nieto F., Tarasenko A. A., Uebing C. Criticality effects on diffusion on heterogeneous surfaces // *Appl. Surf. Sci.* 2002. Vol. 196. P. 181–190.
14. Tarasenko A. A., Jastrabik L., Muller T. Surface diffusion of particles adsorbed on an inhomogeneous lattice with two non-equivalent sites // *Surf. Sci.* 2007. Vol. 601. P. 4001–4004.
15. Tarasenko A. A., Jastrabik L. Diffusion of particles on an inhomogeneous disordered square lattice with two non-equivalent sites // *Surf. Sci.* 2008. Vol. 602. P. 2975–2982.
16. Tarasenko A. A., Jastrabik L. Diffusion of particles over triangular inhomogeneous lattice with two non-equivalent sites // *Physica A.* 2009. Vol. 388. P. 2109–2121.
17. Tarasenko A. A., Jastrabik L. Diffusion in heterogeneous lattices // *Appl. Surf. Sci.* 2010. Vol. 256. P. 5137–5144.
18. Tarasenko A. A., Jastrabik L. The studies of particle diffusion on a heterogeneous one-dimensional lattice // *Surf. Sci.* 2015. Vol. 641. P. 266–268.
19. Tarasenko A. A., Bohac P., Jastrabik L. Migration of particles on heterogeneous bivariate lattices: The universal analytical expressions for the diffusion coefficients // *Physica E.* 2015. Vol. 74. P. 556–560.
20. Groda Y. G., Lasovsky R. N., Vikhrenko V. S. Equilibrium and diffusion properties of two-level lattice systems: Quasi-chemical and diagrammatic approximation versus Monte Carlo simulation results // *Solid State Ionics.* 2005. Vol. 176. P. 1675–1680.
21. Вихренко В. С., Грода Я. Г., Бокун Г. С. Равновесные и диффузионные характеристики интеркаляционных систем на основе решеточных моделей. Минск, БГТУ, 2008. 326 с.
22. Metropolis N., Rosenbluth A. W., Rosenbluth M. N., Teller A. H. Equation of state calculation by fast computing machines // *J. Chem. Phys.* 1953. Vol. 21, no. 6. P. 1087–1092.
23. The self-consistent diagram approximation for lattice systems / G. S. Bokun [et al.] // *EPJ B.* 2000. Vol. 15. P. 297–304.
24. Groda Ya. G., Argyrakis P., Bokun G. S., Vikhrenko V. S. SCDA for 3D lattice gases with repulsive interaction // *EPJ B.* 2003. Vol. 32. P. 527–535.
25. Vikhrenko V. S., Groda Ya. G., Bokun G. S. The diagram approximation for lattice systems // *Phys. Lett. A.* 2001. Vol. 286. P. 127–133.

References

1. Stromme M. Li insertion into WO₃: introduction of a new electrochemical analysis method and comparison with impedance spectroscopy and the galvanostatic intermittent titration technique. *Solid State Ionics*, 2000, vol. 131, pp. 261–273.
2. Vakarin E. V., Holovko M. F. Adsorption of HCl on ice. Effects of the surface heterogeneity. *Chem. Phys. Lett.*, 2001, vol. 349, pp. 13–18.
3. Bisquert J., Vikhrenko V.S. Analysis of the kinetics of ion intercalation. Two state model describing the coupling of solid state ion diffusion and ion binding processes. *Electrochim. Acta*, 2002, vol. 47, pp. 3977–3988.
4. Levi M. D., Wang C., Aurbach D., Chvoj Z. Effect of temperature on the kinetics and thermodynamics of electrochemical insertion of Li-ions into a graphite electrode. *J. Electroanal. Chem.*, 2004, vol. 562, pp. 187–203.
5. Garcia-Belmonte G., Vikhrenko V., Garcia-Canadas J. Bisquert Interpretation of variations of jump diffusion coefficient of lithium intercalated into amorphous WO₃ electrochromic films. *Solid State Ionics*, 2004, vol. 170, pp. 123–127.
6. Vorotyntsev M. A., Badiali J. P. Short-range electron-ion interaction effects in charging the electroactive polymer films. *Electrochim. Acta*, 1994, vol. 39, pp. 289–306.
7. Chvoj Z., Conrad H., Chab V. Thermodynamics of adatoms diffusing on a surface with two different sites: a new type of phase transition. *Surf. Sci.*, 1997, vol. 376, pp. 205–218.
8. Chvoj Z., Conrad H., Chab V. Analysis of the Arrhenius shape of adatom diffusion coefficient in surface model with two energy barriers. *Surf. Sci.*, 1999, vol. 442, pp. 455–462.
9. Masin M., Chvoj Z., Conrad H. Diffusion on a face-centered cubic (111) surface in the presence of two non-equivalent adsorption sites. *Surf. Sci.*, 2000, vol. 457, pp. 185–198.

10. Tarasenko A. A., Chvoj Z., Jastrabik L., Nieto F., Uebing C. Thermodynamic properties of a system of interacting particles adsorbed on a lattice with two nonequivalent sites. *Phys. Rev. B*, 2001, vol. 63, art. no. 165423 (11 p.).
11. Tarasenko A. A., Chvoj Z., Jastrabik L., Nieto F., Uebing C. Phase diagram of a system of particles adsorbed on a lattice with two non-equivalent sites: repulsive interaction. *Surf. Sci.*, 2001, vol. 482–485, pp. 396–401.
12. Tarasenko A. A., Jastrabik L. Surface diffusion of particles adsorbed on a lattice with two non-equivalent sites. *Surf. Sci.*, 2002, vol. 507–510, pp. 108–113.
13. Nieto F., Tarasenko A. A., Uebing C. Criticality effects on diffusion on heterogeneous surfaces. *Appl. Surf. Sci.*, 2002, vol. 196, pp. 181–190.
14. Tarasenko A. A., Jastrabik L., Muller T. Surface diffusion of particles adsorbed on an inhomogeneous lattice with two non-equivalent sites. *Surf. Sci.*, 2007, vol. 601, pp. 4001–4004.
15. Tarasenko A. A., Jastrabik L. Diffusion of particles on an inhomogeneous disordered square lattice with two non-equivalent sites. *Surf. Sci.*, 2008, vol. 602 pp. 2975–2982.
16. Tarasenko A. A., Jastrabik L. Diffusion of particles over triangular inhomogeneous lattice with two non-equivalent sites. *Physica A*, 2009, vol. 388, pp. 2109–2121.
17. Tarasenko A. A., Jastrabik L. Diffusion in heterogeneous lattices. *Appl. Surf. Sci.*, 2010, vol. 256, pp. 5137–5144.
18. Tarasenko A. A., Jastrabik L. The studies of particle diffusion on a heterogeneous one-dimensional lattice. *Surf. Sci.*, 2015, vol. 641, pp. 266–268.
19. Tarasenko A. A., Bohac P., Jastrabik L. Migration of particles on heterogeneous bivariate lattices: The universal analytical expressions for the diffusion coefficients. *Physica E*, 2015, vol. 74, pp. 556–560.
20. Groda Y. G., Lasovsky R. N., Vikhrenko V. S. Equilibrium and diffusion properties of two-level lattice systems: Quasi-chemical and diagrammatic approximation versus Monte Carlo simulation results. *Solid State Ionics*, 2005, vol. 176, pp. 1675–1680.
21. Vikhrenko V. S., Groda Ya. G., Bokun G. S. *Ravnovesnyye i diffuzionnyye kharakteristiki interkalyatsionnykh sistem na osnove reshetochnykh modeley* [Equilibrium and diffusion characteristics of the intercalation systems on the basis of the lattice models]. Minsk, BGTU Publ., 2008. 326 p. (In Russian).
22. Metropolis N., Rosenbluth A. W., Rosenbluth M. N., Teller A. H. Equation of state calculation by fast computing machines. *J. Chem. Phys.*, 1953, vol. 21, no. 6, pp. 1087–1092.
23. Bokun G. S., Groda Ya. G., Belov V. V., Uebing C., Vikhrenko V. S. The self-consistent diagram approximation for lattice systems. *EPJ B*, 2000, vol. 15, pp. 297–304.
24. Groda Ya. G., Argyrakis P., Bokun G. S., Vikhrenko V. S. SCDA for 3D lattice gases with repulsive interaction. *EPJ B*, 2003, vol. 32, pp. 527–535.
25. Vikhrenko V. S., Groda Ya. G., Bokun G. S. The diagram approximation for lattice systems. *Phys. Lett. A*, 2001, vol. 286, pp. 127–133.

Информация об авторах

Грода Ярослав Геннадьевич – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры механики и конструирования. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: groda@belstu.by

Грода Надежда Георгиевна – заведующая лабораторией кафедры физики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: gng@tut.by

Бильданов Эльдар Эмирович – магистр технических наук, ассистент кафедры механики и конструирования. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: eldar.bildanov@gmail.com

Information about the authors

Groda Yaroslav Gennad'yevich – PhD (Physics and Mathematics), Associate Professor, Assistant Professor, the Department of Mechanics and Engineering. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: groda@belstu.by

Groda Nadezhda Georgievna – Head of the Laboratory of the Department of Physics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: gng@tut.by

Bildanau Eldar Emiravich – Master of Engineering, Assistant, the Department of Mechanics and Engineering. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: eldar.bildanov@gmail.com

Поступила после доработки 21.01.2022

УДК 51-74

В. Н. Гаранин¹, А. Э. Юницкий², С. В. Артюшевский², В. А. Овсянко², С. А. Пронкевич³¹ Белорусский государственный технологический университет² ЗАО «Струнные технологии»³ Белорусский государственный университет**РАЗРАБОТКА КОМПЬЮТЕРНОЙ МОДЕЛИ РАЗРУШЕНИЯ
НЕОДНОРОДНОГО МАТЕРИАЛА**

В представленной работе уделено внимание проблеме повышения эффективности моделирования процессов разрушения различных неоднородных материалов. В частности, основной акцент сделан на изучение процесса разрушения бетона. Представлены различные методики моделирования взаимодействия материалов с описанием их достоинств и недостатков. За основу в данной работе выбран метод Лагранжа, который, по мнению авторов, является наиболее подходящим. Использование предлагаемых в работе специальных компьютерных моделей в пакете инженерного анализа ANSYS/LS-DYNA позволяет решать с высокой степенью точности задачи прогнозирования процессов высокоскоростного разрушения сложных объектов. Использование метода Лагранжа позволяет снизить требования к вычислительному оборудованию и повысить точность расчетов за счет использования специального моделирования неоднородности среды. С целью подтверждения достоверности получаемых данных компьютерных моделей были проведены испытания на специальном полигоне, где бетонные образцы подвергались высокоскоростному воздействию со стороны снарядов (пуля). Проведенное исследование показало, что результаты численных экспериментов пулестойкости бетонных образцов с явным моделированием гранитного наполнителя приближены к результатам натурных испытаний, что подтверждает релевантность разработанных моделей и методики расчета. Полученные результаты позволяют получать достоверные результаты и при моделировании разрушения других неоднородных материалов, таких как древесина с различными дефектами.

Ключевые слова: разрушение, скорость, энергия, пуля, бетон, метод конечных элементов.

Для цитирования: Гаранин В. Н., Юницкий А. Э., Артюшевский С. В., Овсянко В. А., Пронкевич С. А. Разработка компьютерной модели разрушения неоднородного материала // Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика. 2022. № 1 (254). С. 28–37.

V. N. Garanin¹, A. E. Unitsky², S. V. Artyushevsky², V. A. Ovsyanko², S. A. Pronkevich³¹ Belarusian State Technological University² Unitsky String Technologies, Inc.³ Belarusian State University**DEVELOPMENT OF A COMPUTER MODEL
OF DESTRUCTION HETEROGENEOUS MATERIAL**

In the presented work, attention is paid to the problem of increasing the efficiency of modeling the destruction processes of various inhomogeneous materials. In particular, the main emphasis is placed on the study of the process of destruction of concrete. Various methods for modeling the interaction of materials with a description of their advantages and disadvantages are presented. For the basis of this work, the Lagrange method was chosen, which, according to the author, is the most appropriate. The use of special computer models proposed in the work in the ANSYS/LS-DYNA engineering analysis package makes it possible to solve with a high degree of accuracy the problems of predicting the processes of high-speed destruction of complex objects. The use of the Lagrange method makes it possible to reduce the requirements for computing equipment and improve the accuracy of calculations through the use of special modeling of the inhomogeneity of the medium. In order to confirm the reliability of the obtained data of computer models, tests were carried out at a special test site, where concrete samples were subjected to high-speed impact from projectiles (bullets). The study showed that the results of numerical experiments on the bullet resistance of concrete samples with explicit modeling of granite filler are close to the results of full-scale tests, which confirms the relevance of the developed models and calculation methods. The results obtained make it possible to obtain reliable results when modeling the destruction of other inhomogeneous materials, such as wood with various defects.

Key words: destruction, speed, energy, bullet, concrete, finite element method.

For citation: Garanin V. N., Unitsky A. E., Artyushevsky S. V., Ovsyanko V. A., Pronkevich S. A. Development of a computer model of destruction heterogeneous material. *Proceedings of BSTU, issue 3, Physics and Mathematics. Informatics*, 2022, no. 1 (254), pp. 28–37 (In Russian).

Введение. Процесс высокоскоростного разрушения неоднородных материалов рассматривается как с точки зрения снижения энергоемкости разрушения (при изучении процесса резания), так и с точки зрения защиты различных конструкций от разрушения (например, при создании материалов, способных выдерживать нагрузки). Данное утверждение сопоставимо с задачами, стоящими перед архитектором при проектировании здания, которое должно выдерживать различные нагрузки в процессе эксплуатации и разрушиться от воздействия нагрузок при его утилизации. Общее, что объединяет данные направления, – это использование специальных компьютерных моделей, позволяющих спрогнозировать поведение разрушающегося и разрушаемого тел при их взаимодействии еще на стадии проектирования.

Разработка моделей, позволяющих в равной степени спрогнозировать внедрение с высокой скоростью (более 50 м/с) твердого тела в неоднородный объект, является актуальной задачей для множества технологических процессов (резание древесины, разрушение бетона, краш-тесты подвижных конструкций, бронезащита и другое). Кроме того, использование пули, как разрушающего объекта, на сегодняшний день пока еще находит распространение среди различных групп людей, ставящих в том числе перед собой и недобрые цели (примером служат терроризм и вандализм).

При моделировании разрушения неоднородных материалов возникают трудности в получении достоверных данных, связанные с использованием усредненных значений их свойств. К неоднородным материалам на локальном уровне можно отнести древесину из-за наличия волокон, сучков, гнили и прочих, бетоны из-за наличия различных наполнителей и другие материалы.

Обратим внимание на проблему, существующую при обработке древесины, произрастающей на стрелковых полигонах: деревообработчики сталкиваются с большим количеством пуль, находящихся внутри нее, которые «собираются» на протяжении роста растения (рис. 1).

Как видно из рис. 1, пули (свинцовые) не были подвергнуты сильной деформации со стороны относительно мягкой древесины. Можно предположить, что внедрение пули в более твердый материал, например бетон, будет иметь иной характер деформации, поскольку пуля находится во время движения в материале под действием более высокого сопротивления, зависящего от плотности сред разрушения. Пуля двигается в материале по траектории, зависящей от неоднородности среды, расходуя свою кинетическую энергию на создание различных деформаций, являющихся причиной возникновения разрушающих напряжений, и позволяет тем самым прокладывать себе путь.



Рис. 1. Пули, извлеченные из древесины

В отличие от вышеуказанного механизма свободного внедрения, когда нет постоянного подвода кинетической энергии для разрушения материала, воздействие с постоянной скоростью острого твердого тела на анизотропный материал (например, при осуществлении резания материала) может иметь иной характер, что следует учитывать при моделировании процесса взаимодействия материалов. Например, при моделировании высокоскоростного разрушения древесины следует учитывать тот факт, что распространение волн напряжений сжатия осуществляется вдоль волокон с более высокой скоростью, чем поперек волокон из-за свойств анизотропии данного материала [1, 2]. Что касается бетона, то можно предположить, с учетом более высокой скорости звука в нем: волны будут направлены уже вдоль границ наполнителя, а это не позволяет использовать для него модели, разработанные для древесины.

Чем выше скорость взаимодействия, тем больше значения напряжений сжатия в зоне разрушения материала. Повысить скорость взаимодействия при разрушении материалов можно путем дискретного подвода энергии к внедряемому телу (инструменту) с частотой, равной одной из частот собственных колебаний объекта разрушения, что используется в перфораторах при разрушении бетона в строительстве.

Анализируя различные подходы к решению задач разрушения неоднородных материалов математическими методами [3–5], можно утверждать, что моделирование динамического разрушения строительных конструкций из таких материалов относится к нелинейным задачам со сложными контактными взаимодействиями, которые в результате приводят к возникновению больших деформаций и разрушению материалов взаимодействия.

Основными методами, которые могут применяться для решения такого рода задач с использованием пакета конечно-элементного анализа ANSYS/LS-DYNA, согласно [6], являются:

- метод Эйлера;
- произвольная постановка Лагранжа – Эйлера (ALE);

- метод дискретных элементов (DEM);
- метод Галеркина (EFG);
- метод сглаженных частиц Галеркина (SPG);
- сеточный метод Лагранжа;
- бессеточный метод сглаженных частиц (SPH).

Метод Эйлера и смешанная постановка Лагранжа – Эйлера в основном применяются для анализа поведения материалов при взаимодействии с жидкостями или газом и позволяют моделировать большие деформации. Однако эти методы имеют существенный недостаток, так как не позволяют удалять разрушившийся материал в процессе счета, что может значительно снизить точность расчетов [6].

Метод дискретных элементов основан на применении законов Ньютона и контактной механике. Данный метод широко используется в геомеханике для моделирования механического поведения твердых частиц сыпучих сред. Однако рассматриваемый метод не позволяет в пределах элементарного объема задать различные законы взаимодействия между частицами и определяющие уравнения деформирования среды. То есть этот метод не дает возможности описывать поведение конструкций из неоднородных сред [6].

Метод Галеркина является высокоточным методом решения задач со сверхбольшими деформациями. Он предъявляет повышенные требования к объему оперативной памяти и процессору ЭВМ, но за счет большой скорости сходимости решает сложные задачи быстрее классических методов. Однако, как и метод ALE, метод EFG не подходит для анализа разрушения материалов.

Метод сглаженных частиц Галеркина является относительно новым и перспективным. Он схож с методом SPH и даже имеет ряд преимуществ по сравнению с последним. Однако метод SPG до настоящего времени является малоизученным среди широкого круга пользователей и в открытом доступе практически полностью отсутствуют работы по моделированию разрушений с его использованием.

На данный момент, согласно проведенному анализу работ [7–13] по моделированию разрушения образцов конструкций из неоднородных материалов высокоскоростным нагружением, наиболее популярными остаются два последних: сеточный метод Лагранжа и бессеточный метод сглаженных частиц.

Сеточный метод Лагранжа наиболее быстрый и точный метод, при котором моделирование неоднородных конструкций выполняется сплошной средой, а разрушение моделируется удалением элементов, у которых превышен один из критериев прочности. При значительных пластических деформациях используется разрушение по деформациям, а при хрупком разрушении – по главным напряжениям.

Бессеточный метод сглаженных частиц является более требовательным к машинным ресурсам и имеет меньшую стабильность при сходимости. Этот метод позволяет моделировать практически любые деформации, при этом сохраняются преимущества Лагранжевого подхода.

Основная часть. Большинство исследований в области моделирования разрушения неоднородных материалов (бетонных образцов с наполнителем) основаны на подходе, при котором испытуемый образец конструкции моделируется сплошной средой или объемом частиц (для бессеточного метода) без учета локальных неоднородностей: твердые наполнители, волокна, поры и т. п. Для расчетов принимаются усредненные параметры материала, полученные при лабораторных испытаниях на одно- или трехосное сжатие. Такой подход дает достаточно точный результат при медленном статическом нагружении относительно большой конструкции. Однако при высокоскоростном динамическом нагружении происходят разрушения, для правильного отражения которых необходима локальная оценка изменений прочностных свойств материала конструкции с учетом наличия неоднородностей.

В настоящей работе выполняется моделирование разрушения образца бетона снарядом (пулей) с использованием разработанной методики с последующим сравнением результатов моделирования с натурными экспериментами [14].

Для повышения точности вычислительных экспериментов при скоростном нагружении бетонных образцов с разрушением применена методика моделирования гранитного наполнителя в явном виде с непосредственным указанием физико-механических свойств гранита и контактно-взаимодействия между гранитом и бетонным раствором.

Применяемый в качестве модели разрушаемого материала бетон является неоднородным хрупким материалом, имеющим сложное нелинейное поведение при динамической нагрузке. При этом в нем отмечается существенная разница в поведении при растяжении и сжатии.

Для описания нелинейного поведения бетона в условиях больших скоростей деформации и давления существует множество моделей материала. При этом критериями выбора модели являются учет скорости деформации в условии динамического нагружения, наличие в модели механизма разрушения и минимальный набор входных параметров. Таким требованиям соответствуют модель Karagozian&Case (K&C) и модифицированная модель Джонсона – Кука в пакете ANSYS/LS-DYNA.

Рассмотрим процесс моделирования высокоскоростного разрушения неоднородного материала в пакете ANSYS/LS-DYNA в явной постановке

с использованием метода Лагранжа на примере внедрения твердого тела (пули) в бетонную преграду. Для описания поведения бетона применим модель К&С, а для описания пули – модифицированную модель Джонсона – Кука. Для анализа применим схему эксперимента по внедрению пули в бетон, которая представлена на рис. 2.

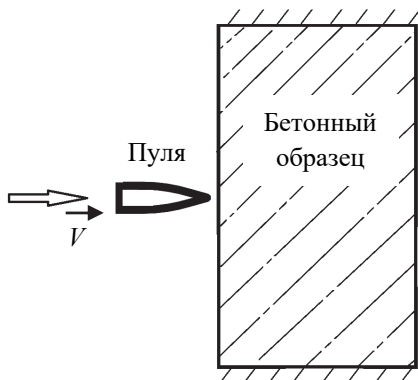


Рис. 2. Схема эксперимента

Конечно-элементная модель (КЭМ) пули показана на рис. 3, а бетонного образца с наполнителем – на рис. 4.

КЭМ пули состоит из трех частей: биметаллической оболочки 1, свинцовой рубашки 2 и стального сердечника 3 (рис. 3). Средний размер конечных элементов всех частей модели пули составляет 0,2 мм.

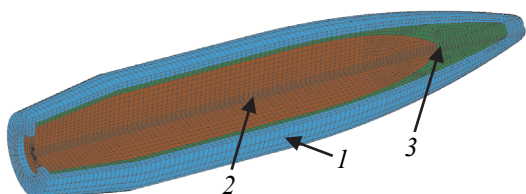


Рис. 3. Конечно-элементная модель пули

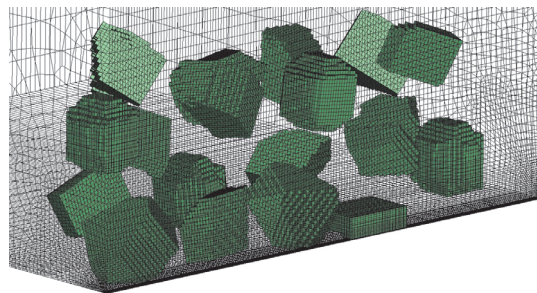


Рис. 4. Конечно-элементная модель бетонного образца с наполнителем размером 15–20 мм

Для описания поведения частей пули используется эмпирическая модель материала Джонсона – Кука, позволяющая учесть деформационное упрочнение и зависимость напряжения от скорости деформирования и температуры [6]. В данной модели динамический предел текучести σ_y , МПа, определяется по формуле

$$\sigma_y = (A + B \cdot \epsilon_p^n) \cdot \left(1 + c \cdot \ln \frac{\dot{\epsilon}_p}{\dot{\epsilon}_0} \right) \times \left(1 - \left(\frac{T - T_r}{T_m - T_r} \right)^m \right), \quad (1)$$

где A, B – параметры прочности материала, МПа; ϵ_p – эффективная пластическая деформация, %; c, n, m – безразмерные параметры материала; $\dot{\epsilon}_0$ – относительная деформация, мм/мм; T_m – температура плавления, К; T_r – комнатная температура, К.

Подробное описание использования модели Джонсона – Кука представлено в источнике [15]. Для проведения КЭМ анализа в пакете ANSYS/LS-DYNA на рис. 5–8 приведены входные параметры моделей используемых материалов частей пули, которые взяты из вышеуказанного источника [15].

MID	RO	G	E	PR	DTF	VP	RATEOP
3	7.850e-06	81.800003	200.00000	0.3000000	0.0	0.0	0.0
A	B	N	C	M	TM	TR	EPSO
0.2170000	0.5000000	0.2280000	0.0170000	0.9170000	1427.0000	293.00000	0.0010000
CP	PC	SPALL	IT	D1	D2	D3	D4
510.00000	0.0	2.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0
D5	C2/P	EROD	EFMIN	NUMINT			
0.0	0.0	0	1.000e-06	0.0			

Рис. 5. Параметры материала биметаллической оболочки пули

EOSID	C	S1	S2	S3	GAMA0	A	E0
3	4569.0000	1.4900000	0.0	0.0	2.1700001	0.0	0.0
V0	-	LCID					
0.0	0.0	0					

Рис. 6. Параметры уравнения состояния биметаллической оболочки пули

MID	RO	E	PR	BETA	XSI	CP	ALPHA
2	1.074e-05	18.000000	0.4200000	0.0	0.9000000	124.00000	2.900e-05
E0DOT	Tr	Tm	T0	FLAG1	FLAG2		
5.000e-07	293.00000	760.00000	293.00000	0.0	1.0000000		
A/SIGA	B/B	N/BETA0	C/BETA1	m/NA			
0.0240000	0.3000000	1.0000000	0.1000000	1.0000000			
Q1/A	C1/N	Q2/ALPHA0	C2/ALPHA1				
0.0	0.0	0.0	0.0				
DC/DC	PD/WC	D1/NA	D2/NA	D3/NA	D4/NA	D5/NA	
0.0	0.1750000	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	

Рис. 7. Параметры материала свинцовой рубашки пули

MID	RO	E	PR	BETA	XSI	CP	ALPHA
20	7.850e-06	210.00000	0.3300000	0.0	0.9000000	477.0000	1.200e-05
E0DOT	Tr	Tm	T0	FLAG1	FLAG2		
5.000e-07	293.00000	1800.0000	293.00000	0.0	0.0		
A/SIGA	B/B	N/BETA0	C/BETA1	m/NA			
1.2000000	50.000000	1.0000000	0.0	1.0000000			
Q1/A	C1/N	Q2/ALPHA0	C2/ALPHA1				
0.0	0.0	0.0	0.0				
DC/DC	PD/WC	D1/NA	D2/NA	D3/NA	D4/NA	D5/NA	
0.0	0.0	0.0510000	0.0180000	-3.0000000	2.000e-04	0.5500000	

Рис. 8. Параметры материала стального сердечника

Для описания нелинейного поведения бетона в условиях больших скоростей деформации и давления, как уже отмечалось выше, используем модель К&С, которая является трехинвариантной, линейной, изотропной и гипотупругопластичной и учитывает разрушения и скорость деформации [16, 17].

Модель К&С использует три параметра напряжения сдвиговой текучести, которые представлены в виде зависимостей (2)–(4).

1. Напряжение текучести поверхности модели Y_y , Па:

$$Y_y = \Delta\sigma_y = a_{oy} + \frac{p}{a_{1y} + a_{2y}p}. \quad (2)$$

2. Предельное напряжение текучести поверхности модели бетона Y_m , Па:

$$Y_m = \Delta\sigma_m = a_{om} + \frac{p}{a_{1m} + a_{2m}p}. \quad (3)$$

3. Остаточное напряжение текучести поверхности модели бетона Y_r , Па:

$$Y_r = \Delta r = a_{of} + \frac{p}{a_{1f} + a_{2f}p}. \quad (4)$$

где a_i – параметры напряжения, задающие прочность поверхности, Па; p – гидростатическое

давление, которое составляет одну треть от общего напряжения, Па.

Общий критерий текучести для модели К&С может быть рассчитан по формуле

$$f = J_2 - [F_f(I_1, \Theta)]^2 = 0, \quad (5)$$

где J_2 , I_1 , Θ – инварианты напряжений, Па; F_f – сдвиговое напряжение поверхности разрушения, Па.

Для описания поведения материала бетона в модели К&С необходимо указать ряд входных параметров, получаемых в ходе испытаний бетона на одно-, двух- и трехосное сжатие/растяжение.

Модель поведения бетона, согласно рекомендациям разработчика пакета ANSYS/LS-DYNA [6], применяется в совокупности с уравнением состояния TABULATED_COMPACTION, которое устанавливает соотношения между давлением p , Па, и внутренней энергией в единицах объема E , м³:

$$p = C(\epsilon_v) + \gamma T(\epsilon_v)E, \quad (6)$$

где $C(\epsilon_v)$ – давление относительно нулевой изомеры, Па; γ – показатель адиабаты; $T(\epsilon_v)$ – термодинамическая температура, определяемая объемной деформацией, К.

На рис. 9, 10 представлены входные параметры бетона, которые используются в данной работе для проведения анализа КЭМ в пакете ANSYS/LS-DYNA [6].

MID	RO	PR					
1	2.400e-06	0.1900000					
FT	A0	A1	A2	B1	OMEGA	A1F	
0.0036340	0.0124200	-0.040000	1.9240000	1.6000000	0.5000000	0.4417000	
Slambda	NOUT	EDROP	RSIZE	UCF	LCRATE	LOCWIDTH	NPTS
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0	0.0	0.0
lambda1	lambda2	lambda3	lambda4	lambda5	lambda6	lambda7	lambda8
0.0	8.000e-06	2.400e-05	4.000e-05	5.600e-05	7.200e-05	8.800e-05	3.200e-04
lambda09	lambda10	lambda11	lambda12	lambda13	B3	A0Y	A1Y
5.200e-04	5.700e-04	1.0000000	10.000000	100.00000	1.1500000	0.0093470	0.6250000
eta1	eta2	eta3	eta4	eta5	eta6	eta7	eta8
0.0	0.8500000	0.9700000	0.9900000	1.0000000	0.9900000	0.9700000	0.5000000
eta09	eta10	eta11	eta12	eta13	B2	A2F	A2Y
0.1000000	0.0	0.0	0.0	0.0	1.3500000	2.8169999	6.1310000

Рис. 9. Параметры материала бетонного образца

EV1	EV2	EV3	EV4	EV5
0.0	-0.0015000	-0.0043000	-0.0101000	-0.0305000
EV6	EV7	EV8	EV9	EV10
-0.0513000	-0.0726000	-0.0943000	-0.1740000	-0.2080000
C1	C2	C3	C4	C5
0.0	0.0220420	0.0480517	0.0771470	0.1465800
C6	C7	C8	C9	C10
0.2210820	0.3136580	0.4798550	2.8015440	4.2848701
K1	K2	K3	K4	K5
14.690000	14.690000	14.900000	15.650000	18.620001
K6	K7	K8	K9	K10
21.600000	24.570000	26.820000	6034.0000	73.470001

Рис. 10. Параметры уравнения состояния бетонного образца

Визуализация результатов моделирования в пакете ANSYS/LS-DYNA процесса внедрения пули в бетон представлена на рис. 11.

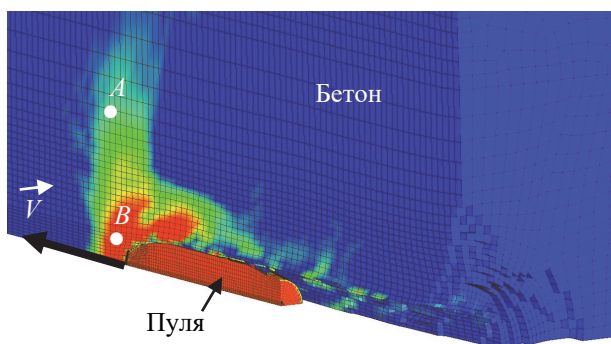


Рис. 11. Напряжения сжатия в модели бетона без наполнителя: точка A – $\sigma = 10$ МПа, точка B – $\sigma = 38$ МПа

На рис. 12 показаны графики изменения скорости сердечника пули при моделировании процесса разрушения бетонного образца в пакете ANSYS/LS-DYNA с применением и без применения гранитных наполнителей. Как видно из рис. 12, замедление пули происходит быстрее в случае явного моделирования гранитного наполнителя, поскольку снаряд на своем пути воспринимает локальные, более прочные гранитные преграды, и теряет на создание разрушающих напряжений больше энергии.

С целью оценки достоверности применяемой расчетной модели проведены натурные испытания процесса разрушения бетонной конструкции пулей. Суть эксперимента заключается в обстреле бетонных образцов из винтовки СВД с дистанции 50 м бронебойными пулями калибра 7.62R54 с последующим изучением состояния образца и замером последствий пулевого воздействия.

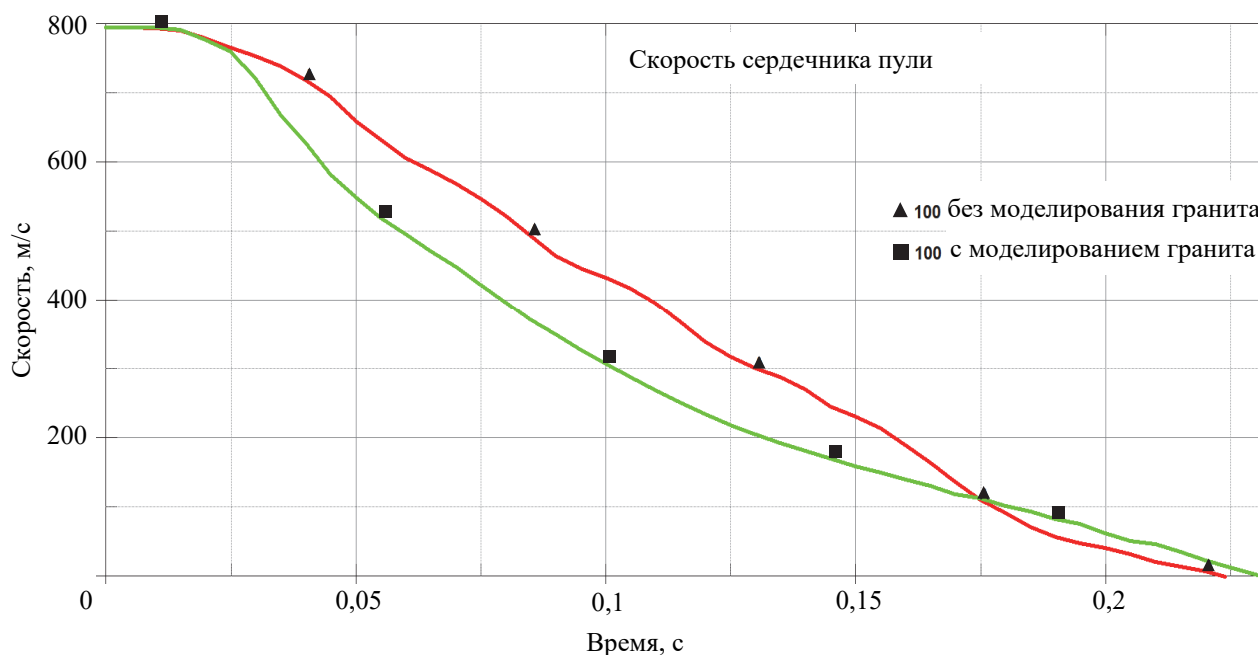


Рис. 12. Изменение скорости сердечника пули

Для изготовления бетонных образцов с прочностью на сжатие 40 МПа использованы материалы: портландцемент ЦЕМ I 42,5Н; песок карьерный; гранитный щебень с фракцией 15–20 мм; вода.

Масса компонентов раствора, используемых для изготовления бетонных образцов массой 50 кг, представлена в табл. 1.

Таблица 1

Масса компонентов образца

Портландцемент, кг	Песок, кг	Щебень, кг	Вода, кг
8,4	13,8	24,4	3,4

Выдержка бетонных образцов для набора прочности до проведения испытаний, согласно нормативной документации на бетон, составила 28 дней.

С целью уменьшения влияния краевых эффектов выстрелы производились в образцы по вершинам равностороннего треугольника со сторонами 125 мм, с отступом от края образца не менее 100 мм.

Кроме того, при каждом выстреле фиксировались состояние и характер разрушения образца, глубина проникновения пули в образец и размеры отколотых частей на его лицевой стороне.

Общий вид бетонного образца после трех выстрелов показан на рис. 13.

В табл. 2 сведены усредненные результаты сравнения натуральных испытаний и численных расчетов величины проникновения пули в образец при явном моделировании бетона с гранитным наполнителем и без него.



Рис. 13. Фото испытываемого образца: 1, 2, 3 – места внедрения трех пуль в образец

Таблица 2

Результаты сравнения натуральных и численных экспериментов

Показатель	Без наполнителя	С наполнителем	Натурный эксперимент
Проникновение, мм	107,5	71	78,36
Погрешность, %	37,2	9,39	–

В свою очередь пули, которые внедрялись в бетон, получали значительные повреждения (рис. 14), что указывает на высокие напряжения, возникающие при взаимодействии исследуемых материалов.



Рис. 14. Пуля, извлеченная из бетонного образца

Заключение. Проведенные натурные испытания процесса разрушения бетонных образцов показали: моделирование бетонных образцов с гранитным наполнителем позволяет значительно

повысить достоверность получаемых данных, что подтверждает релевантность разработанных моделей и методики расчета, представленных в работе.

Дальнейшие исследования в этом направлении вызывают научный интерес с точки зрения влияния особенностей объектов и способов высокоскоростного взаимодействия (в частности, изучение дальнейшего влияния форм объектов внедрения и включений, а также резонансные эффекты взаимодействия).

Интересно также применение предлагаемого пакета и при моделировании способа подведения энергии в зону разрушения, рассмотрении для примера процесса попадания нескольких пуль в одно место с определенным интервалом времени, что может послужить целью дальнейших исследований в данном направлении.

Список литературы

1. Боровиков А. М., Уголев Б. Н. Справочник по древесине. М.: Лесная пром-сть, 1989. 293 с.
2. Гаранин В. Н. Обоснование скорости резания древесины с использованием модели обработки анизотропного материала // Труды БГТУ. Сер. 2, Лесное хозяйство, природопользование и переработка возобновляемых ресурсов. 2020. № 2 (236). С. 299–305.
3. Lai J. Properties and Modeling of Ultra-High-Performance. Concrete Subjected to Multiple Bullet Impacts // Journal of Materials in Civil Engineering. 2018. Vol. 30. 10 p. URL: https://www.researchgate.net/publication/326802066_Properties_and_Modeling_of_Ultra-High-Performance_Concrete_Subjected_to_Multiple_Bullet_Impacts (дата обращения: 22.09.2021).
4. Mohotti D., Ngo T., Mendis P. Numerical Simulation of Impact and Penetration of Ogival Shaped Projectiles through Steel Plate Structures. 2007. 13 p. URL: https://www.academia.edu/17321638/Numerical_Simulation_of_Impact_and_Penetration_of_Ogival_Shaped_Projectiles_through_Steel_Plate_Structures (дата обращения: 24.09.2021).
5. Zochovski P. Ballistic Impact Resistance of Bulletproof Vest Inserts Containig Printed Titanium Structures // MDPI. Metals. 2021. No. 11. 23 p. URL: <https://www.mdpi.com/2075-4701/11/2/225> (дата обращения: 24.09.2021).
6. LS-DYNA Keyword User's Manual. Vol. 2. Materials model. Livermore Software Technology Corporation. 2019. 1613 p.
7. Damage and Failure Mechanism of Bullets Impact Sapphire based on LS-DYNA / L. Siyu [et al.] // Advances in Engineering Research. 2018. Vol. 146. P. 178–182.
8. Nyanor P., Hamada A. S., Hassan M. A. Ballistic Impact Simulation of Proposed Bullet Proof Vest Made of TWIP Steel, Water and Polymer Sandwich Composite Using FE-SPH Coupled Technique. Key Engineering materials. 2018. Vol. 786. P. 302–313.
9. Sai L., Weigui Z., Zhenhua L. An FEM-SPH coupled model for simulating penetration of armor-piercing bullet into ceramic composite armors and glass composite armors // Explosion and Shock Waves. 2021. Vol. 41. No. 1. 12 p. URL: <https://pubs.cstam.org.cn/article/doi/10.11883/bzycj-2020-0069?viewType=HTML> (дата обращения: 30.09.2021).
10. Fras T., Murzyn A., Pawlowski P. Defeat mechanism provided by slotted add-on bainitic plates against small-calibre 7.62 mm ×51 AP projectiles // International Journal of Impact Engineering. 2017. No. 103. P. 241–253.
11. Soriano-Moranchel F. Simulation of bullet Fragmentation and Penetration in Granular Media // MDPI, Materials. 2020. No. 13. 13 p. URL: <https://www.mdpi.com/1996-1944/13/22/5243> (дата обращения: 30.09.2021).
12. Schwer L. Aluminum plate perforation: a comparative case study using Lagrange with erosion, multi-material ALE, and smooth particle hydrodynamics // 7th European LS-DYNA Conference. 2009. 28 p. URL: <https://www.semanticscholar.org/paper/ALUMINUM-PLATE-PERFORATION-%3A-A-COMPARATIVE-CASE-%2C-%2C-Schwer/822efc3adc2f42333e0317e75cf4fb7a9659d8bd> (дата обращения: 30.09.2021).
13. Banerjee A., Dhar S., Acharya S., Datta D., Nayak N. Numerical simulation of ballistic impact of armor steel plate by typical armour piercing projectile // Procedia Engineering. 2017. No 173. P. 347–354.
14. Разработать и внедрить методику компьютерного моделирования пулестойкой защиты строительных конструкций: отчет о НИР (заключ.) / ЗАО «Струнные технологии»; рук. С. В. Артюшевский. Минск, 2021. 104 с. № ГР 20212668.

15. Murugesan M., Jung D. W. Johnson cook material and failure model parameters estimation of AISI-1045 medium carbon steel for metal forming applications. *Materials*, 2019. 12. 609. DOI: <https://dx.doi.org/10.3390/ma12040609>. URL: <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC6416717/pdf/materials-12-00609.pdf> (дата обращения: 30.09.2021).

16. Clearly P. W., Monaghan J. J. Conduction modelling using smoothed particle hydrodynamics // *Comput. Phys.* 1999. Vol. 148. No 1. P. 227–264.

17. Karajan N. Particles as Discrete Elements in LS-DYNA: Interaction with themselves as well as Deformation or Rigid Structures // 11th LS-DYNA Forum, Ulm. 2012. 25 p. URL: <https://docplayer.net/65403830-Particles-as-discrete-elements-in-ls-dyna-interaction-with-themselves-as-well-as-deformable-or-rigid-structures.html> (дата обращения: 04.10.2021).

References

1. Borovikov A. M., Ugolev B. N. Handbook of wood, Moscow, Lesnaya promyshlennost' Publ., 1989. 293 p. (In Russian).

2. Garanin V. N. Substantiation of wood cutting speed using anisotropic material processing model. *Trudy BGTU* [Proceeding of BSTU], issue 1, Forestry. Nature Management. Processing of Renewable Resources, 2020, pp. 299–305 (In Russian).

3. Lai J. Properties and Modeling of Ultra-High-Performance Concrete Subjected to Multiple Bullet Impacts. *Journal of Materials in Civil Engineering*, 2018, vol. 30. 10 p. Available at: https://www.researchgate.net/publication/326802066_Properties_and_Modeling_of_Ultra-High-Performance_Concrete_Subjected_to_Multiple_Bullet_Impacts (accessed 22.09.2021).

4. Mohotti D., Ngo T., Mendis P. Numerical Simulation of Impact and Penetration of Ogival Shaped Projectiles through Steel Plate Structures, 2007. 13 p. Available at: https://www.academia.edu/17321638/Numerical_Simulation_of_Impact_and_Penetration_of_Ogival_Shaped_Projectiles_through_Steel_Plate_Structures (accessed 24.09.2021).

5. Zochovski P. Ballistic Impact Resistance of Bulletproof Vest Inserts Containig Printed Titanium Structure. *MDPI. Metals*, 2021, no. 11. 23 p. Available at: <https://www.mdpi.com/2075-4701/11/2/225> (accessed 24.09.2021).

6. LS-DYNA Keyword User's Manual. Vol. 2. Materials model. Livermore Software Technology Corporation Publ., 2019. 1613 p.

7. Siyu L. [et al.]. Damage and Failure Mechanism of Bullets Impact Sapphire based on LS-DYNA. *Advances in Engineering Research*, 2018, vol.146, pp. 178–182.

8. Nyanor P., Hamada A. S., Hassan M. A. Ballistic Impact Simulation of Proposed Bullet Proof Vest Made of TWIP Steel, Water and Polymer Sandwich Composite Using FE-SPH Coupled Technique. *Key Engineering materials*, 2018, vol. 786, pp. 302–313.

9. Sai L., Weigui Z., Zhenhua L. An FEM-SPH coupled model for simulating penetration of armor-piercing bullet into ceramic composite armors and glass composite armors. *Explosion and Shock Waves*, 2021, vol. 41, no. 1. 12 p. Available at: <https://pubs.cstam.org.cn/article/doi/10.11883/bzycj-2020-0069?viewType=HTML> (accessed 30.09.2021).

10. Frasz T., Murzyn A., Pawlowski P. Defeat mechanism provided by slotted add-on bainitic plates against small-calibre 7.62 mm ×51 AP projectiles. *International Journal of Impact Engineering*, 2017, no. 103, pp. 241–253.

11. Soriano-Moranchel, F. Simulation of bullet Fragmentation and Penetration in Granular Media. *MDPI, Materials*, 2020, no. 13. 13 p. Available at: <https://www.mdpi.com/1996-1944/13/22/5243> (accessed 30.09.2021).

12. Schwer L. Aluminum plate perforation: a comparative case study using Lagrange with erosion, multi-material ALE, and smooth particle hydrodynamics. *7th European LS-DYNA Conference*, 2009. 28 p. Available at: <https://www.semanticscholar.org/paper/ALUMINUM-PLATE-PERFORATION-%3A-A-COMPARATIVE-CASE-%2C-%2C-Schwer/822efc3adc2f42333e0317e75cf4fb7a9659d8bd> (accessed 30.09.2021).

13. Banerjee A., Dhar S., Acharyya S., Datta D., Nayak N. Numerical simulation of ballistic impact of armor steel plate by typical armour piercing projectile. *Procedia Engineering*, 2017, no 173, pp. 347–354.

14. *Razrabotat' i vnedrit' metodiki komn'yuternogo modelirovaniya pulestoykoy zashchity stroitel'nykh konstruktsiy: otkhet o NIR (zaklyuch.)* [To develop and introduce a methodology for computer modeling of bulletproof protection of building structures: report on research (concluding)]. CJSC “String Technologies”; supervizor S. V. Artyushevsky. Minsk, 2021. 104 p. No. GR 20212668.

15. Murugesan M., Jung D. W. Johnson cook material and failure model parameters estimation of AISI-1045 medium carbon steel for metal forming applications. *Materials*, 2019; 12, 609. DOI: <https://dx.doi.org/10.3390/ma12040609>. Available at: <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC6416717/pdf/materials-12-00609.pdf> (accessed 30.09.2021).

16. Clearly P. W., Monaghan J. J. Conduction modelling using smoothed particle hydrodynamics. *Comput. Phys*, 1999, vol. 148, no 1, pp. 227–264.

17. Karajan N. Particles as Discrete Elements in LS-DYNA: Interaction with themselves as well as Deformation or Rigid Structures. *11th LS-DYNA Forum, Ulm*, 2012. 25 p. Available at: <https://docplayer.net/65403830-Particles-as-discrete-elements-in-ls-dyna-interaction-with-themselves-as-well-as-deformable-or-rigid-structures.html> (accessed 04.10.2021).

Информация об авторах

Гаранин Виктор Николаевич – кандидат технических наук, доцент кафедры деревообрабатывающих станков и инструментов. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: dosy@belstu.by

Юницкий Анатолий Эдуардович – доктор философии транспорта, генеральный конструктор, ООО «Астроинженерные технологии»; генеральный конструктор. ЗАО «Струнные технологии» (220089, г. Минск, ул. Железнодорожная, 33, Республика Беларусь). E-mail: a@unitsky.com

Артюшевский Сергей Владимирович – заместитель генерального конструктора по науке. ЗАО «Струнные технологии» (220089, г. Минск, ул. Железнодорожная, 33, Республика Беларусь). E-mail: s.artushevskiy@unitsky.com

Овсянко Владимир Александрович – начальник группы расчета динамики систем КБ «Инженерные расчеты» ЗАО «Струнные технологии» (220089, г. Минск, ул. Железнодорожная, д. 33, Республика Беларусь). E-mail: v.ovsyanko@unitsky.com

Пронкевич Сергей Александрович – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры био- и наномеханики. Белорусский государственный университет (220030, г. Минск, пр-т Независимости, 4, Республика Беларусь). E-mail: pronkevichsa@bsu.by

Information about the authors

Garanin Victor Nikolaevich – PhD (Engineering), Assistant Professor, the Department of Woodworking Machines and Tools. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: dosy@belstu.by

Unitsky Anatoly Eduardovich – PhD in Transport, General Design Engineer. Astroengineering Technologies LLC; General Design Engineer. Unitsky String Technologies, Inc. (33, Zheleznodorozhnaya str., 220089, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: a@unitsky.com.

Artyushevsky Sergey Vladimirovich – Deputy General Designer for Science of Unitsky String Technologies, Inc. (33, Zheleznodorozhnaya str., 220089, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: s.artushevskiy@unitsky.com

Ovsyanko Vladimir Aleksandrovich – Head of the Engineering Calculations Group. Unitsky String Technologies, Inc. (33, Zheleznodorozhnaya str., 220089, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: v.ovsyanko@unitsky.com

Pronkevich Sergey Aleksandrovich – PhD (Physical and Mathematical), Assistant Professor, the Department of Bio- and Nanomechanics. Belarusian State University (4, Nezavisimosti Ave, 220030, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: pronkevichsa@bsu.by

Поступила после доработки 25.02.2022

ФИЗИКА PHYSICS

УДК 535.37+541.65+543.4

Н. Н. Крук¹, Д. В. Кленецкий¹, Л. Л. Гладков², В. Маес³
¹Белорусский государственный технологический университет
²Белорусская государственная академия связи
³Хассельтский университет (Бельгия)

ВЛИЯНИЕ АСИММЕТРИИ МАКРОЦИКЛА НА МОЛЕКУЛЯРНУЮ СТРУКТУРУ NH-ТАУТОМЕРОВ ПРОИЗВОДНЫХ СВОБОДНОГО ОСНОВАНИЯ КОРРОЛА

С использованием метода функционала плотности рассчитана равновесная молекулярная конформация длинноволнового (T1) и коротковолнового (T2) NH-таутомеров свободных оснований незамещенного коррола и трех производных с различной архитектурой периферического замещения. Установлено, что длина связи C₁C₁₉ в дипиррольном фрагменте существенно различается для двух NH-таутомеров. Уменьшение длины связи C₁C₁₉ при переходе от длинноволнового T1 таутомера к коротковолновому T2 таутомеру обусловлено ростом непланарности ди-пиррольного фрагмента, который, в свою очередь, приводит к уменьшению силы стерических взаимодействий между заместителями в положениях C₂ и C₁₈ пиррольных колец. Величина двугранного угла между пирролениновым кольцом, которое протонируется, и средней плоскостью макроцикла обратно пропорциональна длине связи C₁C₁₉ для двух NH-таутомеров. Из-за различного положения пирроленинового кольца данная зависимость более выражена для таутомера T1. У таутомера T2 пирролениновое кольцо отклоняется от средней плоскости макроцикла на меньший угол благодаря наличию внутримолекулярной водородной связи. Результатом таких структурных различий является снижение основности макроцикла таутомера T2 по сравнению с таутомером T1. На основании полученных результатов сделан вывод о том, что асимметричное строение макроцикла корролов обуславливает ключевую роль внутримолекулярных взаимодействий в дипиррольном фрагменте в формировании молекулярной конформации макроцикла.

Ключевые слова: коррол, NH-таутомеры, неплоскостные искажения, периферическое замещение.

Для цитирования: Крук Н. Н., Кленецкий Д. В., Гладков Л. Л., Маес В. Влияние асимметрии макроцикла на молекулярную структуру NH-таутомеров производных свободного основания коррола // Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика. 2022. № 1 (254). С. 38–43.

M. M. Kruk¹, D. V. Klenitsky¹, L. L. Gladkov², W. Maes³
¹Belarusian State Technological University
²Belarusian State Academy of Communications
³Hasselt University (Belgium)

MACROCYCLE ASYMMETRY INFLUENCE ON THE MOLECULAR STRUCTURE OF NH-TAUTOMERS OF THE FREE BASE CORROLE DERIVATIVES

Equilibrium molecular conformation of the long-wavelength (T1) and short-wavelength (T2) NH-tautomers of the free base unsubstituted corrole and three derivatives with different architecture of peripheral substitution has been calculated with density functional method. It was found that the C₁C₁₉ bond length in the dipyrrole fragment was substantially different for two NH-tautomers. The shortening of the C₁C₁₉ bond length in going from the long-wavelength T1 tautomer to the short-wavelength T1 tautomer was due to increase in the nonplanarity of the dipyrrole fragment, which, in its turn, led to the decrease in the strength of the steric interactions between the substituents in the C₂ and C₁₈ positions of the pyrrolic rings. The dihedral angle between the pyrroline ring to be protonated and the macrocycle mean plane is reciprocal to the C₁C₁₉ bond length for both NH-tautomers. Due to different position

of the pyrrolenine ring this dependence is more pronounced for the T1 tautomer. In case of the T2 tautomer the pyrrolenine ring deviate from the macrocycle mean plane for the lower angle due to the presence of the intramolecular hydrogen bonding. As a result of such structural differences the macrocycle basicity of the T2 tautomer decreased compared to that of the T1 tautomer. Based on the obtained results it was concluded that asymmetric macrocycle structure provided for the key role of the intramolecular interactions in the dipyrrole fragment for the macrocycle molecular conformation.

Key words: corrole, NH-tautomers, nonplanar distortions, peripheral substitution.

For citation: Kruk M. M., Klenitsky D. V., Gladkov L. L., Maes W. Macrocycle asymmetry influence on the molecular structure of NH-tautomers of the free base corrole derivatives. *Proceedings of BSTU, issue 3, Physics and Mathematics. Informatics*, 2022, no. 1 (254), pp. 38–43 (In Russian).

Введение. Асимметричное строение макроцикла корролов, которое обусловлено заменой одного из метиновых мостиков между пиррольными кольцами на C_aC_a связь, приводит к тому, что структурные элементы макроцикла являются неэквивалентными [1]. С одной стороны, это можно рассматривать просто как различия длин связей и валентных углов у одинаковых молекулярных фрагментов. Но, с другой стороны, это приводит к тому, что некоторые структурные элементы оказываются очень чувствительными к изменению архитектуры периферического замещения, состоянию кислотно-основных равновесий в ядре макроцикла и др. Этому также способствует сокращение размеров ядра макроцикла и наличие дополнительного протона в ядре, обуславливающие формирование непланарной конформации тетрапиррольного макроцикла [1, 2].

Ранее нами было показано, что молекулярная конформация макроцикла свободных оснований корролов существенно зависит от архитектуры замещения и типа периферических заместителей [1–3]. Было установлено, что в зависимости от архитектуры периферического замещения молекулы свободных оснований корролов можно разделить на группы, различающиеся локализацией стерических взаимодействий периферических заместителей, при этом для каждой из групп характерны определенные значения параметра ΔZ , который показывает отклонение атомов макроцикла от его средней плоскости. Ряд структурных элементов изменяется параллельно изменению величины параметра ΔZ , однако конформационные изменения отдельных фрагментов определяются локальным взаимодействием соседних периферических заместителей. В качестве одного из таких фрагментов была предложена связь C_1C_{19} в дипиррольном фрагменте, длина которой может быть сопоставлена с размерами ядра тетрапиррольного макроцикла и, по-видимому, отражает баланс непланарных и планарных структурных изменений в макроцикле [3]. В частности, была установлена корреляция между длиной связи C_1C_{19} и двугранным углом

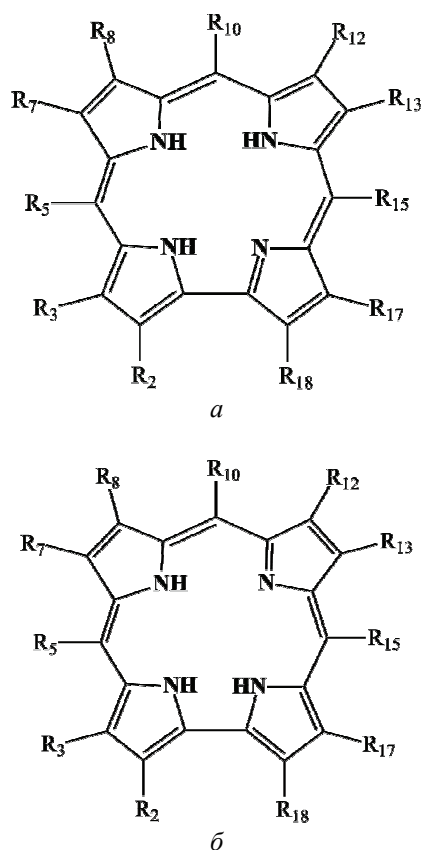
между пиррольным кольцом, которое протонируется, и средней плоскостью макроцикла. На основании этой корреляции было предложено, что основность макроцикла длинноволнового NH таутомера, которая связывается с выходом протонируемого кольца из плоскости макроцикла, можно контролировать путем модуляции длины связи C_1C_{19} [3].

Оптимизация молекулярной структуры исследованных соединений в вышеупомянутых работах была проведена с использованием полуэмпирических методов. Квантово-химические расчеты, выполненные полуэмпирическими методами, дают верные тенденции изменений в молекулярной структуре и электронных спектрах поглощения для семейств тетрапиррольных соединений с последовательно модифицированной молекулярной структурой [4]. Однако молекулярная конформация, рассчитанная таким образом, характеризуется симметрией не выше C_{2v} из-за альтернирования длин одиночных и двойных связей в макроцикле и формирования «резонансной» структуры [5]. Данный результат обусловлен отсутствием учета электронной корреляции в применяемых методах, и реалистичные структуры симметрии D_{2h} могут быть получены путем оптимизации молекулярной геометрии с использованием методов, учитывающих электронную корреляцию [4, 6]. Способы учета электронной корреляции были предложены на основе теории возмущений второго порядка Меллера – Плессета и метода функционала плотности [5]. Данное обстоятельство побудило нас выполнить оптимизацию геометрии макроцикла семейства свободных оснований корролов с различной архитектурой периферического замещения методом функционала плотности и сопоставить результаты с полученными ранее полуэмпирическими методами.

В настоящей работе нами рассчитана молекулярная конформация длинноволновых и коротковолновых NH таутомеров (далее по тексту обозначенных, соответственно, как таутомеры T1 и T2) свободных оснований корролов. Проанализирована взаимозависимость между

длиной связи C_1C_{19} в дипиррольном фрагменте и величинами, характеризующими неплоскостные искажения макроцикла: параметра $\Delta 23$, двугранного угла между средней плоскостью макроцикла и протонирующимся пиррольным кольцом (φ_D и φ_C соответственно для таутомеров T1 и T2), и внешних двугранных углов χ_i между соседними пиррольными кольцами.

Основная часть. Структура исследованных в настоящей работе производных свободного основания коррола приведена на рис. 1



- 1 – $R_2 = R_3 = R_5 = R_7 = R_8 = R_{10} = R_{12} = R_{13} = R_{15} = R_{17} = R_{18} = H$
- 2 – $R_8 = R_{12} = n$ -бутил
 $R_7 = R_{13} =$ метил
 $R_2 = R_3 = R_5 = R_{10} = R_{15} = R_{17} = R_{18} = H$
- 3 – $R_8 = R_{12} = n$ -бутил
 $R_2 = R_3 = R_7 = R_{13} = R_{17} = R_{18} =$ метил
 $R_5 = R_{10} = R_{15} = H$
- 4 – $R_2 = R_3 = R_7 = R_8 = R_{12} = R_{13} = R_{17} = R_{18} = H$
 $R_{10} = 4,6$ -дихлоропиримидин-5-ил
 $R_5 = R_{15} =$ мезитил

Рис. 1. Структура NH таутомеров исследованных соединений:

а – таутомер T1; *б* – таутомер T2.

Заместители в макроцикле обозначены согласно нумерации атомов по номенклатуре IUPAC

Архитектура периферического замещения выбиралась так, чтобы обеспечить различную

локализацию стерических взаимодействий на периферии тетрапиррольного макроцикла и, таким образом, проследить их влияние на связь C_1C_{19} в дипиррольном фрагменте.

У незамещенного коррола **1** стерические взаимодействия на периферии макроцикла отсутствуют, поэтому его логично принять за реперное соединение. У соединения **2** алкильные заместители присоединены к C_b атомам пиррольных колец *B* и *C*, а у соединения **3** они расположены на всех четырех пиррольных кольцах. Различие между соединениями **2** и **3** заключается в том, что у последнего есть стерические взаимодействия между алкильными группами, присоединенными к различным пиррольным кольцам в положениях C_2 (пиррол *A*) и C_{18} (пиррол *D*). Соединение **4** замещено по C_m атомам макроцикла арильными фрагментами, которые содержат в *орто*-положениях либо объемные метильные группы, либо атомы хлора. Данные *орто*-заместители являются источником стерических напряжений из-за взаимодействия с макроциклическими протонами в положениях $C_3, C_7, C_8, C_{12}, C_{13}$ и C_{17} .

Переходя к анализу рассчитанной молекулярной геометрии, необходимо указать, что длина связи C_1C_{19} в дипиррольном фрагменте двух NH-таутомеров принципиально различается. Очевидно, что это является результатом расположения пиррольных протонов в ядре макроцикла. У таутомера T1 протоны находятся в дипиррометеновых фрагментах, которые характеризуются большим расстоянием между атомами азота пиррольных колец [1]. У таутомера T2 пара пиррольных протонов расположена в дипиррольном фрагменте макроцикла, и они испытывают сильные стерические возмущения. В результате макроцикл деформируется и пиррол *A* располагается под большим углом по отношению к средней плоскости макроцикла. Увеличение двугранного угла между пирролами *A* и *D* приводит к уменьшению стерических взаимодействий протонов (заместителей) в положениях C_2 и C_{18} , которое, в свою очередь, приводит к уменьшению длины связи C_1C_{19} .

На рис. 2 приведена зависимость длины связи C_1C_{19} от величины внешнего двугранного угла χ_4 между пиррольными кольцами *A* и *D* для трех соединений (**1**, **2** и **4**), у которых положения C_2 и C_{18} не замещены. Анализ графика указывает на то, что большие локальные отклонения от планарности в дипиррольном фрагменте макроцикла таутомера T2 приводят к тому, что связь C_1C_{19} становится короче на 0,5 пм. Напротив, большая копланарность дипиррольного фрагмента макроцикла таутомера T1 обуславливает растяжение связи.

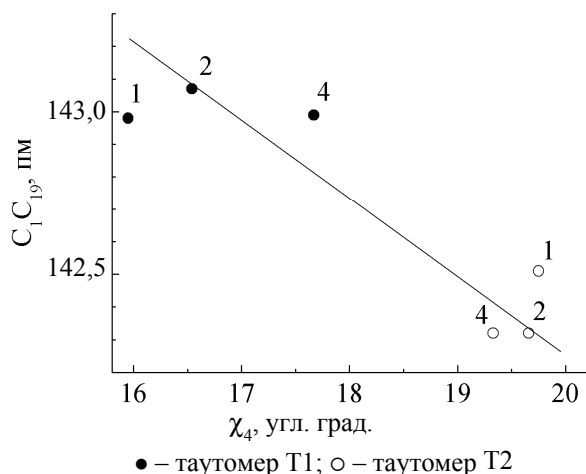


Рис. 2. Зависимость длины связи C_1C_{19} от величины внешнего двугранного угла χ_4 между пиррольными кольцами A и D в дипиррольном фрагменте свободных оснований корролов **1**, **2** и **4**

Следует отметить, что несмотря на уменьшение размеров ядра макроцикла при сокращении длины связи C_1C_{19} , таутомер T2 в целом характеризуется меньшей степенью неплоскостных искажений. Величина среднеквадратичного отклонения атомов от средней плоскости тетрапиррольного макроцикла $\Delta 23$ у таутомера T2 систематически ниже, чем у таутомера T1. Например, для корролов **1** и **2** значения параметра $\Delta 23$ составляют соответственно 16,3 против 15,2 пм и 17,8 против 15,7 пм. Это указывает на то, что стерические взаимодействия в ядре макроцикла локализованы.

Заслуживает внимания тот факт, что стерические взаимодействия арильных заместителей в мезо-положениях макроцикла не оказывают влияния на длину связи C_1C_{19} в дипиррольном фрагменте. Ее величины для соединений **1**, **2** и **4** оказываются очень близкими. Таким образом, это еще раз указывает на то, что стерические взаимодействия мезо-заместителей локализованы и структурные изменения не охватывают весь макроцикл.

Отгалкивание метильных групп, присоединенных в положениях C_2 и C_{18} соединения **3** приводит к увеличению длины связи C_1C_{19} у обоих NH-таутомеров (см. рис. 2 и 3). При этом изменения длины связи у таутомеров T1 и T2 оказываются близкими. Анализ зависимости, представленной на рис. 3, позволяет сделать вывод, что стерические взаимодействия метильных групп формируют инкремент длины связи C_1C_{19} , примерно равный 0,5 пм. Величина двугранного угла ϕ_i между протонирующимся пирролениновым кольцом и средней плоскостью макроцикла обратна пропорциональна длине связи C_1C_{19} . Обращает на себя внимание тот факт, что размах наблюдаемых изменений двугранного угла ϕ_D (таутомер T1) заметно

больше, чем у двугранного угла ϕ_C (таутомер T2). С одной стороны, это означает, что основность макроцикла таутомера T1, которая связывается нами с величиной угла ϕ_i [3], сильнее зависит от архитектуры периферического замещения, чем в случае таутомера T2. С другой стороны, это приводит к тому, что при NH-таутомеризации производных корролов с развитой архитектурой периферического замещения амплитуда конформационных перестроек возрастает.

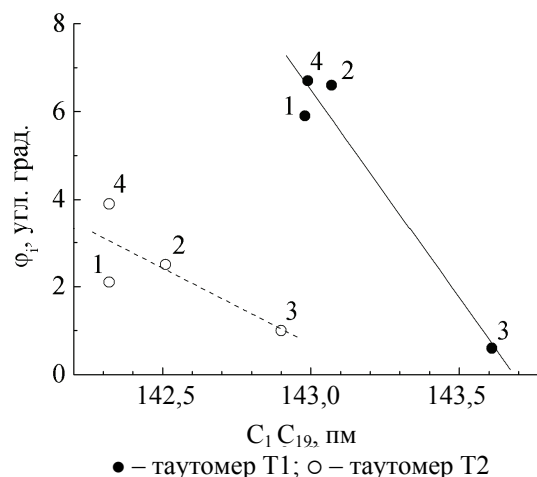


Рис. 3. Зависимость величины двугранного угла ϕ_i между протонирующимся пирролениновым кольцом и средней плоскостью макроцикла от длины связи C_1C_{19}

Локальные параметры, характеризующие геометрию ядра макроцикла, также изменяются при модуляции стерических взаимодействий на периферии макроцикла. Так, на рис. 4 показаны зависимости внутренних двугранных углов χ'_i между пиррольными кольцами, соседними с пирролениновым кольцом, которое протонируется, от длины связи C_1C_{19} в дипиррольном фрагменте.

Анализ зависимостей указывает на линейную взаимосвязь данных величин. У таутомера T2 уменьшение длины связи C_1C_{19} сопровождается одинаковым увеличением двугранных углов χ'_2 и χ'_3 . Относительно небольшие изменения обусловлены тем, что протонируемое пирролениновое кольцо C принадлежит менее стерически напряженному дипиррометеновому фрагменту, а также тем, что копланарное расположение пиррольных колец C и D стабилизируется внутримолекулярной водородной связью. У таутомера T1 двугранный угол χ'_3 испытывает практически такое же увеличение. Однако двугранный угол χ'_4 , напротив, уменьшается с уменьшением длины связи C_1C_{19} . Это связано с тем, что, во-первых, пиррольное кольцо A испытывает деформацию и становится неплоским.

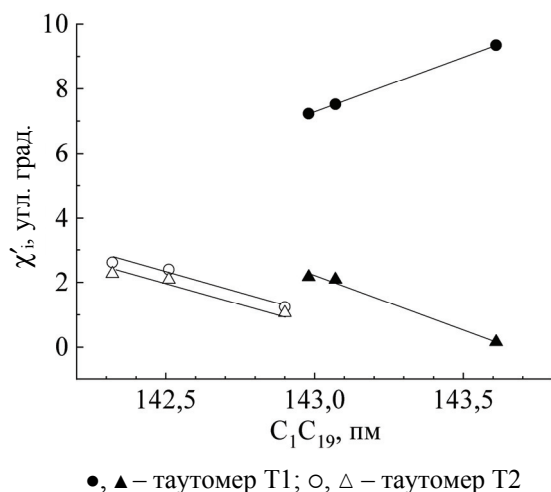


Рис. 4. Зависимость величины внутренних двугранных углов χ'_4 между плоскостями протонирующегося пирролинового кольца и соседних пиррольных колец от длины связи C_1C_{19}

Во-вторых, происходит делокализация стericких возмущений в макроцикле, проявляющаяся в том, что уменьшение величины двугранного угла χ'_4 сопровождается повышением

величины двугранного угла χ'_1 между пиррольными кольцами *A* и *B*.

Заключение. С использованием метода функционала плотности рассчитана равновесная молекулярная конформация длинноволнового (Т1) и коротковолнового (Т2) NH-таутомеров производных свободного основания коррола с различной архитектурой периферического замещения. Установлено согласие между вновь полученными результатами и результатами квантово-химических расчетов полуэмпирическими методами, выполненными ранее. Показано, что длина связи C_1C_{19} в дипиррольном фрагменте существенно меньше у коротковолнового таутомера Т2. Уменьшение длины связи C_1C_{19} при переходе от длинноволнового таутомера Т1 к коротковолновому таутомеру Т2 объяснено ростом непланарности дипиррольного фрагмента. Длина связи C_1C_{19} для двух NH-таутомеров зависит от природы заместителей в положениях C_2 и C_{18} пиррольных колец дипиррольного фрагмента. Таким образом, асимметрия макроцикла свободных оснований корролов приводит к тому, что длина связи C_1C_{19} в дипиррольном фрагменте является маркером молекулярной конформации макроцикла.

Список литературы

1. Kruk M. M., Klenitsky D. V., Maes W. Molecular structure and conformation of free base corroles // *Macroheterocycles*. 2019. Vol. 12, no. 1. P. 58–67.
2. Крук Н. Н., Кленитский Д. В., Маес В. Квантово-химическое исследование молекулярной структуры алкилированных корролов // *Труды БГТУ. Сер. 3, Физ.-мат. науки и информатика*. 2018. № 1. С. 36–42.
3. Крук Н. Н., Кленитский Д. В., Маес В. Исследование структурных факторов, определяющих основность алкилированных производных свободного основания коррола // *Труды БГТУ. Сер. 3, Физ.-мат. науки и информатика*. 2020. № 1. С. 32–47.
4. Крук Н. Н. Строение и оптические свойства тетрапиррольных соединений. Минск: БГТУ, 2019. 216 с.
5. Electron correlation in tetrapyrroles: ab initio calculations on porphyrin and the tautomers of chlorin / J. Almlöf [et al.] // *Journal Phys. Chem.* 1993. Vol. 97, no. 42. P. 10964–10970.
6. Vagnberg T., Ghosh A. First-Principles Quantum Chemical Analysis of the Factors Controlling Ruffling Deformations of Porphyrins: Insights from the Molecular Structures and Potential Energy Surfaces of Silicon, Phosphorus, Germanium, and Arsenic Porphyrins and of a Peroxidase Compound I Model // *Journal Am. Chem. Soc.* 1999. Vol. 121, no. 51. P. 12154–12160.

References

1. Kruk M. M., Klenitsky D. V., Maes W. Molecular structure and conformation of free base corroles. *Macroheterocycles*, 2019, vol. 12, no. 1, pp. 58–67.
2. Kruk M. M., Klenitsky D. V., Maes W. Quantum-chemical study of the molecular structure of alkylated corroles. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], issue 3, Physics and Mathematics. Informatics, 2018, no. 1, pp. 36–42 (In Russian).
3. Kruk M. M., Klenitsky D. V., Maes W. Study of structural factor detrmnitive for basicity of the alkylated derivatives of the free base corroles. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], issue 3, Physics and Mathematics. Informatics, 2020, no. 1, pp. 32–47 (In Russian).
4. Kruk M.M. *Stroyeniye i opticheskiye svoystva tetrapirrol'nykh soyedineniy* [Structure and optical properties of tetrapyrrolic compounds]. Minsk, BGTU Publ., 2019. 216 p. (In Russian).
5. Almlöf J., Fischer T.H., Gassman P.G., Ghosh A., Haeser M. Electron correlation in tetrapyrroles: ab initio calculations on porphyrin and the tautomers of chlorin. *Journal Phys. Chem.*, 1993, vol. 97, no. 42, pp. 10964–10970.

6. Vangberg, T. A., Ghosh A. First-Principles Quantum Chemical Analysis of the Factors Controlling Ruffling Deformations of Porphyrins: Insights from the Molecular Structures and Potential Energy Surfaces of Silicon, Phosphorus, Germanium, and Arsenic Porphyrins and of a Peroxidase Compound I Model. *Journal Am. Chem. Soc.*, 1999, vol. 121, no. 51, pp. 12154–12160.

Информация об авторах

Крук Николай Николаевич – доктор физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой физики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Сverdlova, 13а, Республика Беларусь). E-mail: m.kruk@belstu.by

Кленицкий Дмитрий Викентьевич – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры физики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Сverdlova, 13а, Республика Беларусь). E-mail: klen@belstu.by

Гладков Лев Львович – доктор физико-математических наук, доцент, профессор кафедры высшей математики. Белорусская государственная академия связи (220114, г. Минск, ул. Ф. Скорины, 8/2, Республика Беларусь). E-mail: llglad@tut.by

Маес Воутер – кандидат химических наук, профессор. Хассельтский университет (г. Дипенбек, B-3590, Бельгия). E-mail: wouter.maes@uhasselt.be

Information about the authors

Kruk Mikalai Mikalaevich – DSc (Physics and Mathematics), Associate Professor, Head of the Department of Physics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: m.kruk@belstu.by

Klenitsky Dmitry Vikentievich – PhD (Physics and Mathematics), Associate Professor, Assistant Professor, the Department of Physics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: klen@belstu.by

Gladkov Lev L'vovich – DSc (Physics and Mathematics), Associate Professor, Professor, the Department of Higher Math. Belarusian State Academy of Communications (8/2, F. Skorina str., 220114, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: llglad@tut.by

Maes Wouter – PhD (Chemistry), Professor. Hasselt University (B-3590, Diepenbeek, Belgium). E-mail: wouter.maes@uhasselt.be

Поступила после доработки 06.12.2021

УДК 537.8+541.67

Н. А. Прудников, Н. Н. Крук

Белорусский государственный технологический университет

**МОДЕЛИРОВАНИЕ КОЛЬЦЕВЫХ ТОКОВ
В МАКРОГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛАХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ
ЭКВИВАЛЕНТНОЙ ЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ СХЕМЫ**

При преобразовании макрогетероциклической молекулы порфина в соответствующую эквивалентную электрическую схему оценено перераспределение электронной плотности посредством анализа распределения кольцевых токов в пиррольных и пирролиновых кольцах. Проведены расчеты глобальных и локальных диатропных и паратропных кольцевых токов посредством составления и решения системы линейных уравнений из интегрированных значений плотностей токов по методу GIMIC. Найдены значения основных элементов эквивалентной электрической схемы, такие как сопротивления внутренних и внешних ветвей и ЭДС индукции отдельных независимых контуров. Установлено, что значения прохождения соответствующих кольцевых токов зависят не только от полученных сопротивлений соответствующих элементов экзо- и эндоциклического путей, но и от тех небольших значений локальных кольцевых токов, среди которых преобладающими являются паратропные, что, в свою очередь, свидетельствует о недостаточной ароматичности колец в молекуле порфина. Протекание большего кольцевого тока через внутреннюю ветвь пирролинового кольца объясняется его усилением и одновременным ослаблением экзогенных связей паратропным локальным кольцевым током. Выяснено, что именно паратропные токи (главным образом глобальный) изменяют наиболее вероятные пути протекания кольцевых токов.

Ключевые слова: порфин, кольцевые токи, паратропный и диатропный ток, эквивалентная электрическая схема.

Для цитирования: Прудников Н. А., Крук Н. Н. Моделирование кольцевых токов в макрогетероциклических молекулах с использованием эквивалентной электрической схемы // Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика. 2022. № 1 (254). С. 44–49.

M. A. Prudnikau, M. M. Kruk

Belarusian State Technological University

**MODELLING OF RING CURRENTS IN MACROHETEROCYCLIC
MOLECULES USING EQUIVALENT ELECTRICAL CIRCUIT**

By transforming the macroheterocyclic trans-porphin molecule into the corresponding equivalent electrical circuit, the electron density redistribution was estimated by analyzing the distribution of ring currents in pyrrole and pyrrolenine rings. Calculations of global and local diatropic and paratropic ring currents were carried out by compiling and solving a system of linear equations from the integrated values of current densities using the GIMIC method. The values of the main elements of the equivalent electrical circuit, such as the resistances of the internal and external branches and the EMF of induction of separate independent circuits, are found. It was found that the values of the passage of the corresponding ring currents depend not only on the obtained resistances of the corresponding elements of the exogenous/endogenous pathway, but also on those small values of local ring currents, among which paratropic ones are predominant, which in turn indicates insufficient aromaticity of the rings in the trans- molecule. porphine. The flow of a larger ring current through the inner branch of the pyrrolenine ring is explained by its strengthening and simultaneous weakening of exogenous bonds by the paratropic local ring current. It was found that it is paratropic currents (mainly global) that change the most probable paths for the flow of ring currents.

Key words: trans-porphin, ring currents, paratropic and diatropic currents, equivalent electrical circuit.

For citation: Prudnikau M. A., Kruk M. M., Modelling of ring currents in macroheterocyclic molecules using equivalent electrical circuit. *Proceedings of BSTU, issue 3, Physics and Mathematics. Informatics*, 2022, no. 1 (254), pp. 44–49 (In Russian).

Введение. Под воздействием внешнего магнитного поля на молекулу ее электроны вынуждены перемещаться по отдельным структурам молекулы или по всей молекуле, что приводит к возникновению магнитно-индуцированной плотности тока. Согласно закону Фарадея, индуцированные токи в молекуле формируют собственное магнитное поле, направленное противоположно приложенному внешнему магнитному полю. Воздействие внешнего магнитного поля на молекулярные системы аналогично действию магнитного поля на контур с током в классической физике. Вместе с тем для молекул необходимо учитывать квантовые эффекты, потому что в квантовых системах пространственно разделенные магнитно-индуцированные токи могут одновременно протекать в «классическом» и «неклассическом» направлениях, усиливая либо ослабляя локальное магнитное поле. Токи, текущие в классическом и неклассическом направлениях, принято называть соответственно диатропными и паратропными токами [1].

Поскольку магнитные взаимодействия менее сильны по сравнению с электростатическими, большинство квантово-механических подходов используют теорию возмущений при изучении магнитно-индуцированной восприимчивости к плотности тока, т. е. линейного изменения в величине плотности тока по отношению к напряженности внешнего магнитного поля, рассчитанной в пределе нулевого поля. На уровне теории возмущений внешнее магнитное поле предполагается однородным и бесконечно слабым [2].

Анализ силы диатропного и паратропного тока вдоль общих химических связей молекул, содержащих аннелированные кольца, дает возможность различать локальные и глобальные кольцевые токи. Термин «локальный кольцевой ток» используется для замкнутой цепи, которая локализована в одном молекулярном кольце. Глобальный кольцевой ток относится к токам, протекающим вокруг нескольких молекулярных колец либо по всему макроциклическому фрагменту [1].

Молекулярная ароматичность может быть охарактеризована общей суммарной силой тока по всей молекуле. Для молекул, состоящих из нескольких аннелированных и связанных колец, ток может идти разными путями. Ток может, например, формировать локальный кольцевой ток, который течет исключительно по некоторому локальному фрагменту макроцикла. Ток, текущий вокруг основного макроцикла, может разделяться на две ветви, при этом он течет в одном и том же направлении по двум маршрутам. Силы тока вдоль двух ветвей обычно различаются, но они должны соответствовать закону Кирхгофа.

Контур тока в сложных макрокольцевых соединениях можно определить с помощью различных процедур интегрирования. Схемы интегрирования дают очень подробную и достаточно точную информацию о путях тока в сложных макрокольцевых молекулах и о их величинах. В ряде работ анализировали взаимосвязь между кольцевыми токами, делокализацией электронов и ароматичностью [3, 4].

Экспериментально определить направления тока, индуцированного магнитным полем, невозможно. Единственный надежный способ выяснить пути прохождения тока – это рассчитать силу токов, проходящих через выбранные химические связи многокольцевой молекулы.

Порфин представляет собой ароматическую макрогетероциклическую молекулу с 26 π -электронами, состоящую из четырех пиррольных колец, соединенных метиновыми мостиками. Для порфина выполняется правило ароматичности Хюккеля, согласно которому молекула должна содержать в контуре ароматического сопряжения $(4n + 2)$ π -электронов [1]. Недавно было показано, что не все атомы макроцикла вовлечены в равной степени в формирование контура сопряжения и контуры могут включать 18 π - или 22 π -электронов [3, 4]. Анализ локальных кольцевых токов представляет собой нетривиальную задачу, поскольку их нельзя измерить непосредственно. Однако известно, что локальные токи в разветвленных цепях можно рассчитать с помощью правил Кирхгофа. Поэтому, если представить молекулу порфина в виде эквивалентной электрической схемы, то, составив в соответствии с правилами Кирхгофа систему линейных алгебраических уравнений и решив ее, возможно получить оценку ряда параметров и характеристик макрогетероциклических сопряженных молекул. Используя эквивалентную электрическую схему, можно судить о локальных кольцевых токах, делокализации электронов и ароматичности системы.

Целью данной работы является апробация нового подхода к изучению ароматических кольцевых токов в макрогетероциклических молекулах, использующего разработку и анализ эквивалентной электрической схемы молекулы с привлечением результатов квантово-химических расчетов перераспределения электронной плотности.

Основная часть. Все взаимодействия в сопряженных молекулярных системах связаны с перераспределением электронной плотности, которое влияет на диатропные и паратропные кольцевые токи в макрогетероциклических системах при воздействии внешнего магнитного поля. Поэтому макрогетероциклическую молекулу свободного основания порфина представим в виде эквивалентной электрической схемы (рис. 1).

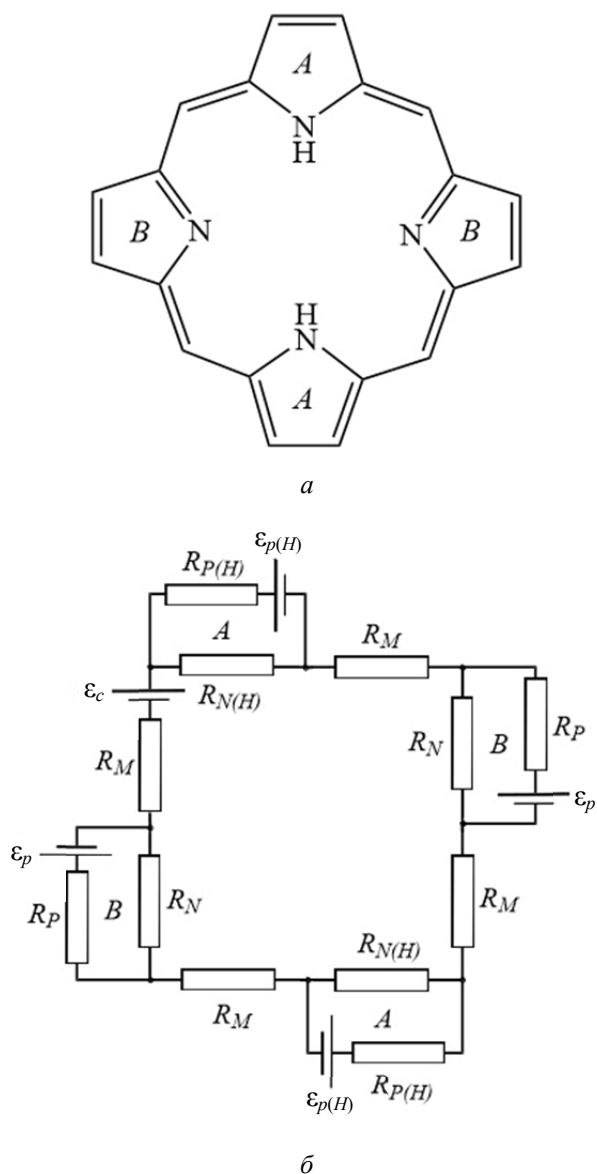


Рис. 1. Структурная формула свободного основания порфина (а) и эквивалентная электрическая схема (б)

Атомы и связи в молекуле представлены в качестве составных элементов. Совокупность элементов, вдоль которых течет единый ток, образуют ветвь, каждая из которых характеризуется своим значением сопротивления, зависящим от входящих в нее элементов. Как и «классическое» сопротивление, оно препятствует прохождению кольцевого тока через заданную ветвь молекулы. Под узлом будем понимать некий ограниченный в пространстве участок в молекуле, в котором соединяются три или более ветви.

Как отмечалось выше, у порфина может реализоваться несколько контуров сопряжения электронов, что удовлетворяет правилу ароматичности Хюккеля, но именно все 26 π -электронов играют активную роль в образовании ароматичности. Рассматривая расчеты порфина по

методу GIMIC и ARCS [3–8], можно говорить о полном вкладе каждого из колец в макрогетероциклической системе, что позволяет разбить молекулу на отдельные замкнутые контуры сопряжения π -электронов.

В молекуле порфина имеется два пиррольных кольца *A* (рис. 1). Идентичность в плане химического строения, результатов ^1H ЯМР спектров, длин связей, а также соответствие по величине и направлению как локальных, так и глобальных кольцевых токов прямо свидетельствует об их тождественности. Аналогичные доводы верны и для пирролениновых колец *B* (рис. 1). Теоретические расчеты площади колец *A* и *B* показали расхождение менее чем на 0,3% [5]. Вместе с малыми расхождениями в значениях локальных кольцевых токов это определяют равенство значений ЭДС индукции во всех локальных контурах *A* и *B*. Сравнивая внешние ветви (экзоциклические связи) пиррольных и пирролениновых колец на основании данных ^1H ЯМР, можно отметить отклонения химических сдвигов C_β -протонов не более чем на 0,6%, а длин $\text{C}_\beta\text{C}_\beta$ связей не более чем на 1,5%.

С учетом вышеизложенных соображений была построена эквивалентная электрическая схема молекулы порфина (рис. 1), для которой составлена система уравнений в соответствии с правилами Кирхгофа:

$$\begin{cases} -I_{P(H)} \cdot R_{P(H)} + I_{N(H)} \cdot R_{N(H)} = \varepsilon_p, \\ -I_P \cdot R_P + I_N \cdot R_N = \varepsilon_p, \\ 4 \cdot I_M \cdot R_M + 2 \cdot I_N \cdot R_N + 2 \cdot I_{N(H)} \cdot R_{N(H)} = \varepsilon_c, \\ R_P = R_{P(H)}, \\ I_P + I_N = I_M, \\ I_{P(H)} + I_{N(H)} = I_M. \end{cases} \quad (1)$$

Однако данная система не является совместной. Ее необходимо дополнить величинами локальных кольцевых токов. Предполагая, что ток в пиррольных кольцах можно схематично изобразить, как показано на рис. 2, имеем возможность построить вторую систему линейных уравнений, решение которых предоставляет информацию о глобальных и локальных токах в пиррольных и пирролениновых кольцах. Эта система уравнений имеет следующий вид:

$$\begin{cases} I_{N(H)} = I_{N(H) \text{ д.г.}} - I_{(H) \text{ д.л.}} + I_{(H) \text{ п.л.}} - I_{\text{п.г.}}, \\ I_{P(H)} = I_{P(H) \text{ д.г.}} + I_{(H) \text{ д.л.}} - I_{(H) \text{ п.л.}}, \\ I_N = I_{N \text{ д.г.}} - I_{\text{д.л.}} + I_{\text{п.л.}} - I_{\text{п.г.}}, \\ I_P = I_{P \text{ д.г.}} + I_{\text{д.л.}} - I_{\text{п.л.}}. \end{cases} \quad (2)$$

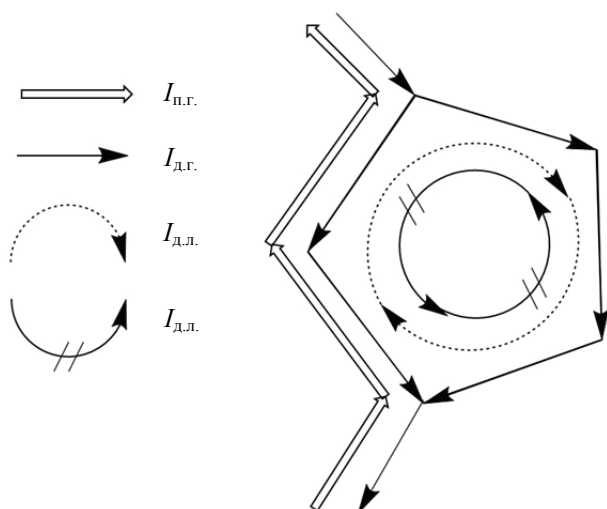


Рис. 2. Схема пиррольного кольца с предполагаемым распределением токов

В результате интегрирования функции плотности тока по методу GIMIC получаем:

$$\begin{cases} I_{п.г.} = 3,4, \\ I_{(H) д.л.} + I_{п.г.} = 6,3, \\ I_{N(H) д.г.} + I_{(H) п.л.} = 14,2, \\ I_{P(H) д.г.} + I_{(H) д.л.} = 22,4, \\ I_{(H) п.л.} = 3,5, \\ I_{N д.г.} + I_{п.л.} = 20,0, \\ I_{д.л.} + I_{п.г.} = 5,9, \\ I_{P д.г.} + I_{д.л.} = 16,9, \\ I_{п.л.} = 4,2. \end{cases} \quad (3)$$

Таким образом, получено, что в кольце *A* глобальный диатропный ток 30,2 нА/Тл раздваивается на внутреннюю ветвь 10,7 нА/Тл, тогда как ток 19,5 нА/Тл идет по внешнему маршруту. Кольцо *A* выдерживает локальный диатропный ток 2,9 нА/Тл и локальный паратропный ток – 3,5 нА/Тл, что приводит к очень слабому локальному кольцевому току –0,6 нА/Тл. Кольцо *A* не включает сильный локальный ток, показывая, что оно само по себе не является достаточно ароматическим. В кольце *B* глобальный диатропный ток 30,2 нА/Тл раздваивается на внутреннюю ветвь 15,8 нА/Тл и внешнюю ветвь 14,4 нА/Тл. Кольцо *B* поддерживает локальный диатропный ток 2,5 нА/Тл и паратропный ток – 4,2 нА/Тл, что приводит к небольшому локальному кольцевому току –1,7 нА/Тл в кольце *B*.

Полученный результат показывает более детальное распределение токов в молекуле порфина и значения «изолированных» кольцевых токов, которые представлены в нижеизложенной таблице.

Следует подчеркнуть изменение степени экранирования ядер, ЭДС индукции колец, сопротивлений ветвей и ряда других параметров эквивалентной электрической схемы за счет действия локальных и глобального паратропных токов, что позволяет дополнить вышеприведенную систему линейных уравнений с учетом действия локальных кольцевых токов каждого типа кольца.

Величина ЭДС индукции ϵ_c является расчетной величиной и связана с ЭДС индукции ϵ_p косвенно посредством интегрирования электронной плотности внутреннего замкнутого контура порфина и сравнения с таковым у его пиррольных колец. В результате интегрирования было замечено, что величина ϵ_c почти в 40 раз превышает модуль значения ϵ_p .

В результате система линейных уравнений (1) приобретает следующий вид:

$$\begin{cases} -I_{P(H)} \cdot R_{P(H)} + I_{N(H)} \cdot R_{N(H)} = \epsilon_p, \\ -I_P \cdot R_P + I_N \cdot R_N = \epsilon_p, \\ 4 \cdot I_M \cdot R_M + 2 \cdot I_N \cdot R_N + \\ + 2 \cdot I_{N(H)} \cdot R_{N(H)} = \epsilon_c, \\ R_{P(H)} = R_P, \\ I_P + I_N = I_M, \\ I_{P(H)} + I_{N(H)} = I_M, \\ \epsilon_p = 1,7 \cdot (R_b + R_N), \\ \epsilon_p = 0,6 \cdot (R_b + R_{N(H)}), \\ \epsilon_c = 40,4 \cdot \epsilon_p. \end{cases} \quad (4)$$

Решение данной системы уравнений приведено в таблице.

Локализация большего кольцевого тока должна наблюдаться в случае меньшего сопротивления той или иной ветви. Так, сопротивление внутренней ветви пиррольного кольца почти в 2,9 раза выше сопротивления экзоциклических связей, что и обуславливает преимущественное протекание тока по внешней ветви. Сопротивления эндо- и экзоциклических связей в кольце *B* практически равны друг другу, в результате чего значительный вес приобретают локальные паратропные и диатропные кольцевые токи. Именно их действие оказывает большее протекание кольцевого тока через внутреннюю ветвь кольца несмотря на большее значение сопротивления.

В результате можно сделать вывод, что паратропные токи, противоположные по направлению токам по Кирхгофу, увеличивают сопротивления той или иной ветви, а одинаково направленные – уменьшают.

Величины кольцевых токов, сопротивлений и ЭДС индукции порфина

Элемент в молекуле порфина	Величина	Значение, нА/Тл	Величина	Значение, нА/Тл	Величина	Значение, $\times 10^8$ Ом	Величина	Значение, $\times 10^{16}$ В
–	I_M	26,8	$I_{д.г.}$	30,2	R_M	2,305	ϵ_c	52,1
			$I_{п.г.}$	3,4				
Пиррол <i>A</i>	$I_{N(H)}$	7,9	$I_{(H)д.л.}$	2,9	$R_{N(H)}$	10,011	ϵ_p	1,29
	$I_{P(H)}$	18,9	$I_{(H)п.л.}$	3,5	R_P	3,503		
<i>B</i>	I_N	14,1	$I_{д.л.}$	2,5	$(R_{P(H)})$	4,068	ϵ_p	1,29
	I_P	12,7	$I_{п.л.}$	4,2				

Важной особенностью является преобладание паратропного тока над диатропным в кольцах *A* и *B*, характеризующее сами пиррольные и пирролениновые кольца в молекуле порфина как антиароматические составляющие.

Заключение. Эквивалентная электрическая схема макрогетероциклических соединений позволяет адекватно описать перераспределение электронной плотности, найти действующие кольцевые токи и тем самым оценить степень ароматичности соединений, объяснить величину экранирующего и дезэкранирующего действия атомов. Показа-

но, что немаловажную роль в формировании кольцевых токов играют паратропные локальные и глобальные токи. Обнаружены закономерности между протеканием циклических токов и структурными элементами ветвей, что позволит рассчитать более вероятные пути протекания циклических токов производных порфина. Найденные основные параметры эквивалентной электрической схемы свободного основания порфина позволят в дальнейшем использовать данную модель для приближенных расчетов ряда параметров его производных.

Список литературы

1. Крук Н. Н. Структура и оптические свойства тетрапиррольных соединений. Минск: БГТУ, 2019. 216 с.
2. Аминова Р. М. Основы современной квантовой химии. Казань: КГУ, 2004. 106 с.
3. Juselius J., Sundholm D. The aromatic pathways of porphins, chlorins and bacteriochlorins // *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2000. Vol. 2, no. 19. P. 2145–2151.
4. Sundholm D., Fliegl H., Berger R. Calculations of magnetically induced current densities: theory and applications: Calculations of magnetically induced current densities // *Wiley Interdiscip. Rev. Comput. Mol. Sci.* 2016. Vol. 6, no. 6. P. 639–678
5. Fliegl H., Sundholm D. Aromatic Pathways of Porphins, Chlorins, and Bacteriochlorins // *J. Org. Chem.* 2012. Vol. 77, no. 7. P. 3408–3414.
6. The gauge including magnetically induced current method / H. Fliegl [et al.] // *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2011. Vol. 13, no. 46. P. 20500–20518.
7. Fliegl H., Juselius J., Sundholm D. Gauge-Origin Independent Calculations of the Anisotropy of the Magnetically Induced Current Densities // *J. Phys. Chem. A.* 2016. Vol. 120, no. 28. P. 5658–5664.
8. Tuersun M., Kerim A. A study on the aromaticity and magnetic properties of N-confused porphyrins // *R. Soc. Open Sci.* 2020. Vol. 7, no. 7. P. 20069–20081.

References

1. Kruk M. M. *Stroyeniye i opticheskiye svoystva tetrapirrol'nykh soyedineniy* [Structure and optical properties of tetrapyrrolic compounds]. Minsk, BG TU Publ., 2019. 216 p. (In Russian).
2. Aminova R. M. *Osnovy sovremennoy kvantovoy khimii*. [Foundations of modern quantum chemistry]. Kazan, KGU Publ., 2004. 106 p. (In Russian).
3. Juselius J., Sundholm D. The aromatic pathways of porphins, chlorins and bacteriochlorins. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2000, vol. 2, no. 19, pp. 2145–2151.
4. Sundholm D., Fliegl H., Berger R. Calculations of magnetically induced current densities: theory and applications: Calculations of magnetically induced current densities. *Wiley Interdiscip. Rev. Comput. Mol. Sci.*, 2016, vol. 6, no. 6, pp. 639–678.

5. Fliegl H., Sundholm D. Aromatic Pathways of Porphins, Chlorins, and Bacteriochlorins. *J. Org. Chem.*, 2012, vol. 77, no. 7, pp. 3408–3414.
6. Fliegl H., Taubert S., Lehtonena O., Sundholm D. The gauge including magnetically induced current method. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2011, vol. 13, no. 46, pp. 20500–20518.
7. Fliegl H., Juselius J., Sundholm D. Gauge-Origin Independent Calculations of the Anisotropy of the Magnetically Induced Current Densities. *J. Phys. Chem. A.*, 2016, vol. 120, no. 28, pp. 5658–5664.
8. Tuersun M., Kerim A. A study on the aromaticity and magnetic properties of N-confused porphyrins. *R. Soc. Open Sci.*, 2020, vol. 7, no. 7, pp. 20069–20081.

Информация об авторах

Прудников Никита Андреевич – студент. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: mikita.prudnikov18@gmail.com

Крук Николай Николаевич – доктор физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой физики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: m.kruk@belstu.by

Information about the authors

Prudnikau Mikita Andreevich – student. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: mikita.prudnikov18@gmail.com

Kruk Mikalai Mikalaevich – DSc (Physics and Mathematics), Associate Professor, Head of the Department of Physics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: m.kruk@belstu.by

Поступила после доработки 07.12.2020

ИНФОРМАТИКА И ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ COMPUTER SCIENCE AND ENGINEERING SCIENCES

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ И УПРАВЛЕНИЕ В ТЕХНИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ MODELLING OF PROCESSES AND MANAGEMENT IN TECHNICAL SYSTEMS

УДК 621.317.444

**И. О. Оробей, В. В. Сарока, Д. А. Гринюк,
Н. М. Олиферович, М. А. Анкуда**

Белорусский государственный технологический университет

АНАЛИЗАТОР КОНЦЕНТРАЦИИ NH_3 И CO

В статье рассмотрены вопросы измерения концентрации газов. При анализе концентрации газов и их смесей осуществлено определение качества и количества компонентов газовых смесей. Газовый анализ выполнен по лабораторным методикам с помощью специальных газоанализаторов. Обзор лабораторных и промышленных методов газового анализа основан на измерении физических параметров и свойств газовой среды. Наиболее перспективным методом проведения экспресс-анализа концентрации газовых смесей в промышленности является использование полупроводникового метода, при реализации которого измеряется сопротивление полупроводника (пленки или монокристалла), взаимодействующего с определяемым компонентом газовой смеси. Данный метод применяют для измерения содержания H_2 , метана, пропана, O_2 , оксидов углерода и азота и др. Минимально определяемое значение концентрации метода лежит в пределах от 0,00001 до 0,00100%. В работе описан измеритель концентрации многокомпонентных газовых смесей. Чувствительный элемент первичного измерительного преобразователя выполнен в виде слоя допированного оксида олова (IV), полученного методом магнетронного распыления металлической мишени сложного состава. Для измерения концентрации NH_3 и CO электронная схема осуществляет изменение и стабилизацию температуры резистивного слоя оксида олова в точках максимальной чувствительности к соответствующему газу. Вследствие малого теплового сопротивления чувствительного элемента и нагревателя, последний используется в качестве датчика температуры. Первичный измерительный преобразователь работает под управлением микропроцессорного контроллера и позволяет получить погрешность измерения не более 1 ppm.

Ключевые слова: измерительный преобразователь, измерение, чувствительность, концентрация, датчик, оксид.

Для цитирования: Оробей И. О., Сарока В. В., Гринюк Д. А., Олиферович Н. М., Анкуда М. А. Анализатор концентрации NH_3 и CO // Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика. 2022. № 1 (254). С. 50–57.

I. O. Orobei, V. V. Saroka D. A. Hryniuk, N. M. Oliferovich, M. A. Ankuda
Belarusian State Technological University

ANALYZER OF NH₃ AND CO CONCENTRATION

The article discusses the issues of measuring the concentration of gases. When analyzing the concentration of gases and their mixtures, the qualitative detection and quantitative determination of the components of gas mixtures is carried out. Gas analysis is carried out according to laboratory methods using special gas analyzers. A review of laboratory and industrial methods of gas analysis based on the measurement of physical parameters and properties of the gaseous medium has been carried out. The most promising method for express analysis of the concentration of gas mixtures in industry is the use of a semiconductor method, in the implementation of which the measurement of the resistance of a semiconductor (film or single crystal) interacting with the determined component of the gas mixture is carried out. This method is used to measure the content of H₂, methane, propane, O₂, carbon and nitrogen oxides, etc. The minimum determined value of the concentration of the method lies in the range from 0.00001 to 0.00100%. The paper describes a concentration meter for multicomponent gas mixtures. The sensitive element of the primary measuring transducer is made in the form of a layer of doped tin oxide (IV), obtained by magnetron sputtering of a metal target of complex composition. To measure the concentration of NH₃ and CO, the electronic circuit changes and stabilizes the temperature of the resistive tin oxide layer at the points of maximum sensitivity to the corresponding gas. Due to the low thermal resistance of the sensing element and the heater, the latter is used as a temperature sensor. The primary measuring transducer operates under the control of a microprocessor controller and allows to obtain a measurement error of no more than 1 ppm.

Key words: measuring transducer, measurement, sensitivity, concentration, sensor, oxide.

For citation: Orobei I. O., Saroka V. V., Hryniuk D. A., Oliferovich N. M., Ankuda M. A. Analyzer of NH₃ and CO concentration. *Proceedings of BSTU, issue 3, Physics and Mathematic. Informatics*, 2022, no. 1 (254), pp. 50–57 (In Russian).

Введение. Газовый анализ – это качественное обнаружение и количественное определение компонентов газовых смесей. Газовый анализ может проводиться как по лабораторным методам, так и с помощью специальных газоанализаторов. Как правило, методы газового анализа основаны на измерении физических параметров и свойств среды (например, электрической проводимости, магнитной восприимчивости, теплопроводности, оптической плотности, коэффициента рассеяния и так далее), значения которых зависят от концентраций определяемых компонентов. Существуют избирательные и неизбирательные методы измерения. В неизбирательных методах проводится измерение свойств пробы (например, плотности или теплопроводности), которые зависят от относительного содержания всех компонентов пробы. Поэтому такие методы могут применяться для анализа бинарных и псевдобинарных газовых смесей, в которых варьируется содержание только определяемого компонента, а соотношение концентраций остальных компонентов не изменяется. В избирательных методах измеряемое свойство пробы зависит преимущественно от содержания определяемого компонента.

По характеру измеряемого физического параметра методы газового анализа можно разделить на механические, акустические, тепловые,

магнитные, оптические, ионизационные, масс-спектрометрические, электрохимические, полупроводниковые.

К механическим методам относится волюмоманометрический метод, основанный на измерении объема или давления газовой пробы после химического воздействия на нее, которое может заключаться, например, в последовательном поглощении компонентов анализируемого газа подходящими реагентами в поглотительных сосудах. Минимально определяемые концентрации (МОК) от 0,001 до 0,010%.

К механическим методам также относят пневматический метод (аэростатический и аэродинамический). В первом случае измеряют плотность газовой смеси, во втором – зависящие от плотности и вязкости параметры таких процессов, как дросселирование газовых потоков, взаимодействие струй, вихреобразование и т. д. Эти методы применяют для анализа бинарных и псевдобинарных смесей, например для определения H₂ в воздухе или в этилене, CO₂ в инертных газах, Cl₂ в H₂ и т. д. МОК метода – от 0,01 до 0,10%.

Акустические методы основаны на измерении поглощения или скорости распространения звуковых и ультразвуковых волн в газовой смеси. Методы не избирательны и применяются, в частности, для определения CH₄, O₂, H₂ в би-

нарных и псевдобинарных смесях. МОК метода – от 0,001 до 0,100%.

Тепловые методы основаны на измерении теплопроводности газовой смеси (термокондуктометрический метод) или теплового эффекта радиации с участием определяемого компонента (термохимический метод). Термокондуктометрическим методом находят содержание, например, He , CO_2 , H_2 , CH_4 в бинарных и псевдобинарных смесях. МОК метода – от 0,01 до 0,10%. Термохимический метод используют для избирательного определения CO , CH_4 , O_2 , H_2 , контроля в воздухе взрывоопасных и пожароопасных примесей (смесей газообразных углеводородов, паров бензина и т. д.). Например, при определении метана его сжигают в присутствии катализатора (Pt и Pd на активном Al_2O_3). Количество выделившегося тепла, пропорциональное концентрации CH_4 , с помощью терморезисторов преобразуют в регистрируемый электрический сигнал. МОК метода – от 0,001 до 0,010%.

В магнитных методах измеряют физические характеристики газа, обусловленные магнитными свойствами определяемого компонента в магнитном поле. С их помощью контролируют содержание O_2 , отличающегося аномально большой парамагнитной восприимчивостью. Наиболее распространен термомагнитный метод, основанный на зависимости парамагнитной восприимчивости O_2 от его концентрации при действии магнитного поля в условиях температурного градиента. МОК метода – от 0,01 до 0,10%.

В оптических методах измеряют оптическую плотность (абсорбционные методы), интенсивность излучения (эмиссионные методы), коэффициент преломления (рефрактометрический). Абсорбционные методы, основанные на измерении селективного поглощения ИК, УФ или видимого излучения контролируемым компонентом, применяют, например, для избирательного определения NO_2 , O_3 , H_2S , SO_2 , формальдегида, фосгена, Cl_2 , паров Hg , Na , Pb и других. МОК метода – от 0,00001 до 0,01000%. Широко используется оптоакустический метод, основанный на пульсации давления газа в приемнике излучения при поглощении прерывистого потока излучения, прошедшего через анализируемый газ. Метод позволяет определять CO , CO_2 , CH_4 , NH_3 , SO_2 , ряд органических соединений. МОК метода – от 0,001 до 0,010%. Источники излучения в абсорбционных методах – лампы накаливания, ртутные, водородные, ртутно-кадмиевые, кадмиевые, нихромовые спирали.

По фотокolorиметрическому оптическому методу предварительно проводят цветную реакцию контролируемого компонента с подхо-

дящим реагентом в газовой фазе, в индикаторном реакторе или на поверхности твердого носителя (в виде ленты, таблетки, порошка) и измеряют интенсивность окраски продуктов реакции. Метод применяют также для избирательного определения оксидов азота, CO , NH_3 , ацетилена, фосгена, формальдегида и др. МОК метода – от 0,000001 до 0,001000%.

В эмиссионных оптических методах измеряют интенсивность излучения определяемых компонентов. Излучение можно возбудить электрическим разрядом (МОК метода – от 0,0001 до 0,1000%), пламенем, светом и другими источниками (при использовании лазера МОК достигает от 0,00000010 до 0,000001%). Эти методы применяют для количественного определения множества элементов и соединений.

В хемилюминесцентном методе измеряют интенсивность люминесценции, сопровождающей некоторые химические реакции в газах. Метод применяют, в частности, для определения O_3 и оксидов азота. Например, определение NO основано на его окислении озоном. МОК метода – от 0,000001 до 0,000100%.

Оптические методы, основанные на рассеянии света, получили развитие благодаря лазерной технике. Они применяются, в частности, при дистанционном контроле чистоты атмосферы для определения главным образом вредных примесей – органических соединений, оксидов азота, серы, углерода и т. д. МОК метода – от 0,000001 до 0,100000%.

Рефрактометрический метод используется для определения CO_2 , CH_4 , ацетилена, SO_2 и других в бинарных и псевдобинарных смесях. МОК метода – около 0,01%. Интерферометрический оптический метод основан на измерении смещения интерференционных полос в результате изменения оптической плотности газовой смеси при изменении концентрации определяемого компонента. Применяется, например, для определения CO_2 и CH_4 в воздухе. МОК метода – около 0,01%.

Ионизационные методы основаны на измерении электрической проводимости ионизованных газовых смесей. Ионизацию осуществляют радиоактивным излучением, электрическим разрядом, пламенем, УФ-излучением, на нагретой каталитически активной поверхности. Например, метод, основанный на измерении разницы сечений ионизации газов радиоактивным излучением, используют для анализа таких бинарных смесей, как $\text{H}_2\text{--N}_2$, $\text{N}_2\text{--CO}_2$, а также некоторых углеводородов. МОК метода – около 0,01%. Метод, основанный на ионизации органических соединений в водородном пламени, применяют для определения органических

примесей в бинарных газовых смесях и воздухе. МОК метода – около 0,00001%.

Масс-спектрометрические методы, основанные на измерении масс ионизированных компонентов анализируемого газа [1], применяют для определения инертных газов, O₂, H₂, оксидов углерода, азота и серы, а также неорганических, органических и металлоорганических летучих соединений. МОК метода – от 0,00001 до 0,00100%.

В электрохимических методах измеряют параметры системы, состоящей из жидкого или твердого электролита, электродов и определяемого компонента газовой смеси или продуктов его реакции с электролитом. Так, потенциометрический метод основан на зависимости потенциала индикаторного электрода от концентрации иона, полученного при растворении определяемого компонента в растворе; амперометрический – на зависимости между током и количеством определяемого компонента, прореагировавшего на индикаторном электроде; кондуктометрический – на измерении электропроводности растворов при поглощении ими определяемого компонента газовой смеси. Электрохимическими методами измеряют содержание примесей O₂, CO, NO, NO₂, SO₂, H₂S, H₂, Cl₂, NH₃, O₃ и др. МОК метода – от 0,000001 до 0,000100%.

В полупроводниковых методах измеряют сопротивление полупроводника (пленки или монокристалла), взаимодействующего с определяемым компонентом газовой смеси. Методы применяют для измерения содержания H₂, метана, пропана, O₂, оксидов углерода и азота, галогенсодержащих соединений и др. МОК метода – от 0,00001 до 0,00100%.

Среди методов газового анализа иногда выделяют так называемые комбинированные. К ним относятся методы, отличающиеся способами предварительного преобразования пробы (хроматография, изотопное разбавление), которые могут сочетаться с измерением различных физических параметров, а также многопараметрический вычислительный метод [1].

Цель и методика исследований. Полупроводниковые измерители концентрации, принцип действия которых основан на взаимодействии оксидов металлов с анализируемыми газами, очень перспективны для анализа количественного и качественного состава газов в различных отраслях промышленности.

Некоторым оксидам свойственна избирательность чувствительности при различных температурах, что позволяет осуществлять комплексный анализ многокомпонентных газовых смесей. В разработанном измерителе концен-

трации газовых смесей использован первичный преобразователь, чувствительный резистивный элемент которого представляет собой слой допированного оксида олова (IV), полученный методом магнетронного распыления металлической мишени сложного состава. Чувствительный слой преобразователя через диэлектрическую подложку находится в тепловом контакте с платиновым нагревательным элементом.

Для измерения концентрации NH₃ и CO электронная схема должна осуществлять изменение и стабилизацию температуры резистивного слоя оксида олова в точках максимальной чувствительности к соответствующему газу, причем из-за возникающих перекрестных помех для управления температурой нагревателя нежелательно использовать широтно-импульсную модуляцию тока нагревательного элемента. Вследствие малого теплового сопротивления между чувствительным элементом и нагревателем последний может быть использован в качестве датчика температуры.

Результаты и обсуждение. Принципиальная схема аналогового блока измерителя концентрации многокомпонентных газовых смесей приведена на рис. 1. Первичный преобразователь В₁ содержит резистивный слой допированного оксида олова R₁ и платиновый нагревательный элемент R₂. Слой оксида олова имеет чувствительность по проводимости $\Delta\sigma / \sigma \cdot 100 = 20 \text{ \%}/\text{ppm}$ к NH₃ при объемной концентрации C = 10 ppm и температуре 190 ± 2°C, $\Delta\sigma / \sigma \cdot 100 = 15 \text{ \%}/\text{ppm}$ к CO при объемной концентрации C = 10 ppm и температуре 250 ± 2°C и практически нечувствителен к NO_x в диапазоне температур от 0 до 300°C. Линейное увеличение проводимости слоя оксида олова от концентрации сохраняется вплоть до C = 1000 ppm. Начальное сопротивление R₁ при отсутствии NH₃ и CO лежит в пределах 300 ± 50 кОм, сопротивление нагревателя R₂(0) = 10 Ом при температуре t = 0°C, статическая характеристика R₂(t) соответствует платиновому термометру сопротивления типа Pt100 [2].

Измеритель концентрации работает следующим образом. Сигнал задания температуры для усилителя ошибки М₄₋₁ формируется цифро-аналоговым преобразователем (ц. а. п.) М₆ под управлением контроллера, принципиальная схема которого приведена на рис. 2. Выходной сигнал D_r усилителя ошибки управляет источником тока нагревателя R₂, выполненным на М₂₋₁, Т₁. Для определения температуры нагревателя в управляющее напряжение D_r добавлен меандр с частотой 3 кГц, вырабатываемый ключом М₃₋₃ под управлением генератора М₅.

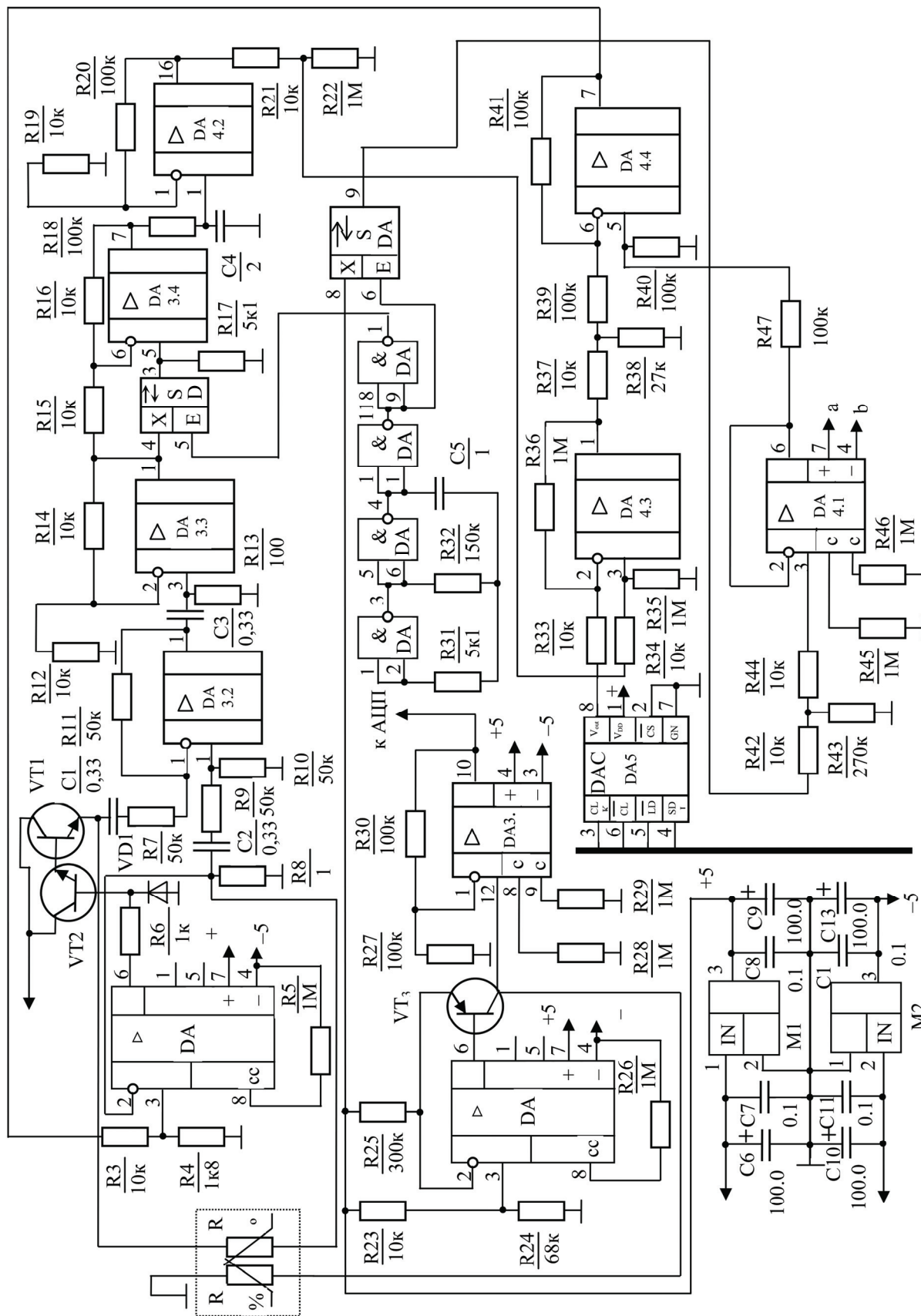


Рис. 1. Схема электрическая принципиальная аналогового блока

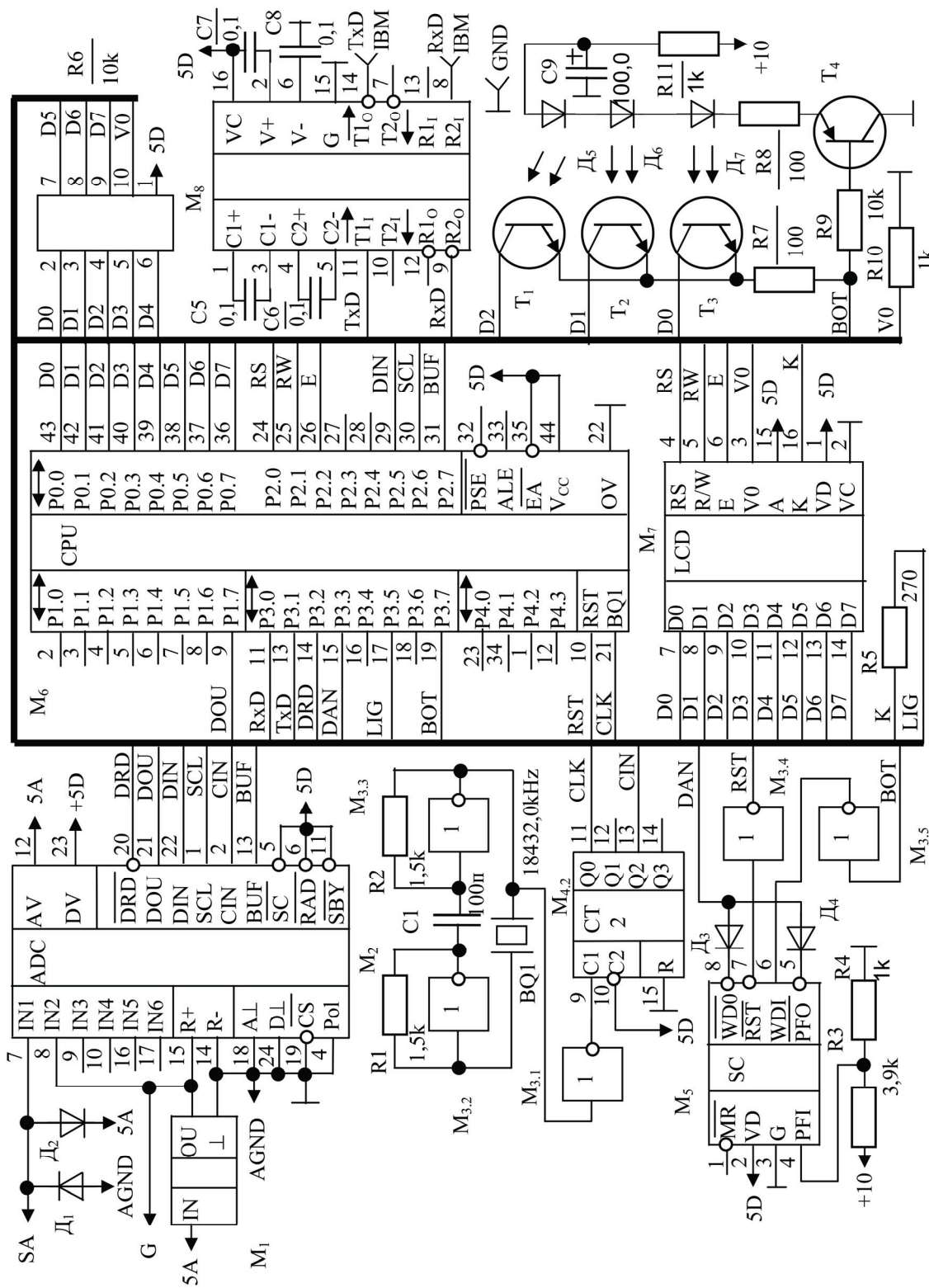


Рис. 2. Принципиальная электрическая схема блока контроллера

Зависимость амплитуды меандра напряжения на R_2 от температуры определяется выражением

$$U_{mR_2}(t) = R_2(t) \cdot I_m \approx \frac{R_2(0) \cdot (1 + 3,908 \cdot 10^{-3} \cdot t - 5,775 \cdot 10^{-7} \cdot t^2)}{R_3 \cdot R_{26} \cdot (R_{22} + R_{23})} \times \frac{1,25 \cdot R_{25} \cdot R_{23} \cdot R_{32}}{R_{31} + R_{32}},$$

где I_m – амплитуда меандра тока через R_2 . Преобразование $U_{mR_2}(t)$ в напряжение, пропорциональное температуре, осуществляется дифференциальным усилителем M_{2-4} ; активным фильтром низких частот на C_1 , R_{11} , M_{2-2} ; синхронным детектором, выполненным на M_{2-3} , M_{3-2} по схеме, предложенной в [3]; усилителем на M_{4-4} .

Задающее напряжение, вырабатываемое ц. а. п. M_6 , выражается в виде

$$U_{out} = U_{mR_2}(t)(1 + R_{12}/R_{10})(1 + R_{18}/R_{17})R_9/R_6,$$

что при наклоне характеристики ц. а. п. 10^{-3} В/бит обеспечивает не менее 7 младших значащих разрядов ц. а. п. на 1°C в требуемом температурном диапазоне. Развертка задающего напряжения осуществляется циклически с двухсекундной выдержкой постоянных напряжений, соответствующих температурам 190 и 250°C , что определяется длительностью переходного процесса в системе источник тока, R_2 , R_1 . Падение напряжения на R_1 , обратно пропорциональное концентрации измеряемого газа, через буферный повторитель, выполненный на измерительном усилителе M_1 , поступает на Δ - Σ аналого-цифровой преобразователь (а. ц. п.), расположенный в микропроцессорном блоке. А. ц. п. M_2 сконфигурирован как 16-разрядный в диапазоне 0 – $1,25$ В с источником опорного напряжения M_1 , генератор на M_3 , M_{4-2} , монитор питания со сторожевым таймером M_5 , однокристалльный микроконтроллер с памятью

программ M_6 , индикатор M_7 , приемопередатчик сигналов интерфейса RS-232 M_8 и оптоэлектронный переключатель режимов работы на D_5 – D_7 , T_1 – T_4 . Стабилизаторы напряжений $5D$ и $5A$ на рис. 2 не показаны. Источники питания аналогового и цифрового блоков гальванически развязаны. Измерение биполярного сигнала обеспечивается соединением общей точки аналогового блока с шиной опорного напряжения а. ц. п., так как напряжение на входах IN должно находиться между AGND и 5 В (А).

Циклы работы блока синхронизирует программный таймер микроконтроллера M_6 . Он управляет работой и считывает данные с а. ц. п., обрабатывает результаты, передает информацию в индикатор, сбрасывает сторожевой таймер, активирует переключатель и считывает его состояние, формирует и принимает сигналы по RS-232 [4]. Максимальное значение сопротивления R_1 заносится в память контроллера M_6 при калибровке устройства. Программное обеспечение контроллера учитывает паразитное перекрестное влияние компонентов газов на результаты измерения (ненулевую чувствительность к CO при температуре 190°C или к NH₃ при температуре 250°C). Результаты измерений и служебная информация отображаются на индикаторе и передаются по интерфейсу RS-232.

Заключение. 1. Для анализа многокомпонентных газовых смесей является перспективным использование полупроводниковых методов измерения концентрации.

2. Первичные измерительные преобразователи на основе резистивного элемента с оксидом олова (IV) позволяют производить измерения концентрации NH₃ и CO.

3. Разработанный первичный измерительный преобразователь под управлением микропроцессорного контроллера дает возможность получить погрешность не более 1 ppm по каждой компоненте в диапазоне концентраций 0 – 1000 ppm.

Список литературы

1. Коллеров Д. К. Метрологические основы газоаналитических измерений. Теория и практика получения градуировочных и поверочных газов и газовых смесей. М.: Изд-во Комитета стандартов, 1967. 395 с.
2. Хоровиц П., Хилл У. Искусство схемотехники: в 2 т. М.: Мир, 1984. Т. 1, 2.
3. Магнитометр на датчике Холла / И. О. Оробей [и др.] // Приборы и техника эксперимента. 2003. № 2. С. 141–144.
4. Оробей И. О., Шишкин Н. Я., Сарока В. В. Измеритель концентрации составляющих газовых смесей // Приборы и техника эксперимента. 2004. № 3. С. 154–155.

References

1. Kollerov D. K. *Metrologicheskiye osnovy gazoanaliticheskikh izmereniy. Teoriya i praktika polucheniya graduirovочnykh i poverочnykh gazov i gazovykh smesey* [Metrological foundations of gas analytical measurements. Theory and practice of obtaining calibration and calibration gases and gas mixtures]. Moscow, Izdatel'stvo Komiteta standartov Publ., 1967. 395 p. (In Russian).

2. Horowitz P, Hill W. The Art of Electronics: in 2 vol. Moscow, Mir Publ., 1984, vol. 1, 2 (In Russian).
3. Orobei I. O., Kuz'mitskii I. F., Grinyuk D. A., Zharskii S. E., Saroka V. V., Maksimova M. V. Magnetometer Based on a Hall-Effect Transducer. *Pribory i tekhnika eksperimenta* [Instrument and Experimental Techniques], 2003, vol. 46, no. 2, pp. 271–274 (In Russian).
4. Orobei I. O., Shishkin N. J., Saroka V. V. A Gas-Mixture Concentration Meter. *Pribory i tekhnika eksperimenta* [Instruments and Experimental Techniques], 2004, vol. 47, no. 3, pp. 415–416 (In Russian).

Информация об авторах

Оробей Игорь Олегович – кандидат технических наук, доцент, доцент кафедры автоматизации производственных процессов и электротехники. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: orobei@tut.by

Сарока Виктор Викторович – кандидат технических наук, доцент, доцент кафедры автоматизации производственных процессов и электротехники. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: viksar@mail.ru

Гринюк Дмитрий Анатольевич – кандидат технических наук, доцент, доцент кафедры автоматизации производственных процессов и электротехники. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: hryniuk@tut.by

Олиферович Надежда Михайловна – ассистент кафедры автоматизации производственных процессов и электротехники. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: oliferovich@belstu.by

Анкуда Максим Анатольевич – старший преподаватель кафедры автоматизации производственных процессов и электротехники. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: ankuda@rambler.ru

Information about the authors

Orobei Igor Olegovich – PhD (Engineering), Associate Professor, Assistant Professor, the Department of Automation of Production Processes and Electrical Engineering. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: orobei@tut.by

Saroka Viktor Viktorovich – PhD (Engineering), Associate Professor, Assistant Professor, the Department of Automation of Production Processes and Electrical Engineering. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: viksar@mail.ru

Hryniuk Dzmitry Anatolievich – PhD (Engineering), Associate Professor, Assistant Professor, the Department of Automation of Production Processes and Electrical Engineering. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: hryniuk@tut.by

Oliferovich Nadezhda Mikhailovna – Assistant Lecturer, the Department of Automation of Production Processes and Electrical Engineering. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: oliferovich@belstu.by

Ankuda Maksim Anatolievich – Senior Lecturer, the Department of Automation of Production Processes and Electrical Engineering. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: ankuda@rambler.ru

Поступила после доработки 24.12.2021

УДК 519.2

А. В. Овсянников¹, О. Г. Барашко²¹Белорусский государственный университет²Белорусский государственный технологический университет**ГИСТОГРАММНЫЙ ФИЛЬТР НА ОСНОВЕ НЕЧЕТКОЙ ПРИНАДЛЕЖНОСТИ ДАННЫХ ИНТЕРВАЛУ ГРУППИРОВАНИЯ**

В работе предложена гистограммная оценка плотности вероятности на основе нечеткой принадлежности данных интервалу группирования. Приведена методика построения гистограммной оценки с применением гистограммного сглаживающего фильтра. Описана методика построения такого фильтра. Установлен основной параметр фильтра – коэффициент статистической взаимосвязи между количеством данных, попавших в интервал группирования при единичной функции включения и при подходе с использованием функции принадлежности. Применение итерационной процедуры для гистограммного фильтра позволяет обеспечить лучшую «сглаженность» гистограммы. Результаты моделирования показывают эффективность применения гистограммного фильтра для разных объемов данных. При этом становится не критичным выбор числа интервалов группирования для «правильного» распознавания плотности вероятности. Гистограммный фильтр является простым инструментом, который легко может быть встроен в любой алгоритм для создания гистограммных оценок.

Ключевые слова: плотность вероятности, нечеткая принадлежность, взвешенная гистограммная оценка, гистограммный фильтр.

Для цитирования: Овсянников А. В., Барашко О. Г. Гистограммный фильтр на основе нечеткой принадлежности данных интервалу группирования // Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика. 2021. № 1 (254). С. 58–63.

A. V. Ausiannikov¹, O. G. Barashko²¹Belarusian State University²Belarusian State Technological University**HISTOGRAM FILTER BASED ON FUZZY DATA ACCESSIBILITY TO GROUP INTERVAL**

The paper proposes a histogram estimate of the probability density based on fuzzy data belonging to the grouping interval. A methodology for constructing a histogram estimate using a histogram smoothing filter is presented. The technique of constructing such a filter is described. The main filter parameter is established - the coefficient of the statistical relationship between the amount of data falling into the grouping interval for a single inclusion function and when approaching using the membership function. The use of an iterative procedure for a histogram filter allows for a greater “smoothness” of the histogram. The simulation results show the effectiveness of using a histogram filter for different data volumes. At the same time, the choice of the number of grouping intervals for the “correct” recognition of probability density becomes not critical. The histogram filter is a simple tool that can easily be built into any algorithm for constructing histogram estimates.

Keywords: probability density, fuzzy belonging, histogram estimate, histogram filter.

For citation: Ausiannikov A. V., Barashko O. G. Histogram filter based on fuzzy data accessibility to group interval. *Proceedings of BSTU, issue 3, Physics and Mathematics. Informatics*, 2021, no. 1 (254), pp. 58–63 (In Russian).

Введение. Гистограммная оценка плотности распределения вероятности (ПВ) – одна из самых распространенных, исторически первых и общепринятых элементов описательной, прикладной статистики, в частности, в сфере статистической обработки радиосигналов. Проблема, связанная с гистограммной оценкой в прикладной статистике (ГОСТ Р 50.1.033-2001 Прикладная статистика), также хорошо известна

[1, 2]. В стационарном случае, при исследовании стационарных временных рядов, эффективность гистограммной оценки связана лишь с наличием достаточного времени для ее получения. Если же исследуется нестационарный объект или нестационарный временной ряд и требуется более точное распознавание момента времени, когда состояние объекта или динамика ряда, характеризуемая распределением, значимо

изменилась, то построение простой, быстрой (на малых объемах данных) и эффективной гистограммной оценки ПВ является актуальным.

Развитие непараметрических методов [3] и общая направленность тематики работ в области непараметрических процедур оценивания ПВ (ядерная. проекционная. сплайн и др.) [4] не исключают применения гистограммных оценок, например переменных, к числу которых относятся и полиграммные. Одной из проблем «правильного» распознавания ПВ, наряду с выбором количества интервалов группирования данных, является возможная «изрезанность» гистограммы, что особенно характерно при относительно небольших наборах данных. Решение этой проблемы заключается в применении гистограммных фильтров, например усредняющего, медианного, гауссовского и др. [5–10]. Однако их применение интуитивно и исходит в основном из практической целесообразности. В представляемой работе предлагается теоретически обоснованная методика построения гистограммного фильтра, учитывающая следующие соображения.

Во-первых, можно отказаться от строгой единичной функции включения данных в конкретный интервал группирования. Данные могут находиться вблизи границ интервала и при изменении числа интервалов оказаться в другом интервале. Расположение данных на интервале группирования (близость или удаленность от границ интервала) может интерпретироваться как нечеткая принадлежность данных конкретному интервалу.

Во-вторых, введение понятия нечеткой принадлежности данных интервалу группирования позволяет за счет весовых функций перегруппировать эти данные так, чтобы уменьшилась «изрезанность» гистограммы и тем самым обеспечивалась ее сглаженность.

Таким образом, цель статьи – разработать методику построения простого и эффективного гистограммного фильтра, обеспечивающего разработку при относительно небольших объемах показателей сглаженной гистограммной оценки ПВ на основе нечеткой принадлежности показателей интервалу группирования.

В статье рассматривается одномерная задача построения гистограммного фильтра на примере гистограммной оценки ПВ.

Общая методика построения гистограммной оценки на основе нечеткой принадлежности данных интервалу группирования. В самом общем виде построение гистограммной оценки неизвестной, непрерывной ПВ состоит в следующем. Пусть имеется выборка случайных данных $\{x_i\}$, $i = \overline{1, n}$ и пусть определено разбиение числовой прямой на m непересекающихся и прилегающих друг к другу интервалов A_j , $j = \overline{1, m}$

равной длины $\Delta_x = X_{j+1} - X_j = (x_{\max} - x_{\min}) / m$, $X_{m+1} = x_{\max} = \max_i x_i$, $X_1 = x_{\min} = \min_i x_i$, где X_j – границы интервалов. Тогда нормализованная гистограммная оценка ПВ будет определяться вектором $\{g_j = v_j / \Delta_x n\}$, где $v_j = \sum_{x_i \in A_j} I_j(x_i)$ – целое число данных, попавших в A_j интервал.

$\sum_j v_j = n$, $I_j(x_i) = \begin{cases} 1, & \text{если } x_i \in A_j, \\ 0, & \text{если } x_i \notin A_j \end{cases}$ – индикаторная функция.

Заменим индикаторную функцию $I_j(x_i)$ (единичную функцию включения) весовой функцией $\mu_j(x_i)$, $0 \leq \mu_j(x) \leq 1$, которая будет характеризовать нечеткую принадлежность данных $\{x_i\}$, $i = \overline{1, n}$ интервалу группирования A_j . Заметим, что если область определения отдельной j -той индикаторной функции составляет величину Δ_x , то область определения весовой функции может быть значительно шире $\Delta_\mu > \Delta_x$ и зависеть от ее конкретного выбора. Для конкретизации этого значения и из практических соображений будем полагать, что $\Delta_\mu = x_{j+1} - x_{j-1}$, где x_{j-1} , x_{j+1} – точки середины интервалов группирования $x_j = (X_{j+1} - X_j) / 2$.

Статистическим эквивалентом числа v_j будет, в общем случае, вещественное число, равное

$$u_j = \sum_i \mu_j(x_i) = \sum_{x_i \in A_{j-1}} \mu_j(x_i) + \sum_{x_i \in A_j} \mu_j(x_i) + \sum_{x_i \in A_{j+1}} \mu_j(x_i), \quad j = \overline{1, m}. \quad (1)$$

Формула (1) учитывает вес некоторого числа данных, принадлежащих соседним с A_j участкам: A_{j-1} и A_{j+1} . Очевидно, что всегда выполняется неравенство $v_j \geq u_{A_j} = \sum_{x_i \in A_j} \mu_j(x_i)$, где знак равенства

будет соответствовать предельному случаю равенства весовой и индикаторной функции.

Для выполнения общих условий нормировки необходимо выполнение соотношений

$$\begin{cases} 1) \sum_j \mu_j(x) = 1, \\ 2) \sum_j \sum_i \mu_j(x_i) = \sum_j u_j = n, \\ 3) 0 \leq \mu_j(x) \leq 1, \end{cases} \quad (2)$$

определяющих специальный вид функций $\mu_j(x)$.

Так, в частности, первое условие системы (2) указывает на их взаимную симметрию на соприкасающихся интервалах и взаимозависимость, а также особый вид для конечных интервалов A_1 и A_m . Таким образом, гистограммная оценка ПВ с весовой функцией, характеризующей нечеткую принадлежность данных интервалу группирования, будет следующей:

$$f_j^* = u_j / \Delta_x n, \quad j = \overline{1, m}. \quad (3)$$

На основании приведенных соображений дадим общее определение введенной гистограммной оценки (3).

Определение. Гистограммную оценку ПВ (3) будем называть *взвешенной гистограммной оценкой* (ВГО), полученной с использованием специальных весовых функций $\mu_j(x)$, характеризующих нечеткую принадлежность данных j -тому интервалу группирования и для которых выполняются условия (2).

Сделаем замечание. Оценка (3) рассматривается в статье только в контексте ее применения в гистограммном фильтре, поскольку сама по себе она не является асимптотически сходящейся по вероятности при $n \rightarrow \infty$ к истинной.

Реализация гистограммного фильтра.

Для построения гистограммного сглаживающего фильтра определим *коэффициент статистической взаимосвязи* между числом v_j и числом

$u_{Aj} = \sum_{x_i \in A_j} \mu_j(x_i)$, которое соответствует взвешенному числу данных, попавших в j -тый интервал

$$k = \frac{\bar{u}_{Aj}}{\bar{v}_j} = \frac{1}{\Delta_x} \int \mu_j(x) dx. \quad (4)$$

Черта над символами в формуле (4) означает, что их отношение устойчиво для исследуемой выборки данных. Тот же результат можно получить в общем случае, используя усреднение функции принадлежности $k = \int_{\Delta_x} \mu dx / \int_{\Delta_x} dx$.

Ограничиваясь первым членом разложения в ряд Тейлора ПВ в точке середины интервала группирования x_j , получим результат, совпадающий с (4). Формула (4) справедлива для внутренних интервалов гистограммы ($j = \overline{2, m-1}$). Для конечных интервалов $j = 1, m$, исходя из условий нормировки (2) и в том случае, если $\Delta_\mu = x_{j+1} - x_{j-1}$, получим

$$k_e = \Delta_x^{-1} \left(\int_{\Delta_x/2} 1(x) dx + \int_{\Delta_x/2} \mu(x) dx \right) = (1+k)/2. \quad (5)$$

С учетом определенных формулами (1), (4), (5) коэффициентов k, k_e можем записать соотношение между числами \bar{v}_j и \bar{u}_j , которое будет представлять собой *гистограммный фильтр нулевого порядка* (априорные данные о предполагаемой ПВ отсутствуют) в одномерном случае:

$$\begin{cases} \bar{u}_j = \alpha \bar{v}_{j-1} + k \bar{v}_j + \alpha \bar{v}_{j+1}, \quad j = \overline{2, m-1}, \\ \alpha = \bar{u}_{Aj-1} / \bar{v}_{j-1} = \bar{u}_{Aj+1} / \bar{v}_{j+1} = (1-k)/2, \\ \bar{u}_1 = k_e \bar{v}_1 + (1-k_e) \bar{v}_2, \\ \bar{u}_m = (1-k_e) \bar{v}_{m-1} + k_e \bar{v}_m. \end{cases} \quad (6)$$

Заменой переменных \bar{v}_j, \bar{u}_j на $g_j = v_j / \Delta_x n$ и f_j^* получим гистограммный фильтр относительно значений ПВ на интервале группирования данных:

$$\begin{cases} f_j^* = \alpha g_{j-1} + k g_j + \alpha g_{j+1}, \quad j = \overline{2, m-1}, \\ f_1^* = k_e g_1 + (1-k_e) g_2, \\ f_m^* = (1-k_e) g_{m-1} + k_e g_m. \end{cases} \quad (7)$$

Если в формуле $k = \int_{\Delta_x} \mu dx / \int_{\Delta_x} dx$ не ограничиваться первым членом разложения в ряд

Тейлора ПВ, можем получить гистограммные фильтры высших порядков, требующих априорных знаний о предполагаемой ПВ. В данной работе рассматривается только гистограммный фильтр нулевого порядка.

Введением итеративной процедуры для формул (6), (7) можно добиться большей степени сглаживания:

$$\begin{cases} \bar{u}_j^{q+1} = \alpha \bar{u}_{j-1}^q + k \bar{u}_j^q + \alpha \bar{u}_{j+1}^q, \quad j = \\ = \overline{2, m-1}, \\ \bar{u}_1^{q+1} = k_e \bar{u}_1^q + (1-k_e) \bar{u}_2^q, \\ \bar{u}_m^{q+1} = (1-k_e) \bar{u}_{m-1}^q + k_e \bar{u}_m^q, \end{cases} \quad (8)$$

$$\begin{cases} f_j^{*q+1} = \alpha f_{j-1}^{*q} + k f_j^{*q} + \alpha f_{j+1}^{*q}, \quad j = \\ = \overline{2, m-1}, \\ f_1^{*q+1} = k_e f_1^{*q} + (1-k_e) f_2^{*q}, \\ f_m^{*q+1} = (1-k_e) f_{m-1}^{*q} + k_e f_m^{*q}, \end{cases} \quad (9)$$

где q – порядковый номер итерации, $q = 1$ соответствует процедуре (6), (7). Заметим, что используя

аналогичный подход к фильтрации многомерных данных, в частности гистограмм изображений, получаем теоретически обоснованные результаты [5–9].

Перейдем к определению значения коэффициента k . При отсутствии априорных данных о предполагаемом виде ПВ, можно воспользоваться «информационным подходом» и показать, что оптимальным значением весовых коэффициентов фильтра будет $k=1/3$. Это следует из условия максимизации энтропии $-\sum_{i=j-1}^{j+1} K_i \log(K_i) \rightarrow \max_k$, где k_i – информационный вклад (весовой коэффициент) i -того интервала: $K_i = \alpha = (1-k)/2$ для $i = j-1, j+1$ и $K_j = k$, $0 \leq K_i \leq 1$, $\sum_{i=j-1}^{j+1} K_i = 1$.

Для упрощения решения задачи и последующего моделирования функции $\mu_j(x)$ можно выбрать ступенчатыми и симметричными. В этом случае, на основании формулы (4), коэффициент k для каждого внутреннего интервала группирования ($j = \overline{2, m-1}$) будет постоянен и одинаков: $\mu_j(x) = \{k, \text{ для } A_j; \alpha \text{ для } A_{j-1}, A_{j+1}\}$, а для конечных интервалов соответственно $\mu_1(x) = \{k_e \text{ для } A_1; \alpha \text{ для } A_2\}$ и $\mu_m(x) = \{k_e \text{ для } A_m; \alpha \text{ для } A_{m-1}\}$.

Рассмотрим теперь основные свойства выборочной статистики $\chi^2_{Aj} = \sum_{j=1}^m [\bar{u}_{Aj} - np_j]^2 / np_j$ по отношению к стандартной величине $\chi^2 = \sum_{j=1}^m [\bar{v}_j - np_j]^2 / np_j$ с $m-1$ степенями свободы, а также плотностью вероятности $f(x) = \left[2^{\frac{m-1}{2}} \Gamma\left(\frac{m-1}{2}\right) \right]^{-1} x^{\frac{m-3}{2}} e^{-\frac{x}{2}}$, $x > 0$, параметрами математического ожидания $M\chi^2 = m-1$ и дисперсии: $D\chi^2 = 2M\chi^2 = 2(m-1)$.

Теорема. В условиях нормального распределения выборочной совокупности при $n \rightarrow \infty$ распределение величины χ^2_{Aj} определяется ПВ:

$$f_{Aj}(x) = \left[2^{\frac{m-1}{2}} k_2 \Gamma\left(\frac{m-1}{2}\right) \right]^{-1} \times \left(\frac{x-C}{k^2} \right)^{\frac{m-3}{2}} e^{-\frac{x-C}{2k^2}}, \quad C = n(1-k)^2, \quad x > 0 \quad (10)$$

с параметрами математического ожидания и дисперсии, равными

$$\begin{cases} M\chi^2_{Aj} = k^2(m-1) + 2n(1-k)^2, \\ D\chi^2_{Aj} = k^4 D\chi = 2k^4(m-1). \end{cases} \quad (11)$$

Доказательство. Подставим $\bar{u}_{Aj} = k\bar{v}_j$ в выражение для статистики χ^2_{Aj} , получим

$$\begin{aligned} \chi^2_{Aj} &= \sum_{j=1}^m [k\bar{v}_j - np_j]^2 / np_j = \\ &= k^2 \sum_{j=1}^m \bar{v}_j^2 / np_j - n(2k-1), \end{aligned}$$

и поскольку $M \sum_{j=1}^m \bar{v}_j^2 / np_j = n + m - 1$, то математическое ожидание статистики χ^2_{Aj} получается следующим:

$$M\chi^2_{Aj} = k^2 M\chi^2 + n(1-k)^2. \quad (12)$$

Линейное преобразование случайной величины χ^2 приводит к ПВ величины χ^2_{Aj} следующего вида: $f_{Aj}(x) = f((x-C)/k^2)/k^2$, что соответствует формуле (10) с параметрами математического ожидания и дисперсии, определяемыми формулами (11). Таким образом, теорема доказана.

Следствие. Линейная зависимость статистик (12) позволяет определить значение параметра k_{Aj} , при котором значение $M\chi^2_{Aj}$ стремится к минимуму: $k_{Aj} = [1 + (m-1)/n]^{-1}$. При этом значении коэффициента математическое ожидание статистики χ^2_{Aj} равно $M\chi^2_{Aj} = M\chi^2 / 2$, т. е. качество, уверенность «правильного распознавания» неизвестной ПВ возрастают вдвое.

Моделирование гистограммного фильтра. В подразделе приведены примеры некоторых результатов моделирования и применения гистограммного фильтра ($k=1/3$) к генерируемому случайным данным (число выборок 5), распределенным с нормальной плотностью $f(x) = (2\pi\sigma_x^2)^{-1/2} \exp(-x^2/2\sigma_x^2)$, $\sigma_x^2 = 1$. Сравнились критерии: χ^2 – стандартный и $\chi^2_{\text{вго}} = \sum_{j=1}^m [\bar{u}_{Aj} - np_j]^2 / np_j$ (см. табл. 1, 2). В табл. 1 и 2 также приведены: вероятности возможного превышения полученного значения статистики при истинности нулевой гипотезы P_v и P_u .

Гипотезу о согласии не следует отвергать, если $Pv(\chi_{кр}^2 > \chi^2) > \alpha^*$, $Pu(\chi_{кр}^2 > \chi_{вго}^2) > \alpha^*$, где $\alpha^* = 0,05$ – заданный уровень значимости, $\chi_{кр}^2$ – критическое значение при заданном уровне значимости.

Таблица 1

Статистики и вероятности при $n = 300, m = 11$

№	$k_{выб}$	$\chi_{кр}^2$	χ^2	$\chi_{вго}^2$	Pv	Pu
1	0,547	18,30	19,98	12,91	0,029	0,228
2	0,5857		10,97	5,36	0,359	0,865
3	0,541		22,85	13,87	0,011	0,178
4	0,498		6,56	1,12	0,766	0,999
5	0,767		19,75	17,45	0,031	0,064

Таблица 2

Статистики и вероятности при $n = 1000, m = 19$

№	$k_{выб}$	$\chi_{кр}^2$	χ^2	$\chi_{вго}^2$	Pv	Pu
1	0,389	28,87	37,87	15,38	0,004	0,635
2	0,458		20,75	9,20	0,291	0,954
3	0,431		8,21	3,74	0,975	0,999
4	0,411		21,20	8,68	0,269	0,966
5	0,546		30,74	20,82	0,031	0,288

Для сопоставления результатов моделирования с коэффициентом $k=1/3$ вычислялись выборочные коэффициенты, использующие априорные сведения о теоретических вероятностях:

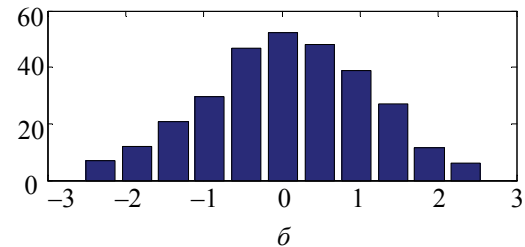
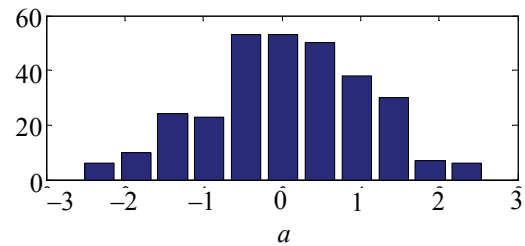
$$k_{выб} = 1 + 2 \left[\sum_{j=1}^m \bar{V}_j^2 / np_j \right]^{-1} \left[\sum_{j=1}^m (\bar{v}_j - np_j) \bar{V}_j / np_j \right]$$

(второй столбец, табл. 1 и 2), найденные из условия $\chi_{вго}^2 \rightarrow \min_k$. Значения величин, входящих

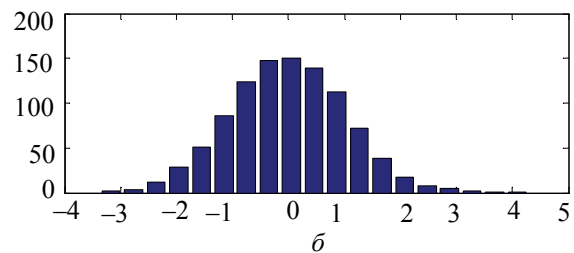
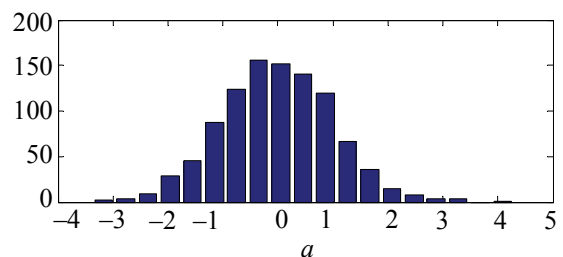
в формулу $\bar{V}_j = \bar{v}_{j-1} - 2\bar{v}_j + \bar{v}_{j+1}$ для $j = \overline{2, m-1}$ и $\bar{V}_1 = -\bar{v}_1 + \bar{v}_2$, $\bar{V}_m = -\bar{v}_m + \bar{v}_{m-1}$. Вычисляемые в

результате моделирования коэффициенты $k_{выб}$ оказываются меньше единицы, а не равны ей, как при стандартном подходе построения гистограммы. Этот эффект свидетельствует о возможности применения гистограммного фильтра (формулы (6)–(9)) при относительно небольших объемах выборок. Многочисленные результаты моделирования показывают, что с увеличением объема выборки коэффициент $k_{выб}$ стремится к единице, и поэтому применение гистограммного фильтра становится нецелесообразным.

В табл. 1 приведены результаты моделирования при $n=300, m=11$. На рис. 1 показаны столбцовые гистограммы векторов v (рис. 1, а), u (рис. 1, б), полученные в результате моделирования (строка 3, табл. 1).

Рис. 1. Столбцовые гистограммы векторов v (а), u (б), полученные в результате моделирования (строка 3, табл. 1)

В табл. 2 приведены результаты моделирования при $n=1000, m=19$. На рис. 2 приведены столбцовые гистограммы векторов v (рис. 2, а), u (рис. 2, б), полученные в результате моделирования (строка 1, табл. 2).

Рис. 2. Столбцовые гистограммы векторов v (а), u (б), полученные в результате моделирования (строка 1, табл. 2)

Заключение. Рассмотренная в работе методика построения и применения одномерного гистограммного фильтра является простым и вместе с тем эффективным инструментом статистического анализа данных при относительно небольших объемах данных, которая подтверждается результатами моделирования. Из табл. 1 и табл. 2 видим, что $\chi_{кр}^2 > \chi_{вго}^2$ и $\chi^2 > \chi_{вго}^2$ во всех 5 экспериментах. В то время как стандартная статистика может «ошибаться» (строки 1, 3, 5, табл. 1 и строки 1, 5, табл. 2).

Гистограммный фильтр является простым инструментом, который легко может быть встроено в любой алгоритм для создания гистограммных оценок.

Список литературы

1. Орлов Ю. Н. Оптимальное разбиение гистограммы для оценивания выборочной плотности функции распределения нестационарного временного ряда // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша. 2013. № 14. С. 26–52. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2013-14>. (дата обращения: 10.02.2021).
2. Chong G., Yongho J., Yi L. Nonparametric density estimation in high-dimensions // *Computer Science*. 2013. No. 23. P. 1131–1153.
3. Орлов А. И. Новая парадигма прикладной статистики // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 2012. Т. 78. № 11. С. 87–93.
4. Devroye L., Györfi L. *Nonparametric Density Estimation: The L1 View*. New York: John Wiley Sons, 1985. 356 p.
5. Gonzalez R. *Digital Image Processing*. Pearson Hall, 2008, 976 p.
6. Solomon C. J., Breckon T. P. *Fundamentals of Digital Image Processing: A Practical Approach with Examples in Matlab*. Wiley-Blackwell, 2010. 344 p. DOI: 10.1002/9780470689776.
7. Gonzalez R. *Digital image processing*. New York, NY: Pearson, 2018. 512 p.
8. Овсянников А. В. Применение стохастических формирующих фильтров. Изд. Дом: LAP LAMBERT Academic Publishing, OmniScriptum GmbH & Co. KG, Saarbrücken, Germany, 2017. 64 p.
9. Bernd J. *Digital Image Processing*. Springer Berlin Heidelberg New York, 2005. 658 p.
10. Chakravorty P. «What is a Signal? [Lecture Notes]» // *IEEE Signal Processing Magazine*. 2018. No. 35 (5). P. 175–177. DOI: 10.1109/MSP.2018.2832195.

References

1. Orlov Y. N. Optimal histogram partitioning for estimating the sample density of the distribution function of an unsteady time series. *Preprinty IPM im. M. V. Keldysha* [Preprints of the Institute of Applied Mathematics M. V. Keldysh], 2013, no. 14, pp. 26–52. Available at: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2013-14>. (accessed 10.02.2021) (In Russian).
2. Chong G., Yongho J., Yi L. Nonparametric density estimation in high-dimensions. *Computer Science*, 2013, no. 23, pp. 1131–1153.
3. Orlov A. I. The new paradigm of applied statistics. *Zavodskaya laboratoriya. Diagnostika materialov* [Industrial Laboratory. Diagnostics of Materials], 2012, vol. 78, no. 11, pp. 87–93 (In Russian).
4. Devroye L., Györfi L. *Nonparametric Density Estimation: The L1 View*. New York, John Wiley Sons Publ., 1985. 356 p.
5. Gonzalez R. *Digital Image Processing*. Pearson Hall Publ., 2008. 976 p.
6. Solomon C. J., Breckon T. P. *Fundamentals of Digital Image Processing: A Practical Approach with Examples in Matlab*. Wiley-Blackwell Publ., 2010. 344 p. DOI: 10.1002/9780470689776.
7. Gonzalez R. *Digital image processing*. New York, NY, Pearson Publ., 2018. 512 p.
8. Ovsyannikov A. V. The use of stochastic shaping filters. *Izdatel'skiy Dom LAP LAMBERT Academic Publishing, OmniScriptum GmbH & Co. KG Publ., Saarbrücken, Germany, 2017. 64 p.* (In Russian).
9. Bernd J. *Digital Image Processing*. Springer Publ., Berlin, Heidelberg, New York, 2005, 658 p.
10. Chakravorty P. What is a Signal [Lecture Notes]. *IEEE Signal Processing Magazine*, 2018, no. 35 (5), pp. 175–177. DOI: 10.1109/MSP.2018.2832195.

Информация об авторах

Овсянников Андрей Витальевич – кандидат технических наук, доцент, доцент кафедры информационных технологий. Белорусский государственный университет (220030, г. Минск, пр-т. Независимости, 4, Республика Беларусь). E-mail: andovs@mail.ru

Барашко Олег Георгиевич – кандидат технических наук, доцент, доцент кафедры автоматизации производственных процессов и электротехники. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: barashko@belstu.by

Information about the authors

Ausiannikov Andrei Vitalievich – PhD (Engineering), Associate Professor, Assistant Professor, the Department of Information Technology. Belarusian State University (4, Nezavisimosti Ave., 220030, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: andovs@mail.ru

Barashko Oleg Georgievich – PhD (Engineering), Associate Professor, Assistant Professor, the Department of Automation of Production Processes and Electrical Engineering. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: barashko@belstu.by

Поступила после доработки 15.10.2021

АЛГОРИТМИЗАЦИЯ И ПРОГРАММИРОВАНИЕ

ALGORITHMIC AND PROGRAMMING

УДК 004.421:005.922.52

О. А. Новосельская, Н. А. Савчук, А. Н. Щербакова, Д. М. Романенко
Белорусский государственный технологический университет

АЛГОРИТМЫ И ПРОГРАММНОЕ СРЕДСТВО ДЛЯ ГЕНЕРАЦИИ ЗАЩИТНЫХ ИЗОБРАЖЕНИЙ ПЕЧАТНЫХ ДОКУМЕНТОВ

В статье рассмотрены способ формирования защитного изображения для печати и программное средство, автоматизирующее процесс его получения. Проведен анализ проблемы защиты печатной продукции, который позволил определить возможность разработать новые защитные изображения и снизить затраты на защиту печатной продукции от фальсификации, например, при их внедрении в элементы фирменного стиля или бланочно-этикеточную продукцию. Для получения защитного изображения проведен эксперимент, в ходе которого разработаны базовые защитные элементы в программе векторной графики и на их основе сформировано защитное изображение, основным отличительным признаком которого от гильошей является наличие сложной переменной структуры, которая формирует смешанной цвет. Для оценки степени формирования защиты на базе РУП «Издательство “Белорусский Дом печати”» изготовлены печатные формы и проведено запечатывание различных видов бумаги. Экспериментальные образцы показали, что важным для формирования защитного изображения являются частота и толщина линий. Изначально элементы создавались на основе базовых примитивов. В процессе разработки было определено, что в основном используются стандартные аффинные преобразования, которые могут быть заложены в алгоритм построения изображения. Разработаны алгоритм построения защитного элемента и программное средство. После вывода и сканирования разработанного изображения выявлено, что граничные контуры перестают восприниматься как составные, а воспроизводятся в виде непрерывного градиента с растровой структурой. Чтобы оценить степень защиты, было проведено сравнение изображений по показателю информационной емкости. Установлена возможность внедрения закодированной информации в разработанные защитные изображения.

Ключевые слова: автотипный синтез цвета, гильош, алгоритм, аффинные преобразования, программное средство, генерация.

Для цитирования: Новосельская О. А., Савчук Н. А., Щербакова А. Н., Романенко Д. М. Алгоритмы и программное средство для генерации защитных изображений печатных документов // Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика. 2022. № 1 (254). С. 64–72.

O. A. Novoselskaya, N. A. Savchuk, A. N. Shcherbakova, D. M. Romanenko
Belarusian State Technological University

ALGORITHMS AND SOFTWARE FOR GENERATING PROTECTIVE IMAGES FOR PRINTED DOCUMENTS

The method of forming a protective image for its graphic arts reproduction and an algorithm for its automation is discussed in the article. The analysis of the problem of printed products protection is carried out. The analysis made it possible to determine that new protective images can be developed and thus reduce the cost of protecting the printed products from falsification, for example, when new protective images are introduced into corporate identity elements or letterhead products. In order to form a protective image, an experiment was carried out during which the basic protective elements in vector graphics program were developed and a protective image was formed on their basis, the main distinguishing feature of which from guilloche is the presence of a complex variable structure that forms a mixed color. To assess the degree of formation of protection on the basis of the GI “Publishing House “Belarusian Press House””, printing plates were made and various types of paper were sealed. Experimental

samples showed that the frequency and line thickness are important for the protective image formation. Initially, elements were created on the basis of standard primitives. During the development process, it was determined that standard affine transformations, which can be incorporated into the image construction algorithm, are mainly used. Thus an algorithm for constructing a protective element was developed. After scanning the developed image, it was revealed that the boundary contours cease to be perceived as composite, and are reproduced in the form of a continuous gradient with a raster structure. In order to assess the degree of protection, a comparison of the images by information capacity was made. The possibility of introducing encoded information into the developed protective images is shown.

Key words: autotype color synthesis, rose element, algorithm, affine transformations, software tool, generation.

For citation: Novoselskaya O. A., Savchuk N. A., Shcherbakova A. N., Romanenko D. M. Algorithms and Software for Generating Protective Images for Printed Documents. *Proceedings of BSTU, issue 3, Physics and Mathematics. Informatics*, 2022, no. 1 (254), pp. 64–72 (In Russian).

Введение. В современном информационном обществе с учетом важности решения проблемы авторского права на документы, а также всевозрастающих атак на авторский контент именно использование специальных защитных изображений, содержащих авторскую информацию, является наиболее перспективным решением. Последние с точки зрения печати могут быть сформированы несколькими способами: физико-химическими (за счет применения специальных материалов), технологическими (с использованием разнообразного печатного оборудования, чипов), информационным (внедрение латентных изображений, методов кодирования / декодирования информации и др.) [1–3]. В литературе [4–6] приведены способы защиты, основанные на формировании специальных узоров с заданной закономерностью, воспроизведение которой основано на генерации нескольких растровых структур. Основным недостатком является наличие растривания, которое зависит от воспроизводящей техники и может быть некорректно воспроизведено на современных цифровых печатных машинах.

Существует достаточно много программных продуктов, которые позволяют генерировать различные варианты гильошей.

Программный продукт GLISSANDO® – это инструментальное средство для создания элементов гильош-дизайна, применяемых при защите документов и ценных бумаг [7]. Программа GLISSANDO® позволяет создавать сложные гильоширные элементы – различные декоративные и защитные сетки, розетки, бордюры, а также другие по заданным точным числовым параметрам. Графической средой GLISSANDO® является стандартная библиотека OpenGL. Геометрическим базисом фигур являются кривые Безье, позволяющие применять исключительно интерактивный подход при построении сложных геометрических объектов. Конечным результатом работы GLISSANDO® является экспорти-

рованный файл формата Adobe® Illustrator® Artwork (*.ai) или Encapsulated PostScript (*.eps).

Однако необходимо отметить, что программа хотя и имеет возможности, но специально не предназначена для работы с изображениями со слоями, цветом и текстом и представляет скорее «препроцессор» для такого редактора. Программное обеспечение обладает достаточно широким функционалом, однако не предназначено для формирования чередующихся цветных узоров, поскольку техника гильоша подразумевает наличие специальных красок для воспроизведения.

Существуют бесплатные приложения типа ZebraTRACE [8], а также платные программные продукты – Graver® 1.0 [9], SecureDraw [10]. Программы реализуют создание защитных сеток, тангиров, гильошей, виньеток. Платные продукты отличаются собственными алгоритмами для анализа и воспроизведения растрового изображения в виде микроштрихового либо возможностями разработки уникальных гильош-композиций. Однако, как и в предыдущих случаях, не реализуется чередование цвета штрихов, нет возможности осуществить безрастровое воспроизведение цвета без использования специальных красок.

В результате обзора программных средств определено, что защитные изображения целесообразно разрабатывать в векторной графике. С целью снижения себестоимости защитных элементов эффективным будет применение субтрактивного синтеза в качестве средства нанесения краски и формирование тонового перехода на основании низкой разрешающей способности глаза при аддитивном смешении рядом стоящих штрихов. Таким образом, итоговое изображение будет сформировано средствами автотипного синтеза.

При анализе проблемы защиты печатной продукции выявлено следующее:

– большинство защитных элементов построено на базе штрихов;

– цвет может формироваться как химически (на основе специальных красок), так и технологически (например, металлографическая печать);

– техника растривания не применима к высокоуровневым защитам;

– основными недостатками высокоуровневых защит является сложность технологического процесса и высокая себестоимость изготовления такой печатной продукции.

Это позволило определить, что для минимизации затрат на воспроизведение защитного изображения наиболее оптимальным будет использование стандартных цветов печатной триады. При этом к изображению следует предъявить ряд требований:

– в качестве геометрических элементов необходимо использовать линии, эллипсы и более сложные фигуры, которые можно разработать в программах векторной графики;

– плотность узора должна формироваться подобными структурами – как пересекающимися, так и не пересекающимися. При этом следует использовать операции масштабирования, поворота и трансформации переноса;

– суммарная цветность при передаче полутонов должна формироваться дискретно на базе основных цветов печатной техники. За счет низкой разрешающей способности глаза не должна быть различима.

Таким образом, проведенный анализ показал необходимость разработки алгоритмов генерации защитных векторных изображений путем комбинирования линий и простых геометрических фигур с чередованием цвета и разработки на их основе соответствующего программного средства.

Основная часть. Известно, что человеческий глаз различает преимущественно три зоны излучения: сине-фиолетовую, зеленую и красную [11]. При этом известно свойство глаза воспринимать одинаково цвета излучений, которые имеют различный спектральный состав, называемое метамерностью [12]. Метамерность и трехкомпонентность цветового зрения дают возможность получить множество цветов с помощью ограниченного их набора, например, красными, зелеными и синими излучениями либо голубой, пурпурной и желтой красками. Схематично метамерность можно представить в следующем виде (рис. 1).

Так, например, голубой цвет может быть получен на экране монитора путем направленного выделения излучения длиной волны 500 нм и смещением синего и зеленого излучений в определенном соотношении с получением этого же голубого цвета. Пользователь не сможет увидеть разницы, так как природа цвета не меняется (воздействуют излучения), а спектральный состав излучения глазом не распознается.

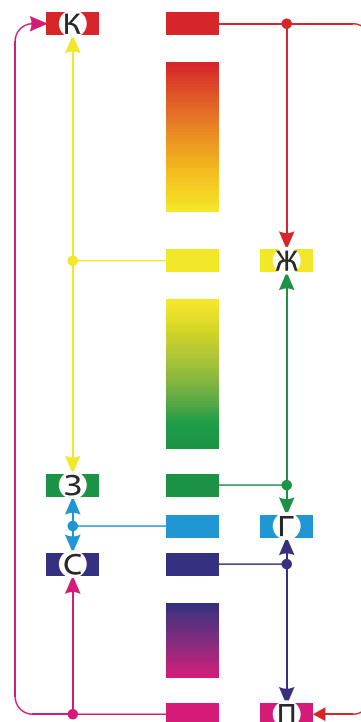


Рис. 1. Схема получения цвета на основе явления метамерности зрения

Чем выше насыщенность цвета, тем меньше соответствующих ему метамерных цветов. Наибольшее количество метамерных цветов имеют серые и белые ахроматические цвета, они могут быть воспроизведены наибольшим числом комбинаций из различающихся по спектральному составу излучений [13].

Вторым аспектом человеческого зрения является ограниченная разрешающая способность глаза. На этом явлении основано получение цветного изображения в полиграфической технологии. Вместо применения большого количества разнообразных оттенков красок подобно палитре в живописи, в полиграфии воспроизводят многообразие цветов только четырьмя красками за счет дискретизации (растривания) тонового изображения. Размер точек дискретного изображения настолько мал, что с расстояния в 30 см рассмотреть их невозможно. Это приводит к пространственному смешению соседних красок и позволяет воспроизвести порядка 3 млн оттенков, что вполне достаточно с учетом цветового охвата среднестатистического наблюдателя, который замечает порядка 2 млн оттенков и переходов [14]. Подобную дискретизацию возможно реализовать и для защитных элементов. Особенностью элементов является визуальная четкость контуров, поэтому технологии растривания для них не подходят, а разработка и апробация методики должна вестись с использованием векторной графики.

С целью формирования защитного изображения проведен эксперимент, в ходе которого разработаны базовые защитные элементы в программе векторной графики и на их основе сформировано защитное изображение, основным отличительным признаком которого от гильошей является наличие сложной переменной структуры, которая формирует смесевой цвет. Примеры защитных узоров показаны ниже (рис. 2).

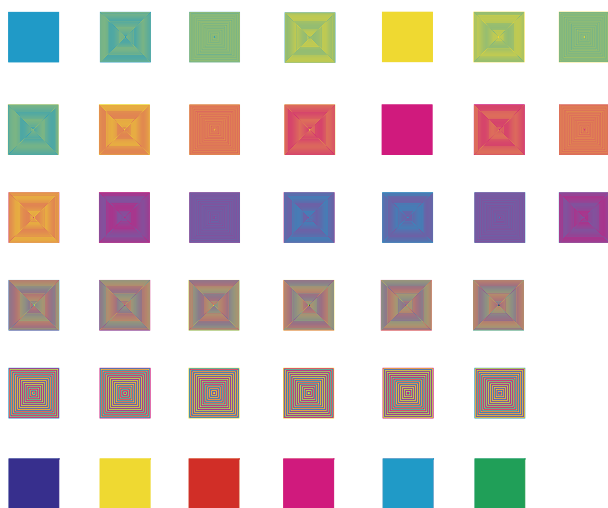


Рис. 2. Примеры разработанных защитных узоров

Для оценки степени формирования защиты на базе РУП «Издательство “Белорусский Дом печати”» были изготовлены печатные формы и проведено запечатывание различных видов бумаги. Экспериментальные образцы показали, что важным для формирования защитного изображения являются частота и толщина линий.

Изначально элементы создавались на основе базовых примитивов. В процессе разработки было определено, что в основном используются стандартные аффинные преобразования, которые могут быть заложены в алгоритм построения изображения.

В результате анализа техник работы с защитными элементами выявлены следующие закономерности.

1. Процесс создания защитного элемента является циклическим.
2. Защитный элемент состоит из нескольких базовых элементов.
3. К защитному элементу применяется несколько аффинных преобразований.
4. Для формирования узора необходима проверка условия: достаточно ли количество преобразований?
5. Формирование узора защитного элемента заканчивается при наличии достаточного уровня сложности.

6. Итоговый узор определяется положением нескольких базовых, сгруппированных относительно центра наибольшего базового элемента.

Таким образом, был разработан алгоритм построения защитного элемента.

Помимо соблюдения аффинности преобразований необходимо учитывать цветность линий, которые задаются путем последовательных чередований трех базовых цветов идеального субтрактивного синтеза – голубого, пурпурного, желтого. Результирующий цвет будет определяться соотношением толщины линий и очередности задания основных цветов.

Программное приложение для генерации векторных защитных элементов методом автотипного синтеза цвета разрабатывалось с использованием JavaScript-фреймворк Vue.js. Это JavaScript библиотека для создания веб-интерфейсов с применением шаблона архитектуры MVVM (Model-View-ViewModel).

Поскольку Vue работает только на «уровне представления» и не используется для промежуточного программного обеспечения, он может легко интегрироваться с другими проектами и библиотеками. Vue.js обладает широкой функциональностью для уровня представлений и может использоваться для создания мощных одностраничных веб-приложений.

Ядро Vue.JS содержит лишь необходимый функционал для работы с интерфейсом. Поэтому оно компактно, легко интегрируется с другими технологиями, в том числе с jQuery и даже может использоваться вместо него (для разработки простых интерфейсов).

При рассмотрении изображения, полученного автотипным синтезом, на достаточно большом расстоянии происходит пространственное смещение цветов. Ниже представлено одно и то же изображение в разном масштабе (рис. 3).

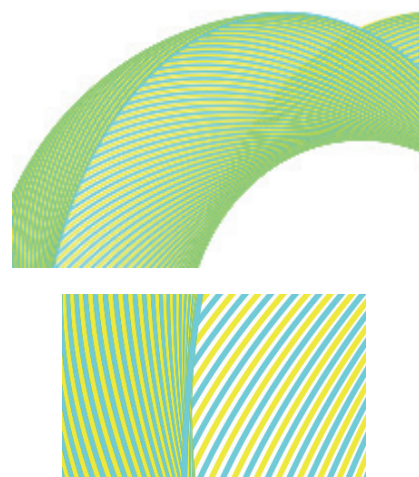


Рис. 3. Защитный элемент в разном масштабе воспроизведения

В разрабатываемом программном продукте красный цвет получается путем чередования желтого и пурпурного цветов. Аналогичным образом получается зеленый цвет – чередованием желтого и голубого; синий – чередованием пурпурного и голубого.

Формирование красного цвета можно представить в виде блок-схемы, которая представлена ниже (рис. 4).

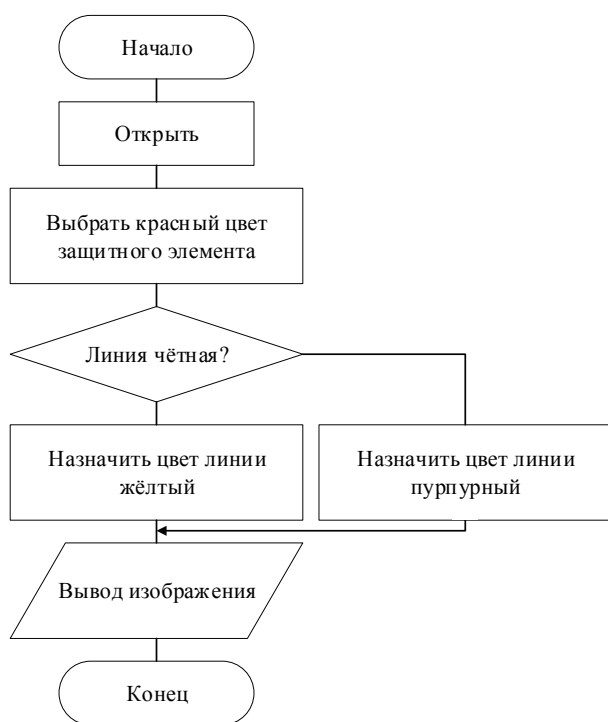


Рис. 4. Алгоритм формирования красного цвета

Программное приложение состоит из нескольких классов. Первым из них является класс Image, который хранит параметры изображения, а именно размеры по вертикали и горизонтали (`this.dimensions = {x:400, y:400}` – по умолчанию 400×400 px), а также цвет фона (прозрачный, сплошной цвет, линейный или радиальный градиент) (листинг).

```

class Image {
  constructor() {
    this.dimensions = {
      x: 400,
      y: 400 }
    this.backgroundMode =
BACKGROUND_MODES.solidColor
    this.backgroundColor = "#000000"
    this.backgroundGradient = {
      angle: 0,
      stops: [{
        color: "#ff0000", position: 0
      },
      {
        color: "#0000ff", position: 100 }
    ] }
  }
}
  
```

```

this.backgroundImage = ""
this.backgroundPosition =
BACKGROUND_POSITIONS.fill
}
  
```

Класс Image

Внешний вид блока ввода параметров изображения представлен на рис. 5.

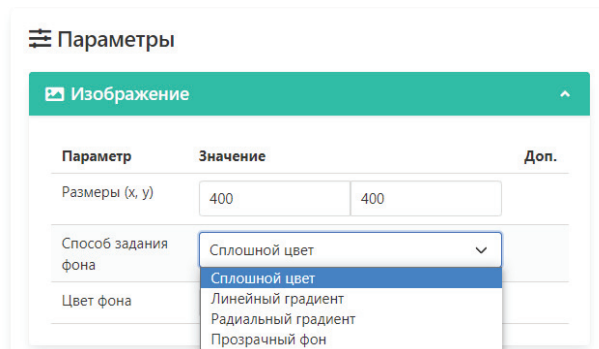


Рис. 5. Внешний вид блока для выбора параметров изображения

Класс Shape хранит информацию о выбранном примитиве (его параметрах: `dimensions` – размеры по горизонтали и вертикали, `transform translate` – смещение по горизонтали и вертикали, `transform scale` – масштабирование по горизонтали и вертикали, `transform rotate` – поворот, `strokeWidth` – толщина обводки. Класс `FinalShape`, который содержит параметры результирующего примитива, наследуется от класса примитива `Shape` (`class FinalShape extends Shape`). Класс `Transition` хранит данные о переходе между примитивами. Содержит `shape` – тип примитива, `customPoints` – хранит координаты точек, заданных пользователем, если был выбран произвольный примитив, `steps` – количество шагов перехода, `pivot` – опорная точка, относительно которой поворачиваются и масштабируются примитивы. Из примитивов можно выбрать эллипс, круг, прямоугольник, квадрат, треугольник, линия либо произвольный примитив. В качестве результирующих цветов есть возможность выбрать красный, зеленый и синий. При выборе красного цвета на четном i -шаге происходит отрисовка примитива желтого цвета, а на нечетном – пурпурного цвета. Следовательно, при выборе результирующего зеленого цвета на четном i -шаге – желтый цвет, на нечетном – голубой, при выборе результирующего синего цвета на четном i -шаге – пурпурный, на нечетном – голубой. Также есть возможность выбрать произвольные цвета для создания гильоша. Полученное изображение можно сохранить в формате SVG или EPS для последующей работы с ним.

Для сохранения полученного изображения в формате EPS использовался язык описания страниц PostScript. Для этого были написаны методы hexToCmyk(hex) для преобразования шестнадцатеричной строки RGB в CMYK и getEpsSource() для формирования содержимого EPS-файла.

Разработанное программное обеспечение реализует вывод изображения в форматах SVG и EPS, что позволяет работать в двух цветовых моделях – RGB, CMYK. Это обеспечивает большие возможности для импортирования сгенерированных узоров в любые дизайнерские решения – баннеры, логотипы и применимо в печати.

В результате для формирования оттенков оранжевого цвета можно управлять соотношением основных цветов желтого и пурпурного соответственно за счет частоты линий или толщины линий. Причем оттенок будет напрямую зависеть от величины соотношения основных цветов (2 : 1, 1 : 2, 3 : 2, 2 : 3 и т. п.). По аналогии с формированием оранжевого цвета можно изменять оттенки желто-зеленого, зеленовато-голубого и фиолетово-сиреневого цветов. Комбинация сгенерированных узоров позволяет сформировать итоговые защитные изображения, приведенные на рис. 6.

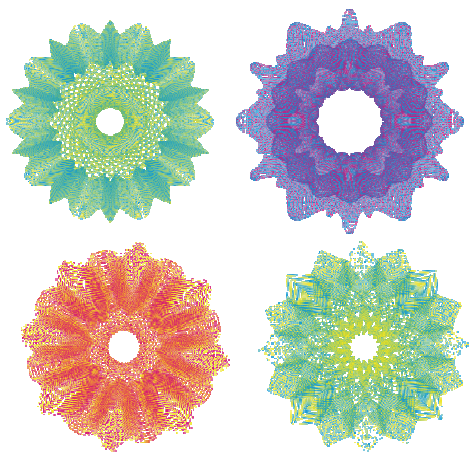


Рис. 6. Разработанные защитные изображения

Осуществлена полиграфическая печать защитных элементов на печатной машине MAN Roland 700 с предварительным выводом печатных форм. Для качественного воспроизведения испытания проводились в спеццехе РУП «Издательство “Белорусский Дом печати”».

После сканирования разработанного изображения граничные контуры перестают восприниматься как составные, а воспроизводятся в виде непрерывного градиента с растровой структурой. Пример результата сканирования и определения цветовых координат на приграничных зонах представлен на рис. 7.

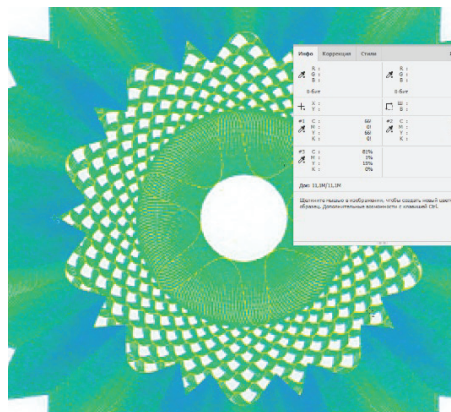


Рис. 7. Результат сканирования и определения цветовых координат

Координаты точки 1 (граница голубого и желтого цветов) равны: голубой – 66%, желтый – 66%, т. е. воспроизводится чисто зеленый цвет. Точка 2 (желтовато-зеленый на границе голубой – желтый): голубой – 50%, желтый – 90%, т. е. создается имитация тонового перехода. Точка 3 (чисто голубой цвет): голубой – 81%, пурпурный – 1%, желтый – 15%.

Анализ данных показывает, что на граничных зонах сумма координат дает оттенки зеленого. Чистые цвета дают ощущение плащечного синего цвета с примесями пурпурного и желтого цветов. На участках с одинаковым соотношением линий воспроизводится чистый зеленый с одинаковыми значениями голубого и желтого (66%). То есть, ни одна точка не воспроизводится с заданным соотношением цветовых координат. Если не знать изначально о параметрах задания цветного гильоширного элемента, то воспроизвести аналогичный эффект безрастровой технологией в системе CMY будет невозможно.

Чтобы оценить возможность интегрирования в защитные изображения авторской информации (методами кодирования или стеганографического осаждения) было проведено сравнение разработанных векторных защитных изображений с аналогичными, выполненными в виде стандартных заливок (рис. 8), по показателю информационной емкости.

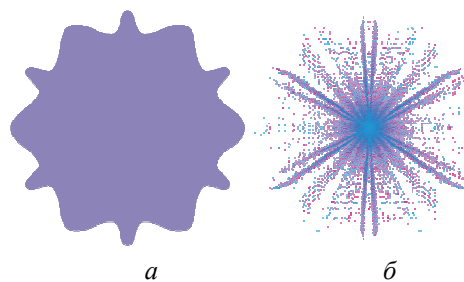


Рис. 8. Изображения для оценки степени защиты:
а – сплошное; б – дискретное

Опытным путем установлено, что информационный объем зависит от количества вершин фигуры, их положения, типа, вида и количества трансформаций, а также от цветности изображения. Эмпирическим путем выведена формула для оценки объема векторного графического файла:

$$V_f = V_b + V_a \cdot N_{el}^2 + \frac{N_c(128 + 512 + V_c)}{N_v}, \quad (1)$$

где V_f – объем файла; V_b – базовый объем файла; N_v – количество вершин; V_c – объем, занимаемый цветом; V_a – объем, занимаемый аффинными преобразованиями; N_{el} – количество элементов; 128 байт занимает вершина, определяющая прямую; 512 байт занимает вершина, определяющая кривую.

По формуле Хартли [15] можно определить информационную емкость:

$$I = l \cdot \log_2 h, \quad (2)$$

где l – число элементов; h – основание системы счисления (количество состояний, которое может принимать элемент, хранящий данное число).

Поскольку изображение на рис. 8, а имеет только два состояния – с заливкой или без нее, а также с абрисом или без него, то для него величина $h = 2$, $l = 1$. Для защитного изображения на рис. 8, б количество элементов составляет 500, а количество состояний определяется исходя из найденного по (1) соотношения, в которое входят аффинные преобразования (трансформации базовых элементов), цветность и толщина линий. Соответственно, соотношение толщины линий может быть кратно единице, двум, трем, то есть иметь количество состояний, равное трем. Цветность, как правило, определяется только для двух красок из трех возможных путем их различного чередования, поэтому h принято равным 2. Количество трансформаций определяется вариантами аффинных преобразований, применяемых в элементе, – поворот, масштабирование, перенос, то есть максимальное количество может равняться трем. Для изображения было применено только одно аффинное преобразование – масштабирование, соответственно $h = 1$, количество цветов было равно 2, соотношение толщин линий было 1 : 1. Таким образом, суммарное h для защитного изображения будет равно $1 + 2 + 1 = 4$. Сравнение информационной емкости для векторного изображения с учетом его состояний по (2) будет иметь вид:

$$I_1 = 1 \cdot \log_2 2 = 1;$$

$$I_2 = 500 \cdot \log_2 4 = 1000.$$

Уточненная формула Хартли для векторного изображения позволяет оценить степень

сложности, достигаемой за счет внедрения защитных элементов в конечный файл.

В результате расчета определено, что защитное изображение содержит информации в 1000 раз больше по сравнению с обычным, что может служить основой для кодирования информации.

Также по данному показателю проведен сравнительный анализ предлагаемых векторных защитных изображений и используемых на практике, который показал, что для стандартных гильошей информационная емкость в соответствии с формулой (2) минимум в 2 раза меньше по сравнению с разработанными защитными изображениями, поскольку отсутствуют состояния цветовых переходов. Это позволяет говорить о более высокой степени защиты полученных изображений. А с учетом возможности варьирования цветовых переходов показатель информационной емкости может отличаться более, чем в 2 раза.

Заключение. Таким образом, для решения проблемы защиты документов важным является введение в продукцию авторской информации, которая на первый взгляд носит характер стандартных форм и заливок. При этом ключевым фактором является возможность воспроизведения такой информации технологией печати без использования специализированного оборудования или материалов.

Базовым элементом защиты выбраны векторные изображения, которые обладают свойством воспроизводимости на любых устройствах вывода без потери качества и возможностью простого представления в алгоритмической структуре данных. Предложен метод формирования цветного векторного изображения, который отличается от стандартных техник воспроизведения за счет безрастровой технологии вывода. Плавность тоновых переходов определяется структурой и параметрами векторного изображения.

Для снижения трудоемкости процесса создания защитных изображений разработано программное обеспечение, которое не имеет аналогов и позволяет формировать цветное изображение с определенной структурой данных путем комбинирования линий и простых геометрических фигур (с учетом цвета).

Возможности дополнительной защиты документов при помощи генерируемых векторных изображений оценивались по показателю информационной емкости предложенного векторного изображения по сравнению с изображениями в виде стандартных заливок. В результате установлено, что предлагаемые защитные изображения содержат информации в среднем в 1000 раз больше. Соответственно,

предложенные защитные векторные изображения могут служить основой для кодирования (или осаждения) в них дополнительной (авторской) информации.

В результате сравнения предложенных защитных векторных изображений с используемыми на практике защитами в виде гильошей,

напечатанных специальными красками, выявлено: показатели цвета будут отличаться минимум в 2 раза, что приводит к увеличению степени защиты. Кроме того, дополнительное варьирование цветовыми переходами позволяет увеличить параметр информационной емкости минимум на 133%.

Список литературы

1. Кондратов А. П. Градиентные и интервальные термоусаживающиеся материалы для защиты полиграфической продукции от фальсификации // Известия высших учебных заведений. Проблемы полиграфии и издательского дела. 2010. Вып. 4. С. 57–65.
2. Чечуга О. В., Ющенко Е. А., Мухина Д. Л. Голографическая и дифракционная фольга как способ защиты полиграфической продукции от фальсификации // Известия ТулГУ. Технические науки. 2013. Вып. 3. С. 441–446.
3. Фролов М. В. Защитные метки с оптическими эффектами // Известия высших учебных заведений. Проблемы полиграфии и издательского дела. 2004. Вып. 4. С. 59–68.
4. Сокол А. И., Сокол Л. Р. Исследование способов формирования защиты печатной продукции от фальсификации на стадии допечатной подготовки // Научно-технический вестник Поволжья. 2018. Вып. 4. С. 159–162. DOI: 10.24153/2079-5920-2018-8-4-159-162.
5. Кашкур И. П. Как защитить печатную продукцию от подделок // Вестник Академии энциклопедических наук. 2014. Вып. 1 (14). С. 5–11.
6. Петрова О. И., Шагров В. Г. Применение скрытых изображений и уровни защиты полиграфической продукции // Актуальные проблемы современной науки. 2015. Вып. 5. С. 226–229.
7. Программа Глиссандо / Главная страница сайта программного обеспечения Глиссандо. URL: <http://www.banknotes.ru/glissando.html> (дата обращения: 13.09.2020).
8. Программа для создания гильоша / Сайт PGREAD.AT.UA. URL: https://pgrad.at.ua/news/programma_dlja_sozdanija_gilosh/2019-11-01-26 (дата обращения: 13.09.2020).
9. Программа для разработки гильош-элементов при защите / Форум сайта feldgrau.info. URL: <https://feldgrau.info/forum/index.php?topic=1945.0> (дата обращения: 13.09.2020).
10. Дубина Н. SecureDraw – векторный редактор гильош-дизайнера // КомпьюАрт. № 8. М., 2003. URL: <http://www.i-type.ru/securedraw.html> (дата обращения: 13.09.2020).
11. Марр Д. Зрение. Информационный подход к изучению представления и обработки зрительных образов. М.: Радио и связь, 1987. 409 с.
12. Пространственное зрение / В. М. Бондаренко [и др.]. СПб.: Наука, 1999. 224 с.
13. Миронова Л. Н. Учение о цвете. Минск: Вышэйшая школа, 1993. 463 с.
14. Домасев М. В., Гнатюк С. П. Цвет, управление цветом, цветовые расчеты и измерения. СПб.: Питер, 2009. 224 с.
15. Дулесов А. С., Кабаева Е. В. Логарифмическая мера информации состояния технического объекта // Современные проблемы науки и образования. 2013. № 1. URL: www.science-education.ru/107-8210 (дата обращения: 13.09.2020).

References

1. Kondratov A. P. Gradient and interval thermoshrinkable materials for the protection of printed products from counterfeiting. *Isvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Problemy poligrafii i isdatelskogo dela* [Higher School of Printing and Media Industry], 2010, issue 4, pp. 57–65 (In Russian).
2. Chechuga O. V., Yushchenko E. A., Mukhina D. L. Holographic and diffraction foil as way of protection of printing products from falsification. *Isvestiya TulGU. Tekhnicheskie nauki* [Proceedings of the TSU. Technical sciences], 2013, issue 3, pp. 441–446 (In Russian).
3. Frolov M. V. Protective tags with optical effects. *Isvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Problemy poligrafii i isdatelskogo dela* [Higher School of Printing and Media Industry], 2004, issue 4, pp. 59–68 (In Russian).
4. Sokol A. I., Sokol L. R. The study of ways to protect printed products from fraud at the prepress stage. *Nauchno-technicheskiy vestnik Povolzh'ya* [Scientific and Technical Volga Region Bulletin], 2018, issue 4, pp. 159–162. DOI: 10.24153/2079-5920-2018-8-4-159-162 (In Russian).
5. Kashkur I. P. How to protect printed products from fakes. *Vestnik Akademii entsiklopedicheskikh nauk* [Bulletin of the Academy of Encyclopedic Sciences], 2014, issue 1 (14), pp. 5–11 (In Russian).

6. Petrova O. I., Shagrov B. G. The use of hidden images and security levels of printing products. *Aktual'nyye problemy sovremennoy nauki* [Actual Problems of Modern Science], 2015, issue 5, pp. 226–229 (In Russian).
7. Program Glissando. Main page of web-site Glissando. Available at: <http://www.banknotes.ru/glissando.html> (accessed 13.09.2020) (In Russian).
8. Program for Creating Rose Elements. Web page PGREAD.AT.UA. Available at: https://pgread.at.ua/news/program-ma_dlja_sozdaniya_gilosh/2019-11-01-26 (accessed 13.09.2020) (In Russian).
9. Program for Creating of Rose Elements while Protecting Documents. Forum of Web Site FELDGRAU.INFO. Available at: <https://feldgrau.info/forum/index.php?topic=1945.0> (accessed 13.09.2020) (In Russian).
10. Dubina N. SecureDraw – Vector Editor for Guilloche Designer. CompuArt. Moscow, 2003, No. 8. Available at: <http://www.i-type.ru/securedraw.html> (accessed 13.09.2020) (In Russian).
11. Marr D. *Zreniye. Informatsionnyy podkhod k izucheniyu predstavleniya i obrabotki zritelnykh obrazov* [Vision. An informational approach to the study of the representation and processing of visual images]. Moscow, Radio i svyaz' Publ., 1987. 409 p. (In Russian).
12. Bondarenko V. M., Danilova M. V., Krasilnikov N. N., Leushina L. I., Nevskaya A. A., Shelepin Yu. E. *Prostranstvennoye zreniye* [Spatial vision]. St. Petersburg, Nauka Publ., 1999. 224 p. (In Russian).
13. Mironova L. N. *Ucheniye o cvete*. [The doctrine of color]. Minsk, Vysheishaya shkola Publ., 1993. 463 p. (In Russian).
14. Domasev M. V., Gnatyuk S. P. *Cvet, upravleniye svetom, svetovye raschety i izmereniya*. [Color, color management, color calculations and measurements]. St. Petersburg, Piter Publ., 2009. 224 p. (In Russian).
15. Dulesov A. S., Kabaeva E. V. Logarithmic information measure of technical object state. *Sovremennyye problemy nauki i obrazovaniya* [Modern Problems of Science and Education], 2013, no. 1. Available at: www.science-education.ru/107-8210 (accessed 13.09.2020) (In Russian).

Информация об авторах

Новосельская Ольга Александровна – кандидат технических наук, доцент кафедры информатики и веб-дизайна. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: nochka@tut.by

Савчук Надежда Александровна – магистр технических наук, ассистент кафедры информатики и веб-дизайна. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: nadezhda.savchuk@gmail.com.

Щербакова Алина Николаевна – магистр технических наук, ассистент кафедры информатики и веб-дизайна. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: 1717alina1717@gmail.com

Романенко Дмитрий Михайлович – кандидат технических наук, доцент, заведующий кафедрой информатики и веб-дизайна. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: rdm@belstu.by

Information about the authors

Novoselskaya Olga Aleksandrovna – PhD (Engineering), Assistant Professor, the Department of Informatics and Web Design. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: nochka@tut.by

Savchuk Nadezhda Aleksandrovna – Master of Engineering, Assistant Lecturer, the Department of Informatics and Web Design. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: nadezhda.savchuk@gmail.com.

Shcherbakova Alina Nikolaevna – Master of Engineering, Assistant Lecturer, the Department of Informatics and Web Design. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: 1717alina1717@gmail.com

Romanenko Dmitry Mikhailovich – PhD (Engineering), Associate Professor, Head of the Department of Informatics and Web Design. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: rdm@belstu.by

Поступила после доработки 23.02.2022

СОДЕРЖАНИЕ

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ	5
МАТЕМАТИКА	5
Можей Н. П. Совершенные алгебры голономии тривиальных связностей на однородных пространствах неразрешимых групп ЛИ	5
Сиротко С. И., Пашук А. В. К условиям регулярности в задачах математического программирования	10
Thiha Bo. The visualize Formulation of divisibility	15
МЕХАНИКА	19
Грода Я. Г., Грода Н. Г., Бильданов Э. Э. Аналитические приближения для оценки свободной энергии решеточного флюида на двухуровневой непрямоугольной решетке	19
Гаранин В. Н., Юницкий А. Э., Аргюшевский С. В., Овсянко В. А., Пронкевич С. А. Разработка компьютерной модели разрушения неоднородного материала.....	28
ФИЗИКА	38
Крук Н. Н., Кленицкий Д. В., Гладков Л. Л., Маес В. Влияние асимметрии макроцикла на молекулярную структуру NH-таутомеров производных свободного основания коррола.....	38
Прудников Н. А., Крук Н. Н. Моделирование кольцевых токов в макрогетероциклических молекулах с использованием эквивалентной электрической схемы	44
ИНФОРМАТИКА И ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ	50
МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ И УПРАВЛЕНИЕ В ТЕХНИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ	50
Оробей И. О., Сарока В. В., Гринюк Д. А., Олиферович Н. М., Анкуда М. А. Анализатор концентрации NH ₃ и CO	50
Овсянников А. В., Барашко О. Г. Гистограммный фильтр на основе нечеткой принадлежности данных интервалу группирования	58
АЛГОРИТМИЗАЦИЯ И ПРОГРАММИРОВАНИЕ	64
Новосельская О. А., Савчук Н. А., Щербакова А. Н., Романенко Д. М. Алгоритмы и программное средство для генерации защитных изображений печатных документов	64

CONTENTS

PHYSICAL AND MATHEMATICAL SCIENCES.....	5
MATHEMATICS.....	5
Mozhey N. P. Perfect holonomy algebras of trivial connections on homogeneous spaces of unsolvable LIE groups	5
Sirotko S. I., Pashuk A. V. On constraint qualifications in mathematical programming	10
Thiha Bo. The visualize formulation of divisibility.....	15
MECHANICS	19
Groda Ya. G., Groda N. G., Bildanau E. E. Analytical approximations for estimating the free energy of a lattice fluid on a two-level non-rectangular lattice	19
Garanin V. N., Unitsky A. E., Artyushevsky S. V., Ovsyanko V. A., Pronkevich S. A. Development of a computer model of destruction heterogeneous material	28
PHYSICS.....	38
Kruk M. M., Klenitsky D. V., Gladkov L. L., Maes W. Macrocycle asymmetry influence of the molecular structure of NH-tautomers of the free base corrole derivatives	38
Prudnikau M. A., Kruk M. M. Modelling of ring currents in macroheterocyclic molecules using equivalent electrical circuit.....	44
COMPUTER SCIENCE AND ENGINEERING SCIENCES	50
MODELLING OF PROCESSES AND MANAGEMENT IN TECHNICAL SYSTEMS	50
Orobei I. O., Saroka V. V., Hryniuk D. A., Oliferovich N. M., Ankuda M. A. Analyzer of NH ₃ and CO concentration.....	50
Ausiannikov A. V., Barashko O. G. Histogram filter based on fuzzy data accessibility to group interval	58
ALGORITHMIC AND PROGRAMMING	64
Novoselskaya O. A., Savchuk N. A., Shcherbakova A. N., Romanenko D. M. Algorithms and software for generating protective images for printed documents.....	64

Редактор *Р. М. Рябая*
Компьютерная верстка *А. Н. Петрова, В. А. Маркушевская*
Корректор *Р. М. Рябая*

Подписано в печать 15.02.2022. Формат 60×84¹/₈.
Бумага офсетная. Гарнитура Таймс. Печать ризографическая.
Усл. печ. л. 9,7. Уч.-изд. л. 9,4.
Тираж 100 экз. Заказ .

Издатель и полиграфическое исполнение:
УО «Белорусский государственный технологический университет».
Свидетельство о государственной регистрации издателя,
изготовителя, распространителя печатных изданий
№ 1/227 от 20.03.2014.
Ул. Свердлова, 13а, 220006, г. Минск.