

ISSN 2520-6141



# ТРУДЫ БГТУ

Научный журнал



Серия 3

**ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ  
НАУКИ И ИНФОРМАТИКА**

**№ 1 (278) 2024 год**

**Рубрики номера:**

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ

Математика

Механика

Физика

ИНФОРМАТИКА И ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ

Моделирование процессов

и управление в технических системах

Алгоритмизация и программирование



**БГТУ**

Минск 2024

Учреждение образования  
«Белорусский государственный  
технологический университет»

# ТРУДЫ БГТУ

**Научный журнал**

*Издается с июля 1993 года*

**Серия 3**

**ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ  
И ИНФОРМАТИКА**

**№ 1 (278) 2024 год**

*Выходит два раза в год*

Минск 2024

Educational institution  
“Belarusian State Technological University”

# PROCEEDINGS OF BSTU

**Scientific Journal**

*Published monthly since July 1993*

**Issue 3**

**PHYSICS AND MATHEMATICS.  
INFORMATICS**

**No. 1 (278) 2024**

*Published biannually*

Minsk 2024

*Учредитель* – учреждение образования «Белорусский государственный технологический университет»

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

**Редакционная коллегия журнала:**

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;  
Водопьянов 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;  
Харша Ратнавира, доктор наук, профессор, Королевство Норвегия;  
Кох Барбара, доктор наук, профессор, Федеративная Республика Германия;  
Щекин А. К., член-корреспондент РАН, доктор физико-математических наук, профессор, Российская Федерация;  
Маес Воутер, доктор химических наук, профессор, Королевство Бельгия;  
Бир Петр, доктор технических наук, профессор, Республика Польша;  
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;  
Жантасов К. Т., доктор технических наук, профессор, Республика Казахстан;  
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;  
Соловьева И. Ф., кандидат физико-математических наук, доцент (ответственный секретарь), Республика Беларусь;  
Крук Н. Н. доктор физико-математических наук, профессор, Республика Беларусь;  
Асмыкович И. К., кандидат физико-математических наук, доцент, Республика Беларусь;  
Карпович Д. С., кандидат технических наук, доцент, Республика Беларусь;  
Романенко Д. М., кандидат технических наук, доцент, Республика Беларусь;  
Калинин А. И., доктор физико-математических наук, профессор, Республика Беларусь;  
Леваков А. А., доктор физико-математических наук, профессор, Республика Беларусь;  
Листопад Н. И., доктор технических наук, профессор, Республика Беларусь.  
Мазаник С. А., доктор физико-математических наук, профессор, Республика Беларусь;  
Минченко Л. И., доктор физико-математических наук, профессор, Республика Беларусь;  
Прихожий А. А., доктор технических наук, профессор, Республика Беларусь;  
Сайко А. П., доктор физико-математических наук, Республика Беларусь;  
Фурс А. Н. доктор физико-математических наук, профессор, Республика Беларусь;  
Щекин А. К., член-корреспондент РАН, доктор физико-математических наук, профессор, Российская Федерация;  
Бартошевич Збигнев, доктор habilitированный, Республика Польша;  
Маес Воутер, доктор химических наук, профессор, Королевство Бельгия;  
Прессельт Мартин, доктор habilitированный, Федеративная Республика Германия.

*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»*

**Publisher** – educational institution “Belarusian State Technological University”

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

**Editorial (Journal):**

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;  
Barčík Štefan, DSc, Professor, Slovak Republic;  
Harsha Ratnaweera, DSc, Professor, Kingdom of Norway;  
Koch Barbara, DSc, Professor, Federal Republic of Germany;  
Shchekin A. K., Corresponding Member of the Russian Academy of Sciences, DSc (Physics and Mathematics), Professor, Russian Federation;  
Maes Wouter, DSc (Chemistry), Professor, Kingdom of Belgium;  
Beer Piotr, DSc (Engineering), Professor, Republic of Poland;  
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;  
Zhantasov K. T., DSc (Engineering), Professor, Republic of Kazakhstan;  
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 (editor-in-chief of the series), Republic of Belarus;  
Urbanovich P. P., DSc (Engineering), Professor (deputy editor-in-chief of the series), Republic of Belarus;  
Solov’yeva I. F., PhD (Physics and Mathematics), Associate Professor (executive editor), Republic of Belarus.  
Kruk N. N., DSc (Physics and Mathematics), Professor, Republic of Belarus;  
Asmykovich I. K., PhD (Physics and Mathematics), Associate Professor, Republic of Belarus;  
Karpovich D. S., PhD (Engineering), Associate Professor, Republic of Belarus;  
Romanenko D. M., PhD (Engineering), Associate Professor, Republic of Belarus;  
Kalinin A. I., DSc (Physics and Mathematics), Professor, Republic of Belarus;  
Levakov A. A., DSc (Physics and Mathematics), Professor, Republic of Belarus;  
Listopad N. I., DSc (Engineering), Professor, Republic of Belarus.  
Mazanik S. A., DSc (Physics and Mathematics), Professor, Republic of Belarus;  
Minchenko L. I., DSc (Physics and Mathematics), Professor, Republic of Belarus;  
Prihozhiiy A. A., DSc (Engineering), Professor, Republic of Belarus;  
Saiko A. P., DSc (Physics and Mathematics), Republic of Belarus;  
Furs A. N., DSc (Physics and Mathematics), Professor, Republic of Belarus;  
Shchekin A. K., Corresponding Member of the Russian Academy of Sciences, DSc (Physics and Mathematics), Professor, Russian Federation;  
Bartosiewicz Zbigniew, doctor habilitated, Republic of Poland;  
Maes Wouter, DSc (Chemistry), Professor, Kingdom of Belgium;  
Presselt Martin, doctor habilitated, Federal Republic of Germany.

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

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

editor-in-chief of the series (+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

### **НЕРЕДУКТИВНЫЕ ОДНОРОДНЫЕ ПРОСТРАНСТВА НЕРАЗРЕШИМЫХ ГРУПП ЛИ, НЕ ДОПУСКАЮЩИЕ ЭКВИАФФИННЫХ СВЯЗНОСТЕЙ**

Целью данной работы является описание трехмерных нередуктивных однородных пространств, не допускающих эквиаффинных связностей, рассмотрение случая неразрешимой группы Ли преобразований. Определены основные понятия: изотропно-точная пара, редуктивное пространство, аффинная связность, тензор кручения, тензор кривизны, тензор Риччи, эквиаффинная (локально эквиаффинная) связность. Исследования основаны на применении свойств алгебр Ли, групп Ли и однородных пространств и носят преимущественно локальный характер. Особенностью методов, представленных в работе, является использование чисто алгебраического подхода к описанию многообразий и связностей на них, а также сочетание различных методов дифференциальной геометрии, теории групп и алгебр Ли и теории однородных пространств. Полученные результаты могут быть использованы при исследовании многообразий, а также иметь приложения в различных областях математики и физики, поскольку многие фундаментальные задачи в этих областях связаны с изучением инвариантных объектов на однородных пространствах.

**Ключевые слова:** эквиаффинная связность, однородное пространство, тензор Риччи, редуктивное пространство, тензор кручения.

**Для цитирования:** Можей Н. П. Нередуктивные однородные пространства неразрешимых групп Ли, не допускающие эквиаффинных связностей // Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика. 2024. № 1 (278). С. 5–10.

DOI: 10.52065/2520-6141-2024-278-1.

**N. P. Mozhey**

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics

### **NON-REDUCTIVE HOMOGENEOUS SPACES OF UNSOLVABLE LIE GROUPS THAT DO NOT ADMIT EQUIAFFINE CONNECTIONS**

The purpose of this paper is to describe three-dimensional non-reductive homogeneous spaces that do not admit equiaffine connections, the case of an unsolvable Lie group of transformations is considered. The basic notions, such as an isotropically-faithful pair, a reductive space, an affine connection, a torsion tensor, a curvature tensor, Ricci tensor, an equiaffine (locally equiaffine) connection, are defined. Studies are based on the application of properties of the Lie algebras, Lie groups and homogeneous spaces and they mainly have local character. The peculiarity of techniques presented in the work is the use of purely algebraic approach to the description of manifolds and connections on them, as well as compound of methods of differential geometry, the theory of Lie groups and algebras and the theory of homogeneous spaces. The results obtained can be used in the study of manifolds, as well as have applications in various

fields of mathematics and physics, since many fundamental problems in these fields are connected with the study of invariant objects on homogeneous spaces.

**Keywords:** equiaffine connection, homogeneous space, Ricci tensor, reductive space, torsion tensor.

**For citation:** Mozhey N. P. Non-reductive homogeneous spaces of unsolvable Lie groups that do not admit equiaffine connections. *Proceedings of BSTU, issue 3, Physics and Mathematics. Informatics*, 2024, no. 1 (278), pp. 5–10 (In Russian).

DOI: 10.52065/2520-6141-2024-278-1.

**Введение.** В каком случае однородное пространство допускает инвариантную связность? Если существует хотя бы одна инвариантная аффинная связность, то пространство является изотропно-точным, но обратное неверно. Если однородное пространство является редутивным, то оно всегда допускает инвариантную связность (см., например, [1]). Большой вклад в развитие теории связностей внесли работы Э. Картана, А. П. Нордена, П. К. Рашевского, М. Куриты, А. П. Широкова, Э. Б. Винберга, Ш. Кобаяси, К. Номидзу и др. Аффинная связность является эквиаффинной, если допускает параллельную форму объема (см. [2]). Все трехмерные нередутивные пространства с неразрешимой группой преобразований и неразрешимым стабилизатором, допускающие инвариантные связности, изучались в работе [3], а с разрешимым стабилизатором – в работе [4], изотропно-точные нередутивные однородные пространства, не допускающие никаких инвариантных связностей, приведены в [5].

Целью данной работы является описание трехмерных нередутивных однородных пространств, которые допускают инвариантные связности, но эти связности не являются эквиаффинными.

**Основная часть.** Пусть  $M$  – дифференцируемое многообразие, на котором транзитивно действует группа  $\bar{G}$ ,  $G = \bar{G}_x$  – стабилизатор произвольной точки  $x \in M$ . Проблема классификации однородных пространств  $(M, \bar{G})$  равносильна классификации (с точностью до эквивалентности) пар групп Ли  $(\bar{G}, G)$ , так как многообразие может быть отождествлено с многообразием левых смежных классов (см., например, [6]). Необходимое условие существования аффинной связности состоит в том, что представление изотропии для  $G$  должно быть точным, если  $G$  эффективна на  $\bar{G}/G$  [1]. Пусть  $\bar{\mathfrak{g}}$  – алгебра Ли группы Ли  $\bar{G}$ , а  $\mathfrak{g}$  – подалгебра, соответствующая подгруппе  $G$ . Пара  $(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g})$  называется *изотропно-точной*, если точно изотропное представление  $\mathfrak{g}$ . Однородное пространство  $\bar{G}/G$  *редуктивно*, если алгебра Ли  $\bar{\mathfrak{g}}$  может быть разложена в прямую сумму векторных пространств – алгебры Ли  $\mathfrak{g}$  и  $\text{ad}(G)$ -инвариантного подпространства  $\mathfrak{m}$ , т. е. если  $\bar{\mathfrak{g}} = \mathfrak{g} + \mathfrak{m}$ ,  $\mathfrak{g} \cap \mathfrak{m} = 0$ ;  $\text{ad}(G)\mathfrak{m} \subset \mathfrak{m}$  (второе условие влечет

$[\mathfrak{g}, \mathfrak{m}] \subset \mathfrak{m}$ , и наоборот, если  $G$  связна), в противном случае пространство не является редутивным. 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  $\mathfrak{g}$ , а все отображение является  $\mathfrak{g}$ -инвариантным. Инвариантные аффинные связности на  $(M, \bar{G})$  находятся во взаимно однозначном соответствии (см., например, [7]) со связностями на паре  $(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g})$ . Если  $\bar{G}/G$  редутивно, то оно всегда допускает инвариантную связность, а линейное представление изотропии всегда точное. Тензоры кривизны и кручения однозначно определяются тензорами на касательном пространстве к многообразию, причем они инвариантны относительно изотропного действия. *Тензор кручения*  $T \in \text{Inv}T_2^1(\mathfrak{m})$  и *тензор кривизны*  $R \in \text{Inv}T_3^1(\mathfrak{m})$  имеют вид

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

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

для всех  $x, y \in \bar{\mathfrak{g}}$ . Будем говорить, что  $\Lambda$  имеет *нулевое кручение* или является *связностью без кручения*, если  $T = 0$ . Определим тензор Риччи  $\text{Ric} \in \text{Inv}T_2(\mathfrak{m})$ :  $\text{Ric}(y, z) = \text{tr}\{x \mapsto R(x, y)z\}$ . Будем говорить, что аффинная связность  $\Lambda$  является *локально эквиаффинной*, если  $\text{tr}\Lambda([x, y]) = 0$  для всех  $x, y \in \bar{\mathfrak{g}}$ , т. е.  $\Lambda([\bar{\mathfrak{g}}, \bar{\mathfrak{g}}]) \subset \mathfrak{sl}(\mathfrak{m})$ . Аффинная связность  $\Lambda$  с нулевым кручением имеет симметрический тензор Риччи тогда и только тогда, когда она локально эквиаффинна.

Под *эквиаффинной* связностью будем понимать аффинную связность  $\Lambda$  (без кручения), для которой  $\text{tr}\Lambda(x) = 0$  для всех  $x \in \bar{\mathfrak{g}}$ . В этом случае очевидно, что  $\Lambda(\bar{\mathfrak{g}}) \in \mathfrak{sl}(\mathfrak{m})$ .

Будем описывать пару  $(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g})$  при помощи таблицы умножения алгебры  $\bar{\mathfrak{g}}$ . Обозначим базис  $\bar{\mathfrak{g}}$  через  $\{e_1, \dots, e_n, u_1, u_2, u_3\}$  ( $n = \dim \mathfrak{g}$ ), причем алгебра Ли  $\mathfrak{g}$  порождается  $e_1, \dots, e_n$ , а  $\{u_1, u_2, u_3\}$  – базис  $\mathfrak{m}$ . Для нумерации подалгебр используем запись  $d.n$ , а для нумерации пар – запись  $d.n.m$ , соответствующие приведенным в источниках [3, 4], здесь  $d$  – размерность подалгебры,  $n$  – номер подалгебры

в  $\mathfrak{gl}(3, \mathbb{R})$ , а  $t$  – номер пары  $(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g})$ . В дальнейшем, если на параметры, появляющиеся в процессе классификации, накладываются дополнительные условия, то они записываются около таблицы умножения. В противном случае предполагается, что параметры пробегают все  $\mathbb{R}$ .

**Теорема.** *Трехмерные нередуктивные однородные пространства, допускающие инвариантную аффинную связность, но не допускающие эквивалентных связностей, такие, что  $\bar{\mathfrak{g}}$  неразрешима, локально имеют следующий вид:*

–  $\bar{\mathfrak{g}}$  неразрешима:

6.3.2

	$e_1$	$e_2$	$e_3$	$e_4$	$e_5$	$e_6$	$u_1$	$u_2$	$u_3$
$e_1$	0	$2e_2 - 2e_3$	0	$-e_5$	$e_6$	0	0	$u_2$	$-u_3$
$e_2$	$-2e_2$	0	$e_1$	0	$-e_6$	0	0	0	$u_2$
$e_3$	$2e_3$	$-e_1$	0	0	0	$-e_5$	0	$u_3$	0
$e_4$	0	0	0	0	$-e_5$	$-e_6$	0	$u_2$	$u_3$
$e_5$	$e_5$	$e_6$	0	$e_5$	0	0	0	$u_1 + 3e_4 + e_1$	$2e_3$
$e_6$	$-e_6$	0	$e_5$	$e_6$	0	0	0	$2e_2$	$u_1 + 3e_4 - e_1$
$u_1$	0	0	0	0	0	0	0	0	0
$u_2$	$-u_2$	0	$-u_3$	$-u_2 - u_1 - 3e_4 - e_1$	$-2e_2$	0	0	0	0
$u_3$	$u_3$	$-u_2$	0	$-u_3$	$-2e_3$	$-u_1 - 3e_4 + e_1$	0	0	0

–  $\bar{\mathfrak{g}}$  разрешима:

2.7.2

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

2.8.7,  $\lambda \neq -1$

	$e_1$	$e_2$	$u_1$	$u_2$	$u_3$
$e_1$	0	$\lambda e_1$	$e_1$	0	$u_1$
$e_2$	$-\lambda e_1$	0	0	$u_2$	$\lambda u_3$
$u_1$	$-e_1$	0	0	0	$u_3$
$u_2$	0	$-u_2$	0	0	0
$u_3$	$-u_1$	$-\lambda u_3$	$-u_3$	0	0

3.12.2

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

3.13.6,  
 $\mu \neq -1$

	$e_1$	$e_2$	$e_3$	$u_1$	$u_2$	$u_3$
$e_1$	0	$-\mu e_2$	$(1-\mu)e_3$	$u_1$	0	$\mu u_3$
$e_2$	$\mu e_2$	0	0	$e_3$	$2e_2$	$u_2$
$e_3$	$(\mu-1)e_3$	0	0	0	$e_3$	$u_1$
$u_1$	$-u_1$	$-e_3$	0	0	$-u_1$	0
$u_2$	0	$-2e_2$	$-e_3$	$u_1$	0	$2u_3$
$u_3$	$-\mu u_3$	$-u_2$	$-u_1$	0	$-2u_3$	0

3.28.2

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

4.19.2

	$e_1$	$e_2$	$e_3$	$e_4$	$u_1$	$u_2$	$u_3$
$e_1$	0	0	$-e_3$	$-e_4$	0	0	$u_3$
$e_2$	0	0	$e_4$	0	0	$u_1$	0
$e_3$	$e_3$	$-e_4$	0	0	$-e_4$	$-2e_3$	$u_2$
$e_4$	$e_4$	0	0	0	0	$-e_4$	$u_1$
$u_1$	0	0	$e_4$	0	0	$u_1$	0
$u_2$	0	$-u_1$	$2e_3$	$e_4$	$-u_1$	0	$-2u_3$
$u_3$	$-u_3$	0	$-u_2$	$-u_1$	0	$2u_3$	0

3.6.2

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

4.21.11,  $\mu \neq -1$

	$e_1$	$e_2$	$e_3$	$e_4$	$u_1$	$u_2$	$u_3$
$e_1$	0	$e_2$	$-\mu e_3$	$(1-\mu)e_4$	$u_1$	0	$\mu u_3$
$e_2$	$-e_2$	0	$e_4$	0	0	$e_2 + u_1$	0
$e_3$	$\mu e_3$	$-e_4$	0	0	0	$-2e_3$	$u_2$
$e_4$	$(\mu-1)e_4$	0	0	0	0	$-e_4$	$e_2 + u_1$
$u_1$	$-u_1$	0	0	0	0	0	0
$u_2$	0	$-e_2 - u_1$	$2e_3$	$e_4$	0	0	$-2u_3$
$u_3$	$-\mu u_3$	0	$-u_2$	$-e_2 - u_1$	0	$2u_3$	0

5.9.2

	$e_1$	$e_2$	$e_3$	$e_4$	$e_5$	$u_1$	$u_2$	$u_3$
$e_1$	0	0	$e_3$	0	$e_5$	$u_1$	0	0
$e_2$	0	0	0	$-e_4$	$-e_5$	0	0	$u_3$
$e_3$	$-e_3$	0	0	$e_5$	0	0	$u_1$	0
$e_4$	0	$e_4$	$-e_5$	0	0	$e_5$	$2e_4$	$u_2$
$e_5$	$-e_5$	$e_5$	0	0	0	0	$e_5$	$u_1$
$u_1$	$-u_1$	0	0	$-e_5$	0	0	$-u_1$	0
$u_2$	0	0	$-u_1$	$-2e_4$	$-e_5$	$u_1$	0	$2u_3$
$u_3$	0	$-u_3$	0	$-u_2$	$-u_1$	0	$-2u_3$	0

Для доказательства этой теоремы из трехмерных нередуктивных однородных пространств, приведенных в работах [3, 4], выберем те, которые не допускают эквивалентных связностей.

Далее будем описывать аффинную связность через образы базисных векторов  $\Lambda(u_1)$ ,  $\Lambda(u_2)$ ,  $\Lambda(u_3)$ . Прямыми вычислениями получаем, что в случае 6.3.2 локально эквивалентная связность (без кручения) имеет вид



$$\Lambda(u_1) = \begin{pmatrix} -2 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}, \Lambda(u_2) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\Lambda(u_3) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Поскольку  $\text{tr } \Lambda(u_1) \neq 0$ , пара не допускает эквивариантной связности.

Аналогично получаем, что для случая, когда  $\mathfrak{g}$  разрешима, локально эквивариантные связности имеют вид, указанный в табл. 1.

Таблица 1  
Локально эквивариантная связность (без кручения)

Пара $(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g})$	Локально эквивариантная связность (без кручения)
5.9.2, 3.12.2, 3.13.6, $\mu \neq 0, 1/2, -1$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$
4.19.2	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$
4.21.11, $\mu \neq 1/2, -1$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$
4.21.11, $\mu = 1/2$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & r_{1,3} \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$
3.6.2, 2.8.7, $\lambda \neq 0, -1, 1/2$	$\begin{pmatrix} -1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$ $\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1/2 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
3.13.6, $\mu = 0$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & r_{2,3} \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$
3.13.6, $\mu = 1/2$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & r_{1,3} \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$
3.28.2	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -2 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$

Окончание табл. 1

Пара $(\bar{\mathfrak{g}}, \mathfrak{g})$	Локально эквивариантная связность (без кручения)
2.7.2	$\begin{pmatrix} -1/2 & p_{1,2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1/2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} p_{1,2} & q_{1,2} & 0 \\ 0 & q_{2,2} & 0 \\ 0 & 0 & p_{1,2} \end{pmatrix},$ $\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1/2 & p_{1,2} & 0 \end{pmatrix}$
2.8.7, $\lambda = 0$	$\begin{pmatrix} -1/2 & 0 & p_{1,3} \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -3p_{1,3} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$ $\begin{pmatrix} p_{1,3} & 0 & r_{1,3} \\ 0 & -3p_{1,3} & 0 \\ -1/2 & 0 & 2p_{1,3} \end{pmatrix}$
2.8.7, $\lambda = 1/2$	$\begin{pmatrix} -1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$ $\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & r_{2,3} \\ -1/2 & 0 & 0 \end{pmatrix}$

Здесь  $p_{i,j}, q_{i,j}, r_{i,j} \in \mathbb{R}$  (при  $i, j = \overline{1,3}$ ). Для получения этого результата достаточно обратить внимание, что аффинные связности имеют вид, указанный в табл. 2.

Таблица 2

**Аффинная связность**

Пара	Аффинная связность
5.9.2, 3.12.2, 3.13.6, $\mu \neq 0, 1, -1, 1/2$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$
4.19.2	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$
4.21.11, $\mu \neq 0, 1, 1/2, -1$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$
4.21.11, $\mu = 1$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & q_{1,3} \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -q_{1,3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$
4.21.11, $\mu = 0$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & p_{1,3} \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & p_{1,3} \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} r_{1,1} & 0 & 0 \\ 0 & r_{1,1} & 0 \\ 0 & 1 & r_{1,1} + p_{1,3} \end{pmatrix}$

Окончание табл. 2

Пара	Аффинная связность		
4.21.11, $\mu = 1/2$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & r_{1,3} \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$
3.6.2, 2.8.7, $\lambda \neq 0, 1, -1, 1/2$	$\begin{pmatrix} -1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1/2 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
3.13.6, $\mu = 1$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & q_{1,3} \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -q_{1,3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$
3.13.6, $\mu = 0$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & p_{1,3} \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & q_{2,3} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} r_{1,1} & 0 & 0 \\ 0 & r_{1,1} + p_{1,3} - q_{2,3} & r_{2,3} \\ 0 & -1 & r_{1,1} + p_{1,3} \end{pmatrix}$
3.13.6, $\mu = -1$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & p_{2,3} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -p_{2,3} & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$
3.13.6, $\mu = 1/2$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & r_{1,3} \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$
3.28.2	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -2 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$
2.7.2	$\begin{pmatrix} -1/2 & p_{1,2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1/2 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} q_{1,1} & q_{1,2} & 0 \\ 0 & q_{2,2} & 0 \\ 0 & 0 & q_{1,1} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1/2 & p_{1,2} & 0 \end{pmatrix}$
2.8.7, $\lambda = 1$	$\begin{pmatrix} -1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & p_{2,3} \\ 0 & 0 & 1/2 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -p_{2,3} & 0 & 0 \\ -1/2 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
2.8.7, $\lambda = 0$	$\begin{pmatrix} -1/2 & 0 & p_{1,3} \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & q_{2,3} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} r_{1,1} & 0 & r_{1,3} \\ 0 & r_{2,2} & 0 \\ -1/2 & 0 & r_{1,1} + p_{1,3} \end{pmatrix}$
2.8.7, $\lambda = 1/2$	$\begin{pmatrix} -1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & r_{2,3} \\ -1/2 & 0 & 0 \end{pmatrix}$

Тензоры Риччи имеют вид (в остальных случаях тензор Риччи нулевой), указанный в табл. 3.

Таблица 3

**Тензор Риччи**

Пара	Тензор Риччи
4.21.11, $\mu = 0$	$Ric = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2p_{1,3} - 2r_{1,1} \\ 0 & 2p_{1,3} + 2r_{1,1} & 2p_{1,3}^2 \end{pmatrix}$
3.13.6, $\mu = 0$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2q_{2,3} + 4p_{1,3} + 2r_{1,1} \\ 0 & -4p_{1,3} + 2q_{2,3} - 2r_{1,1} & -5r_{2,3} + p_{1,3}^2 + q_{2,3}^2 \end{pmatrix}$
2.7.2	$Ric = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & -q_{1,2} + 2p_{1,2}q_{2,2} - 2q_{1,1}p_{1,2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
2.8.7, $\lambda = 0$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & B \\ 0 & 0 & 0 \\ -p_{1,3}/2 - r_{1,1} - q_{2,3}/2 & 0 & A \end{pmatrix}$ $A = -2r_{1,3} + p_{1,3}^2 + q_{2,3}r_{1,1} + q_{2,3}p_{1,3} - r_{2,2}q_{2,3}$ , $B = q_{2,3}/2 + p_{1,3}/2 + r_{1,1}$

При этом тензор кручения  $T$  (описываем через  $T(u_1, u_2)$ ,  $T(u_1, u_3)$ ,  $T(u_2, u_3)$ , в остальных случаях нулевой) имеет вид, указанный в табл. 4.

Таблица 4

**Тензор кручения**

Пара	Тензор кручения
4.21.11, $\mu = 1$ , 3.13.6, $\mu = 1$	$(0, 0, 0), (0, 0, 0), (2q_{1,3}, 0, 0)$
4.21.11, $\mu = 0$	$(0, 0, 0), (p_{1,3} - r_{1,1}, 0, 0), (0, p_{1,3} - r_{1,1}, 0)$
2.8.7, $\lambda = 1$	$(0, 0, 0), (0, 2p_{2,3}, 0), (0, 0, 0)$
3.13.6, $\mu = 0$	$(0, 0, 0), (p_{1,3} - r_{1,1}, 0, 0), (0, 2q_{2,3} - r_{1,1} - p_{1,3}, 0)$
2.7.2	$(p_{1,2} - q_{1,1}, 0, 0), (0, 0, 0), (0, 0, q_{1,1} - p_{1,2})$
2.8.7, $\lambda = 0$	$(0, 0, 0), (p_{1,3} - r_{1,1}, 0, 0), (0, q_{2,3} - r_{2,2}, 0)$

Прямыми вычислениями получаем, что нет таких параметров, при которых  $\text{tr}\Lambda(x) = 0$  для всех  $x \in \bar{g}$  ( $T = 0$ ), и, соответственно, пары не допускают эквивалентных связностей.

**Заключение.** Приведено в явном виде описание всех трехмерных нередуکتивных однородных пространств с неразрешимой группой преобразований, которые допускают инвариантные связности, но эти связности не являются эквивариантными. Особенность методов, представленных в работе, заключается в применении чисто алгебраического подхода к опи-

санию многообразий и связностей на них. Полученные результаты могут быть использованы при исследовании многообразий, а также иметь приложение в различных областях математики и физики, поскольку многие фундаментальные задачи в этих областях связаны с изучением инвариантных объектов на однородных пространствах.

### Список литературы

1. Кобаяси Ш., Номидзу К. Основы дифференциальной геометрии: в 2 т. М.: Наука, 1981. 2 т.
2. Nomizu K., Sasaki T. Affine differential geometry. Cambridge Univ. Press, 1994. 263 p.
3. Можей Н. П. Трехмерные нередуکتивные однородные пространства неразрешимых групп Ли // Доклады Национальной академии наук Беларуси. 2017. № 4 (61). С. 20–26.
4. Можей Н. П. Связности на нередуکتивных однородных пространствах с неразрешимой группой преобразований // Доклады Национальной академии наук Беларуси. 2017. № 5 (61). С. 7–16.
5. Можей Н. П. Трехмерные однородные пространства, не допускающие инвариантных связностей // Изв. Саратов. ун-та. Нов. сер. Сер.: Математика. Механика. Информатика. 2016. № 4 (16). С. 413–421.
6. Онищук А. Л. Топология транзитивных групп Ли преобразований. М.: Физ.-мат. лит., 1995. 384 с.
7. Nomizu K. Invariant affine connections on homogeneous spaces // Amer. Journ. Math. 1954. № 1 (76). С. 33–65.

### References

1. Kobayasi Sh., Nomidzu K. *Osnovy differentsial'noy geometrii: v 2 t.* [Foundations of differential geometry: in 2 vol.]. Moscow, Nauka Publ., 1981. 2 vol. (In Russian).
2. Nomizu K., Sasaki T. Affine differential geometry. Cambridge Univ. Press Publ., 1994. 263 p.
3. Mozhey N. P. Three-dimensional non-reductive homogeneous spaces of unsolvable Lie groups. *Doklady Natsional'noy akademii nauk Belarusi* [Doklady of the National Academy of Sciences of Belarus], 2017, no. 4 (61), pp. 20–26 (In Russian).
4. Mozhey N. P. Connections in non-reductive homogeneous spaces with an unsolvable group of transformation. *Doklady Natsional'noy akademii nauk Belarusi* [Doklady of the National Academy of Sciences of Belarus], 2017, no. 5 (61), pp. 7–16 (In Russian).
5. Mozhey N. P. Three-dimensional Homogeneous Spaces, Not Admitting Invariant Connections. *Izv. Saratov univ. (N. S.). Ser.: Matematika. Mekhanika. Informatika* [News of Saratov University. New ser. Ser.: Mathematics. Mechanics. Computer science], 2016, no. 4 (16), pp. 413–421 (In Russian).
6. Onishchik A. L. *Topologiya tranzitivnykh grupp Li preobrazovaniy* [Topology of transitive transformation groups]. Moscow, Fiz.-mat. lit. Publ., 1995. 384 p. (In Russian).
7. Nomizu K. Invariant affine connections on homogeneous spaces. *Amer. Journ. Math.*, 1954, no. 1 (76), pp. 33–65.

### 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 15.11.2023

УДК 614.833.3,614.833.4,614.841.412,614.841.412,614.841.43

**Д. С. Котов<sup>1</sup>, Е. В. Новиков<sup>2</sup>, С. Г. Котов<sup>3</sup>**<sup>1</sup>НИРУП «Геоинформационные системы»<sup>2</sup>Институт современных технологий связи Белорусской государственной академии связи<sup>3</sup>ГУ «Белорусский институт системного анализа и информационного обеспечения научно-технической сферы»**ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПО ГАУССОВОЙ МОДЕЛИ ЗАРАЖЕНИЯ ПЕРВИЧНЫМ ОБЛАКОМ В ИЗМЕНЯЮЩИХСЯ МЕТЕОУСЛОВИЯХ**

Динамическое моделирование развития аварий исходит из двух вариантов хранения опасного вещества на опасном производственном объекте: в газообразном состоянии и в жидкой фазе. Для каждого из этих вариантов рассматриваются по два типа выброса – залповый и продолжительный. В работе исследуется первый сценарий – полное разрушение оборудования, содержащего газообразное опасное вещество, и образование первичного облака. Прогнозирование заражения для первых метеоусловий, характеризующихся конкретным классом стабильности атмосферы, скорости и направления ветра, ведется в системе координат, центр которых расположен на поверхности земли в месте разрушения оборудования: ось  $Ox$  направлена по ветру, ось  $Oy$  – перпендикулярна ветру, ось  $Oz$  – перпендикулярна плоскости земли и связана с топографической картой. Для вторых метеоусловий, отличающихся от первых хотя бы одним из показателей – классом стабильности атмосферы, скоростью и направлением ветра, также используется система координат, у которой ось  $Ox$  направлена по ветру, ось  $Oy$  – перпендикулярна ветру, ось  $Oz$  – перпендикулярна плоскости земли. Система координат для вторых метеоусловий связана с системой координат для первых условий через точку максимальной концентрации в конце первых и начале вторых метеоусловий. При этом для начала вторых метеоусловий уточняется размер первичного облака опасного вещества в гауссовой модели в начальный момент времени, что позволяет вести расчет для вторых метеоусловий, базирующийся на методике «Токси-2». Это дает возможность создать алгоритм динамического моделирования заражения по гауссовой модели первичным облаком для изменяющихся метеоусловий.

**Ключевые слова:** алгоритм, заражение, изменяющиеся метеоусловия, моделирование, первичное облако.

**Для цитирования:** Котов Д. С., Новиков Е. В., Котов С. Г. Динамическое моделирование по гауссовой модели заражения первичным облаком в изменяющихся метеоусловиях // Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика. 2024. № 1 (278). С. 11–17.

DOI: 10.52065/2520-6141-2024-278-2.

**D. S. Kotov<sup>1</sup>, E. V. Novikov<sup>2</sup>, S. G. Kotov<sup>3</sup>**<sup>1</sup>SIUE “Geoinformation systems”<sup>2</sup>Institute of Modern Communication Technologies of the Belarusian State Academy of Communications<sup>3</sup>State Institution “Belarusian Institute of System Analysis and Information Support for the Scientific and Technical Sphere”**DYNAMIC SIMULATION USING A GAUSSIAN INFECTION MODEL  
PRIMARY CLOUD IN CHANGING WEATHER CONDITIONS**

Dynamic modeling of accident development is based on two options for storing a hazardous substance at a hazardous production facility: in a gaseous state and in a liquid phase. For each of these options, two types of release are considered: salvo and long-lasting. The work considers the first scenario - the complete destruction of equipment containing a gaseous hazardous substance and the formation of a primary cloud. Forecasting of infection for first and weather conditions is carried out in a coordinate system, the center of which is located on the surface of the earth at the site of equipment destruction, the  $Ox$  axis is directed downwind, the  $Oy$  axis is perpendicular to the wind, the  $Oz$  axis is perpendicular to the plane of the earth, and which is associated with a topographic map. For the second weather conditions, a coordinate system is also used, in which the  $Ox$  axis is directed downwind, the  $Oy$  axis is perpendicular to the wind, and the  $Oz$  axis is perpendicular to the plane of the earth. The coordinate system for the second weather conditions is connected to the coordinate system for the first conditions through the point of maximum concentration at the end of the first and the beginning of the second weather conditions. At the same time, to begin the second weather conditions, the size of the primary cloud of a hazardous substance in the Gaussian model at the initial time is specified, which allows calculations for the second weather conditions to be based on the Toxi-2 method. This allows you to create an algorithm for dynamic modeling of infection using a Gaussian model by a primary cloud for changing weather conditions.

**Keywords:** algorithm, infection, changing weather conditions, modeling, primary cloud.

**For citation:** Kotov D. S., Novikov E. V., Kotov S. G. Dynamic simulation using a Gaussian infection model primary cloud in changing weather conditions. *Proceedings of BSTU, issue 3, Physics and Mathematics. Informatics*, 2024, no. 1 (278), pp. 11–17 (In Russian).

DOI: 10.52065/2520-6141-2024-278-2.

**Введение.** В настоящее время существует большой спектр методик, позволяющих моделировать последствия выброса опасных веществ: от простых полуэмпирических моделей до детальных расчетов по сложным газодинамическим моделям [1]. Это простые полуэмпирические модели [2–4], гауссовы модели рассеяния [5–11]; модели рассеяния, базирующиеся на интегральных законах сохранения [12–18], и модели, построенные на численном решении системы уравнений сохранения в их оригинальном виде [19–29].

Методики, построенные на численном решении системы уравнений, позволяют реализовать динамическое моделирование зон заражения. В то же время использование моделей последнего класса связано с существенными временными затратами по поиску и вводу исходных данных и имеет смысл только при оценке экологических рисков от промышленных источников загрязнения [3].

Методики, построенные на полуэмпирических моделях [2–4], гауссовых моделях рассеяния [5–11] и моделях рассеяния, базирующихся на интегральных законах сохранения [12–18], позволяют моделировать зоны заражения для разных метеорологических условий, но вопрос динамического моделирования зон заражения ранее решен только для методик, построенных на полуэмпирических моделях [30].

В настоящей статье впервые приводится алгоритмическое обеспечение динамического моделирования зон заражения для методики, построенной на гауссовых моделях.

**Основная часть.** Согласно современным воззрениям, модель развития аварии строится для двух вариантов хранения опасного вещества в оборудовании: в газообразном виде и в жидкой фазе (в т. ч. с наличием над поверхностью жидкости объема, заполненного газовой фазой) [31].

Для каждого варианта (газ или жидкость) рассматриваются по два типа выброса – залповый и продолжительный. Залповому выбросу на практике соответствует сильное разрушение оборудования, размер отверстия разгерметизации сопоставим с размером оборудования [20].

Таким образом, в системе координат «состояние вещества – характер разрушения» при двоякой градации по каждой из координат можно выделить четыре сценария: два для опасного вещества, находящегося в технологическом оборудовании в газообразном состоянии, и два для опасного вещества, находящегося в технологическом оборудовании в жидком состоянии [20]: полное разрушение оборудования, содержащего

опасное вещество, нарушение герметичности (частичное разрушение) оборудования, содержащего опасное вещество.

В настоящей работе рассматривается первый сценарий – полное разрушение оборудования, содержащего газообразное опасное вещество, и образование только первичного облака.

Пусть имеется электронная карта. Левый угол карты – это начало координат, точка  $O(0,0)$ . Пусть ось  $Ox$  направлена вдоль левой стороны карты с севера на юг, а ось  $Oy$  – вдоль верхней стороны карты с востока на запад. Любой пиксель (точку) на карте в данном случае можно охарактеризовать с помощью двух матриц

$$OX = \begin{pmatrix} x_{000}, & x_{001}, & x_{002}, \dots & x_{00i} \\ x_{010}, & x_{011}, & x_{012}, \dots & x_{01i} \\ x_{020}, & x_{021}, & x_{022}, \dots & x_{02i} \\ \dots, & \dots, & \dots, \dots & \dots \\ x_{0j0}, & x_{0j1}, & x_{0j2}, \dots & x_{0ji} \end{pmatrix};$$

$$OY = \begin{pmatrix} y_{000}, & y_{001}, & y_{002}, \dots & y_{00i} \\ y_{010}, & y_{011}, & y_{012}, \dots & y_{01i} \\ y_{020}, & y_{021}, & y_{022}, \dots & y_{02i} \\ \dots, & \dots, & \dots, \dots & \dots \\ y_{0j0}, & y_{0j1}, & y_{0j2}, \dots & y_{0ji} \end{pmatrix},$$

где  $x_{0ij}$  – число пикселей по горизонтали от левого края карты;  $y_{0ij}$  – число пикселей по вертикали от верхнего края карты.

Пусть масштаб карты  $M$ , м/пиксель. Тогда любой пиксель в системе координат  $Oxy$ , определяемый с помощью матриц  $OX$  и  $OY$ , характеризуется координатами

$$MOX = \begin{pmatrix} Mx_{000}, & Mx_{001}, & Mx_{002}, \dots & Mx_{00i} \\ Mx_{010}, & Mx_{011}, & Mx_{012}, \dots & Mx_{01i} \\ Mx_{020}, & Mx_{021}, & Mx_{022}, \dots & Mx_{02i} \\ \dots, & \dots, & \dots, \dots & \dots \\ Mx_{0j0}, & Mx_{0j1}, & Mx_{0j2}, \dots & Mx_{0ji} \end{pmatrix}; \quad (1)$$

$$MOY = \begin{pmatrix} My_{000}, & My_{001}, & My_{002}, \dots & My_{00i} \\ My_{010}, & My_{011}, & My_{012}, \dots & My_{01i} \\ My_{020}, & My_{021}, & My_{022}, \dots & My_{02i} \\ \dots, & \dots, & \dots, \dots & \dots \\ My_{0j0}, & My_{0j1}, & My_{0j2}, \dots & My_{0ji} \end{pmatrix}, \quad (2)$$

где  $Mx_{0ij}$  – координата пикселя по оси  $Ox$ , м;  $My_{0ij}$  – координата пикселя по оси  $Oy$ , м.

Пусть точки, координаты которых определяются матрицами (1) и (2), характеризуются шероховатостью поверхности, описываемой матрицей

$$zO = \begin{pmatrix} zO_{000}, & zO_{001}, & zO_{002}, \dots & zO_{00i} \\ zO_{010}, & zO_{011}, & zO_{012}, \dots & zO_{01i} \\ zO_{020}, & zO_{021}, & zO_{022}, \dots & zO_{02i} \\ \dots, & \dots, & \dots, \dots & \dots \\ zO_{0j0}, & zO_{0j1}, & zO_{0j2}, \dots & zO_{0ji} \end{pmatrix}, \quad (3)$$

где  $zO_{0ij}$  – шероховатость поверхности в системе координат  $Oxy$  для точек, координаты которых описываются матрицами (1) и (2).

В гауссовых моделях расчет концентрации опасного вещества при прохождении первичного облака ведется в системе координат, у которой центр расположен на поверхности земли в месте разрушения оборудования, ось  $Ox$  направлена по ветру, ось  $Oy$  – перпендикулярно ветру, ось  $Oz$  – перпендикулярно плоскости земли.

Создание алгоритмического обеспечения, которое позволяет формировать любые системы координат, в частности систему координат для первых метеоусловий  $O_{m1}x_{m1}y_{m1}z_{m1}$  и систему координат для вторых метеоусловий  $O_{m2}x_{m2}y_{m2}z_{m2}$ , описываемые матрицами типа (1)–(3), не представляет труда.

Исходные данные для расчета концентрации опасного вещества при прохождении первичного облака в системах координат  $O_{m1}x_{m1}y_{m1}z_{m1}$  и  $O_{m2}x_{m2}y_{m2}z_{m2}$ : масса опасного вещества, образующая первичное облако, –  $Q_1$ , кг, и размер первичного облака опасного вещества в гауссовой модели в начальный момент времени –  $R_1$ , м, рассчитанный по [8, 12].

Для системы координат  $O_{m1}x_{m1}y_{m1}z_{m1}$  проверяют выполнение условия

$$x_{m1} > 0. \quad (4)$$

Если условие (4) не выполняется, расчет не производится, а концентрация опасного вещества в данной точке принимается равной нулю.

Если условие (4) выполняется, по [8, 12] рассчитывают дисперсию по осям  $O_{m1}x_{m1}$ ,  $O_{m1}y_{m1}$  и  $O_{m1}z_{m1}$  и вспомогательную величину, используемую при расчете концентраций ( $G_{3m1}(x_{m1}, y_{m1}, z_{m1}, t)$ ).

Если выполняется условие

$$t \leq t_{m1}, \quad (5)$$

где  $t_{m1}$  – продолжительность первых метеоусловий, с;  $t$  – время, прошедшее с момента аварии, с; для точек с координатами  $x_{m1}$ ,  $y_{m1}$ ,  $z_{m1}$  рассчитывают концентрацию при прохождении первичного облака ( $c_1(x_{m1}, y_{m1}, z_{m1}, t)$ , г/м<sup>3</sup>) по формуле

$$C_1(x_{m1}, y_{m1}, z_{m1}, t) = \frac{Q_1 G_3(x_{m1}, y_{m1}, z_{m1}, t)}{\frac{8}{3} \pi R_1^3 + (2\pi)^{3/2} \sigma_{x_{m1}} \sigma_{y_{m1}} \sigma_{z_{m1}}}$$

Максимальную концентрацию и ее координаты в системе  $O_{m1}x_{m1}y_{m1}z_{m1}$  можно рассчитать по формуле

$$C_{1max}(x_{m1} = t_{m1} U_{m1}, 0, 0, t_{m1}) = \frac{2Q_1 G_0(x_{m1})}{\frac{8}{3} \pi R_1^3 + (2\pi)^{3/2} \sigma_{x_{m1}} \sigma_{y_{m1}} \sigma_{z_{m1}}},$$

где  $U_{m1}$  – скорость ветра для первых метеоусловий, м/с;  $G_0(x_{m1})$  – вспомогательная величина, используемая при расчете максимальной концентрации.

Если условие (5) не выполняется, то проверяется выполнение условия

$$t_{m1} < t \leq t_{m2}, \quad (6)$$

где  $t_{m2}$  – продолжительность вторых метеоусловий.

Если условие (6) не выполняется, то временной интервал выходит за время существования вторых метеоусловий и задача требует уточнений по продолжительности времени или введения параметров третьих метеоусловий.

Так как точка с координатами максимальной концентрации при прохождении первичного облака в системе координат для вторых метеоусловий в системе координат  $O_{m2}x_{m2}y_{m2}z_{m2}$  для момента времени

$$t_{m2} = 0$$

совпадает с этой же точкой в системе координат  $O_{m1}x_{m1}y_{m1}z_{m1}$  для момента времени  $t_{m1}$ , это позволяет заключить, что точка  $O_{m2}$  смещена относительно точки максимальной концентрации при прохождении первичного облака против направления ветра на расстояние

$$x_{m2} = U_{m2} t_{m1},$$

где  $U_{m2}$  – скорость ветра для вторых метеоусловий, м/с. В результате можно представить систему координат  $O_{m2}x_{m2}y_{m2}z_{m2}$ , матрицами типа (1)–(3).

На основании методики, изложенной в [8, 12], рассчитываются дисперсия по осям  $O_{m2}x_{m2}$ ,  $O_{m2}y_{m2}$  и  $O_{m2}z_{m2}$ , вспомогательные величины, используемые при определении концентраций ( $G_{0m2}(x_{m2})$  и  $G_{3m2}(x_{m2}, y_{m2}, z_{m2}, t)$ ) в точке с координатами  $x_{m2} = U_{m2} t_{m1}$ , 0, 0, что позволяет получить размер первичного облака опасного вещества в гауссовой модели в начальный момент времени ( $R_{1m2}$ , м) в системе координат  $O_{m2}x_{m2}y_{m2}z_{m2}$ :

$$R_{1m2} = \sqrt[3]{(2\pi)^{3/2} \left( \frac{G_0(x_{m2})}{G_0(x_{m1})} R_1^3 \cdot \sigma_{x_{m1}} \sigma_{y_{m1}} \sigma_{z_{m1}} - \frac{3}{8\pi} \sigma_{x_{m2}} \sigma_{y_{m2}} \sigma_{z_{m2}} \right)}$$

Из вышесказанного следует, что рассчитать концентрацию можно при прохождении первичного облака в любой точке системы координат  $O_{M_2}x_{M_2}y_{M_2}z_{M_2}$ .

Для этого в системе координат  $O_{M_2}x_{M_2}y_{M_2}z_{M_2}$  проверяют выполнение условия

$$x_{1M_2} > 0. \quad (7)$$

Если условие (7) не выполняется, расчет не производится, а концентрация опасного вещества в данной точке в системе координат  $O_{M_2}x_{M_2}y_{M_2}z_{M_2}$  принимается равной нулю.

Если условие (7) выполняется, находят дисперсию по осям  $O_{M_2}x_{M_2}$ ,  $O_{M_2}y_{M_2}$ ,  $O_{M_2}z_{M_2}$ , вспомогательную величину, используемую при расчете концентраций ( $G_{3M_2}(x_{M_2}, y_{M_2}, z_{M_2}, t)$ ), и концентрацию при прохождении первичного облака ( $c_2(x_{M_2}, y_{M_2}, z_{M_2}, t)$ , г/м<sup>3</sup>):

$$C_1(x_{M_1}, y_{M_1}, z_{M_1}, t) = \frac{Q_1 G_3(x_{M_2}, y_{M_2}, z_{M_2}, t)}{\frac{8}{3} \pi R_1^3 + (2\pi)^{3/2} \sigma_{x_{M_2}} \sigma_{y_{M_2}} \sigma_{z_{M_2}}}.$$

Максимальную концентрацию и ее координаты в системе  $O_{M_2}x_{M_2}y_{M_2}z_{M_2}$  можно определить по формуле

$$C_{1\max}(x_{M_2} = tU_{M_2}, 0, 0, t) = \frac{2Q_1 G_0(x_{M_2})}{\frac{8}{3} \pi (R_{1M_2})^3 + (2\pi)^{3/2} \sigma_{x_{M_2}} \sigma_{y_{M_2}} \sigma_{z_{M_2}}},$$

где  $U_{M_2}$  – скорость ветра для вторых метеословий, м/с;  $G_0(x_{M_2})$  – вспомогательная величина, используемая при расчете максимальной концентрации.

Применяя представленный алгоритм для третьих и последующих условий, получаем алгоритмическое обеспечение динамического моделирования по гауссовым моделям зон заражения в изменяющихся метеорологических условиях.

**Заключение.** Таким образом, впервые для гауссовых моделей решен вопрос динамического моделирования зон заражения первичным облаком в изменяющихся метеословиях.

### Список литературы

1. Лисанов М. В., Пчельников А. В., Сумской С. И. Моделирование рассеяния выбросов опасных веществ в атмосфере // Российский химический журнал. 2005. Т. XLIX, № 4. С. 18–28.
2. Методика прогнозирования масштабов заражения сильнодействующими ядовитыми веществами при авариях (разрушениях) на химически опасных объектах и транспорте: РД 52.04.253-90. Л., 1990. 27 с.
3. Грановский Э. А., Лыфарь В. А. Анализ методов оценки риска последствий аварийных выбросов и рассеяния парогазовых примесей в атмосфере // Техногенно-экологична безпека та цивільний захист. 2010. Вип. 2. С. 23–27.
4. Система стандартов безопасности труда. Пожарная безопасность технологических процессов. Общие требования. Методы контроля: ГОСТ Р 12.3.047-2012. Введ. 01.01.2014. М.: Федер. агентство по техн. регулированию и метеорологии. Стандартиформ, 2014. 61 с.
5. Научно-методические аспекты анализа аварийного риска / В. Г. Горский [и др.]. М.: Экология и информатика, 2002. 260 с.
6. Защита атмосферы от промышленных загрязнений: справочник: в 2 кн. / под ред. С. Калверта, Г. М. Инглунда. М.: Металлургия, 1988. Кн. 2. 712 с.
7. Методика оценки последствий химических аварий (Методика ТОКСИ). М.: НТЦ «Промышленная безопасность», 1996. 27 с.
8. Методика оценки последствий химических аварий (Методика «ТОКСИ-2.2») НТЦ «Промышленная безопасность», согл. Госгортехнадзором России): Методики оценки последствий аварий на опасных производственных объектах: сб. докл. Сер. 27. Вып. 2 М.: ГУП НТЦ «Промышленная безопасность», 2010. С. 123–204.
9. US Department of Commerce // Office of Response and Restoration. URL: [http://response.restoration.noaa.gov/sites/default/files/ALOHA\\_Tech\\_Doc.pdf](http://response.restoration.noaa.gov/sites/default/files/ALOHA_Tech_Doc.pdf). (accessed 19.04.2016).
10. Методика расчета концентраций в атмосферном воздухе вредных веществ, содержащихся в выбросах предприятий: ОНД-86: утв. Председателем Государственного комитета СССР по гидрометеорологии и контролю природной среды 04.08.1986. Л.: Госкомгидромет; Гидрометеоздат, 1987. 94 с.
11. Сравнение моделей распространения загрязнений в атмосфере / И. В. Белов [и др.] // Математическое моделирование. 1999. Т. 11, № 8. С. 52–64.
12. Методика расчета распространения аварийных выбросов, основанная на модели рассеивания тяжелого газа / А. А. Шаталов [и др.] // Безопасность труда в промышленности. 2004. № 9. С. 46–52.

13. Моделирование распространения паровоздушного облака тяжелого газа при его мгновенном выбросе и непрерывном истечении / А. П. Шевчук [и др.] // Химическая промышленность. 1992. № 10. С. 54–57.
14. Crabol B., Roux A., Lhomme V. Interpretation of the Thomey Island Phase I trials with the BOX model CIGALE2 // Journal of Hazardous Materials. 1987. Vol. 16. P. 201–214.
15. Spicer T. O., Havens J. A. Field test validation of the DEGADIS model // Journal of Hazardous Materials. 1987. Vol. 16. P. 231–245.
16. Puttock J. S. Comparison of Thomey Island data with predictions of HEGABOX/HEGADAS // Journal of Hazardous Materials. 1987. Vol. 16. P. 439–455.
17. Mohan M., Panwar T. S., Singh M. P. Development of dense gas dispersion model for emergency preparedness // Atmospheric Environment. 1995. Vol. 29. No. 16. P. 2075–2087.
18. Morgan D. L., Kansa E. J., Morris L. K. Simulations and parameter variation studies of heavy gas dispersion using the SLAB model – condensed // IUTAM Symposium on atmospheric dispersion heavy gases and small particles. Delft University of Technology, The Netherlands, September, 1983. P. 83–92.
19. Deaves D. M. 3-dimensional model predictions for the upwind building trial of Thomey Island Phase II // Journal of Hazardous Materials. 1985. Vol. 11. P. 341–346.
20. Jacobsen O., Magnussen B. F. 3-D numerical simulation of heavy gas dispersion // Journal of Hazardous Materials. 1987. Vol. 16. P. 215–230.
21. Chan S. T., Ermak D. L., Morris L. K. FEM3 model simulations of selected Thomey Island Phase I trials // Journal of Hazardous Materials. 1987. Vol. 16. P. 267–292.
22. Едигаров А. С. Численный расчет турбулентного течения холодного тяжелого газа в атмосфере // Журнал вычислительной математики и математической физики. 1991. Т. 31, № 9. С. 1369–1380.
23. Едигаров А. С. Численное моделирование аварий на хранилище сжиженного нефтяного газа высокого давления // Математическое моделирование. 1995. Т. 7, № 4. С. 3–18.
24. Иванов А. В., Матрюков Б. С. О достоверности использования вычислительного комплекса PHOENICS в расчетах рассеяния вещества в возмущенном потоке // Известия ВУЗов. Черная металлургия. 1999. № 11. С. 64–68.
25. Иванов А. В. Разработка методических основ оценки последствий химических промышленных аварий (на примере металлургического комбината): дис. ... канд. техн. наук. М., 1999. 283 л.
26. Perdikaris G. A. Numerical simulation of the three-dimensional microscale dispersion of air-pollutants in regions with complex topography // Heat and Mass Transfer. 2001. Vol. 37. P. 583–591.
27. Селезнев В. Е., Клишин Г. С., Алешин В. В. Математический анализ газовой опасности при выбросах природного газа // Инженерная экология. 2000. № 5. С. 29–36.
28. Селезнев В. Е. Повышение безопасности и эффективности газопроводных систем ТЭЖ с использованием методов прямого численного моделирования: дис. ... д-ра техн. наук. Саров, 2003. 303 л.
29. Селезнев В. Е., Алешин В. В., Прялов С. Н. Основы численного моделирования магистральных трубопроводов / под. ред. В. Е. Селезнева. М.: КомКнига, 2005. 496 с.
30. Котов Д. С. Методики и алгоритмическое обеспечение прогнозирования зон заражения при чрезвычайных ситуациях на химически опасных объектах: дис. ... канд. техн. наук. Минск, 2018. 221 л.
31. Сумской С. И. Модели оценки последствий распространения опасных веществ в воздушной среде: автореф. дис. ... канд. техн. наук. М., 2007. 23 с.

### References

1. Lisanov M. V., Pchel'nikov A. V., Sumskoy S. I. Modeling the dispersion of emissions of hazardous substances in the atmosphere. *Rossiyskiy khimicheskiy zhurnal* [Russian Chemical Journal], 2005, vol. XLIX, no. 4, pp. 18–28 (In Russian).
2. Methodology for predicting the scale of contamination with potent toxic substances during accidents (destructions) at chemically hazardous facilities and transport: RD 52.04.253-90. Leningrad, 1990. 27 p. (In Russian).
3. Granovsky E. A., Lyfar V. A. Analysis of methods for assessing the risk of consequences of emergency emissions and dispersion of steam-gas impurities in the atmosphere. *Tekhnogenno-ekologichna bezpeka ta tsivil'niy zakhist* [Technogenic-ecological safety and civil protection], 2010, issue. 2, pp. 23–27 (In Russian).
4. System of occupational safety standards. Fire safety of technological processes. General requirements. Control methods: GOST R 12.3.047-2012. Enter. 01.01.2014. Moscow, Federal'noye Agenstvo po tekhnicheskomy regulirovaniyu i meteorologii Publ., 2014. 61 p. (In Russian).



5. Gorsky V. G., Motkin G. A., Petrunin V. A., Tereshchenko G. F., Shatalova A. A., Shvetsova-Shilovskaya T. N. *Nauchno-metodicheskiye aspekty analiza avariynogo riska* [Scientific and methodological aspects of emergency risk analysis]. Moscow, Ekologiya i informatika Publ., 2002. 260 p. (In Russian).
6. *Zashchita atmosfery ot promyshlennykh zagryazneniy: spravochnik: v 2 kn.* [Protection of the atmosphere from industrial pollution: reference book: in 2 books]. Ed. S. Calvert, G. M. Englund. Moscow, Metallurgiya Publ., 1988. Book 2. 712 p. (In Russian).
7. *Metodika otsenki posledstviy khimicheskikh avariy* (Metodika TOKSI) [Methodology for assessing the consequences of chemical accidents (TOXI Methodology)]. Moscow, NTTS "Promyshlennaya bezopasnost'" Publ., 1996. 27 p. (In Russian).
8. *Metodika otsenki posledstviy khimicheskikh avariy* (Metodika "TOKSI-2.2" NTTS "Promyshlennaya bezopasnost'", soglasovannaya Gosgortekhnadzorom Rossii): Metodiki otsenki posledstviy avariy na opasnykh proizvodstvennykh ob'yektakh: sbornik dokladov [Methodology for assessing the consequences of chemical accidents (Methodology "TOXI-2.2" of the Scientific and Technical Center "Industrial Safety", approved by the Gosgortekhnadzor of Russia): Methods for assessing the consequences of accidents at hazardous production facilities: collection report], series 27, issue 2. Moscow, NTTS "Promyshlennaya bezopasnost'" Publ., 2010, pp. 123–204 (In Russian).
9. US Department of Commerce. *Office of Response and Restoration*. Available at: [http://response.restoration.noaa.gov/sites/default/files/ALOHA\\_Tech\\_Doc.pdf](http://response.restoration.noaa.gov/sites/default/files/ALOHA_Tech_Doc.pdf). (accessed 04.19.2016).
10. Methodology for calculating concentrations in the atmospheric air of harmful substances contained in emissions from enterprises: OND-86: approved. Chairman of the USSR State Committee for Hydrometeorology and Environmental Control 08/04/1986. Leningrad, Goskomgidromet: Gidrometeoizdat Publ., 1987. 94 p. (In Russian).
11. Belov I. V., Bespalov M. S., Klochkova L. V., Pavlova N. K., Suzan D. V., Tishkin V. F. Comparison of models of the spread of pollution in the atmosphere. *Matematicheskoye modelirovaniye* [Mathematical modeling], 1999, vol. 11, no. 8, pp. 52–64 (In Russian).
12. Shatalov A. A., Lisanov M. V., Pchel'nikov A. V., Sumskey S. I. Methodology for calculating the distribution of emergency emissions based on the heavy gas dispersion model. *Bezopasnost' truda v promyshlennosti* [Labor safety in industry], 2004, no. 9, pp. 46–52 (In Russian).
13. Shevchuk A. P., Shebeko YU. N., Gurinovich L. V., Smolin I. M. Modeling the propagation of a steam-air cloud of heavy gas during its instantaneous release and continuous outflow. *Khimicheskaya promyshlennost'* [Chemical industry], 1992, no. 10, pp. 54–57 (In Russian).
14. Crabol V., Roux A., Lhomme V. Interpretation of the Thomey Island Phase I trials with the BOX model CIGALE2. *Journal of Hazardous Materials*, 1987, vol. 16, pp. 201–214.
15. Spicer T. O., Havens J. A. Field test validation of the DEGADIS model. *Journal of Hazardous Materials*, 1987, vol. 16, pp. 231–245.
16. Puttock J. S. Comparison of Thomey Island data with predictions of HEGABOX/HEGADAS. *Journal of Hazardous Materials*, 1987, vol. 16, pp. 439–455.
17. Mohan M., Panwar T. S., Singh M. P. Development of dense gas dispersion model for emergency preparedness. *Atmospheric Environment*, 1995, vol. 29, no. 16, pp. 2075–2087.
18. Morgan D. L., Kansa E. J., Morris L. K. Simulations and parameter variation studies of heavy gas dispersion using the SLAB model – condensed. *IUTAM Symposium on atmospheric dispersion heavy gases and small particles*. Delft University of Technology, The Netherlands, September, 1983, pp. 83–92.
19. Deaves D. M. 3-dimensional model predictions for the upwind building trial of Thomey Island Phase II. *Journal of Hazardous Materials*, 1985, vol. 11, pp. 341–346.
20. Jacobsen O., Magnussen B. F. 3-D numerical simulation of heavy gas dispersion. *Journal of Hazardous Materials*, 1987, vol. 16, pp. 215–230.
21. Chan S. T., Ermak D. L., Morris L. K. FEM3 model simulations of selected Thomey Island Phase I trials. *Journal of Hazardous Materials*, 1987, vol. 16, pp. 267–292.
22. Edigarov A. S. Numerical calculation of the turbulent flow of cold heavy gas in the atmosphere. *Zhurnal vychislitel'noy matematiki i matematicheskoy fiziki* [Journal of Computational Mathematics and Mathematical Physics], 1991, vol. 31, no. 9, pp. 1369–1380 (In Russian).
23. Edigarov A. S. Numerical modeling of accidents at a high-pressure liquefied petroleum gas storage facility. *Matematicheskoye modelirovaniye* [Mathematical Modeling], 1995, vol. 7, no. 4, pp. 3–18 (In Russian).
24. Ivanov A. V., Mastryukov B. S. On the reliability of using the PHOENICS computer complex in calculating the scattering of matter in a disturbed flow *Izvestiya VUZov. Chernaya metallurgiya* [Izvestiya VUZov. Ferrous metallurgy], 1999, no. 11, pp. 64–68 (In Russian).
25. Ivanov A. V. *Razrabotka metodicheskikh osnov otsenki posledstviy khimicheskikh promyshlennykh avariy (na primere metallurgicheskogo kombinata)*. Dissertatsiya kandidata tekhnicheskikh nauk

[Development of methodological foundations for assessing the consequences of chemical industrial accidents (using the example of a metallurgical plant). Dissertation PhD (Engineering)]. Moscow, 1999. 283 p. (In Russian).

26. Perdikaris G. A. Numerical simulation of the three-dimensional microscale dispersion of air-pollutants in regions with complex topography. *Heat and Mass Transfer*, 2001, vol. 37, pp. 583–591.

27. Seleznev V. E., Klishin G. S., Aleshin V. V. Mathematical analysis of gas hazard during natural gas emissions. *Inzhenernaya ekologiya* [Engineering Ecology], 2000, no. 5, pp. 29–36 (In Russian).

28. Seleznev V. E. *Povysheniye bezopasnosti i effektivnosti gazoprovodnykh sistem TEK s ispol'zovaniyem metodov pryamogo chislennogo modelirovaniya*. *Dissertatsiya doktora tekhnicheskikh nauk* [Improving the safety and efficiency of gas pipeline systems of the fuel and energy complex using direct numerical modeling methods. Dissertation DSc (Engineering)]. Sarov, 2003. 303 p. (In Russian).

29. Seleznev V. E., Aleshin V. V., Pryalov S. N. *Osnovy chislennogo modelirovaniya magistral'nykh truboprovodov* [Fundamentals of numerical modeling of main pipelines]. Ed. by V. E. Seleznev. Moscow, KomKniga Publ., 2005. 496 p. (In Russian).

30. Kotov D. S. *Metodiki i algoritmicheskoye obespecheniye prognozirovaniya zon zarazheniya pri chrezvychaynykh situatsiyakh na khimicheski opasnykh ob'yektakh*. *Dissertatsiya kandidata tekhnicheskikh nauk* [Methods and algorithmic support for forecasting contamination zones in emergency situations at chemically hazardous objects. Dissertation PhD (Engineering)]. Minsk, 2018. 221 p. (In Russian).

31. Sumskey S. I. *Modeli otsenki posledstviy rasprostraneniya opasnykh veshchestv v vozduшной среде*. *Avtoreferat dissertatsii kandidata tekhnicheskikh nauk* [Models for assessing the consequences of the spread of hazardous substances in the air. Abstract of thesis PhD (Engineering)]. Moscow, 2007. 23 p. (In Russian).

#### Информация об авторах

**Котов Дмитрий Сергеевич** – кандидат технических наук, доцент, ученый секретарь. НИРУП «Геоинформационные системы» (220012, г. Минск, ул. Сурганова, 6, Республика Беларусь). E-mail: viscount.d@gmail.com

**Новиков Евгений Владимирович** – кандидат технических наук, доцент, директор. Институт современных технологий связи Белорусской государственной академии связи (220006, г. Минск, ул. Ф. Скорины, 8/2, Республика Беларусь). E-mail: eugenovikov@gmail.com

**Котов Сергей Григорьевич** – кандидат технических наук, доцент, ведущий научный сотрудник ГУ «Белорусский институт системного анализа и информационного обеспечения научной сферы» (220006, г. Минск, пр-т Победителей, 7, Республика Беларусь). E-mail: kotov@belisa.org.by

#### Information about the authors

**Kotov Dmitry Sergeevich** – PhD (Engineering), Assistant Professor, Scientific Secretary. SIUE “Geoinformation systems” (6, Sarganova str., 220012, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: viscount.d@gmail.com

**Novikov Evgeniy Vladimirovich** – PhD (Engineering), Assistant Professor, Director. Institute of Modern Communication Technologies of the Belarusian State Academy of Communications (8/2, Francysk Skaryna str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: eugenovikov@gmail.com

**Kotov Sergey Grigorievich** – PhD (Engineering), Assistant Professor, Leading Researcher, State Institution “Belarusian Institute of System Analysis and Information Support for the Scientific Sphere” (7, Pobediteley Ave., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: kotov@belisa.org.by

Поступила после доработки 26.12.2023

# МЕХАНИКА MECHANICS

---

УДК 66.067.2

**А. М. Волк, А. И. Вилькоцкий, С. В. Янович**  
Белорусский государственный технологический университет

## ГАЗОЦЕНТРОБЕЖНОЕ РАЗДЕЛЕНИЕ КРУПНОДИСПЕРСНЫХ СУСПЕНЗИЙ

Разработаны конструкции для газоцентрифужного разделения крупнодисперсных суспензий, которые позволяют в одном устройстве производить отделение жидкой фазы и сушку материала, обеспечить необходимую влажность твердого продукта крупнодисперсных суспензий, непрерывность процесса фильтрации мелкодисперсных суспензий, разделение кристаллизующихся суспензий. При этом достигается высокая производительность, экономичность в изготовлении, простота в эксплуатации.

Выполнены экспериментальные исследования основных стадий процесса разделения: проточно-пленочное сгущение суспензии и обезвоживание твердых частиц в потоке газа. Выявлена зависимость конечной влажности твердого продукта от геометрических параметров газоцентрифужных элементов, размеров частиц, нагрузок по фазам и их соотношения.

Выбор режима позволяет обеспечить необходимую конечную влажность твердого продукта крупнодисперсных суспензий, непрерывность процесса фильтрации мелкодисперсных суспензий, разделение кристаллизующихся суспензий.

**Ключевые слова:** разделение многофазных систем, суспензии, газоцентрифужные разделители, проточно-пленочное сгущение, геометрические параметры, нагрузки по фазам, влажность твердого продукта.

**Для цитирования:** Волк А. М., Вилькоцкий А. И., Янович С. В. Газоцентрифужное разделение крупнодисперсных суспензий // Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика. 2024. № 1 (278). С. 18–25.

DOI: 10.52065/2520-6141-2024-278-3.

**A. M. Volk, A. I. Wilkocki, S. V. Yanovich**  
Belarusian State Technological University

## GAS-CENTRIFUGAL SEPARATION OF LARGE-DISPERSE SUSPENSIONS

Designs for gas-centrifugal separation of large-dispersed suspensions are developed, which allow to separate liquid phase and drying of the material in one device, to provide necessary humidity of solid product of large-dispersed suspensions, continuity of filtering process of fine-dispersed suspensions, separation of crystallising suspensions. Thus high productivity, economy in manufacturing, simplicity in operation are reached.

Experimental studies of the main stages of the separation process: flow-film thickening of suspension and dewatering of solid particles in the gas flow have been carried out. The dependence of the final moisture content of the solid product on geometrical parameters of gas centrifugal elements, particle sizes, loads on phases and their ratio has been revealed.

The choice of the mode allows to provide the necessary final moisture content of the solid product of large-dispersed suspensions, continuity of the filtering process of fine-dispersed suspensions, separation of crystallising suspensions.

**Keywords:** separation of multiphase systems, suspensions, gas-centrifugal separators, flow-film thickening, geometrical parameters, phase loads, solid product humidity.

**For citation:** Volk A. M., Vilkotsky A. I. Yanovich S. V. Gas-centrifugal separation of large-disperse suspensions. *Proceedings of BSTU, issue 3, Physics and Mathematics. Informatics*, 2024, no. 1 (278), pp. 18–25 (In Russian).

DOI: 10.52065/2520-6141-2024-278-3.

**Введение.** Разделение многофазных систем является составной частью многих технологических процессов в химической, пищевой, нефтехимической, микробиологической, энергетической и других отраслях промышленности. Это отделение кристаллов солей от раствора, гранул полимеров от жидкой фазы, обезвоживание мелких фракций твердых материалов, улавливание жидких фракций в газожидкостных потоках, классификация материалов и т. д.

Важной технической задачей является разделение различного типа суспензий [1–5]. Разделяемые суспензии отличаются широким диапазоном концентрации твердой фазы, размером частиц (от 200 мкм до 5 мм), физическими свойствами.

Способ разделения фаз и оборудование для проведения процесса выбираются в зависимости от типа суспензии, условий, в которых данный процесс происходит, и требуемой степени разделения. Основными способами являются осаждение и фильтрование.

Гравитационное осаждение применяется для разделения фаз различной плотности, происходит в гравитационных отстойниках различных конструкций, при очистке сточных вод, при сгущении крупнодисперсных суспензий. При данном способе скорость процесса разделения определяется соотношением действующих на частицу дисперсной фазы сил тяжести, Архимеда и гидродинамического воздействия [1, 6, 7]. При высокой концентрации движение частиц имеет стесненный характер, и при их малых размерах или при небольшой разности плотностей жидкой и твердой фаз процесс разделения происходит медленно. Применяемое оборудование (резервуары, лотки, отстойники) отличается простотой, небольшими затратами на изготовление, но при больших объемах суспензии устройства занимают большие производственные площади. Кроме того, выгрузка осадка в аппаратах полунепрерывного действия представляет собой трудоемкую и довольно сложную задачу [8]. Поэтому гравитационное осаждение имеет ограниченное применение.

Более интенсивно процесс разделения фаз происходит в поле центробежных сил. Данный способ для осаждения из основного потока более тяжелых частиц реализуется в гидроциклонах [9–11]. Конструкции циклонов отличаются организацией ввода, размерами цилиндрической части и конической циклонной камеры, диаметром выхлопной трубы и выходного патрубка. Циклоны характеризуются высокой производительностью, простотой и легкостью обслуживания, относительно небольшими затратами на изготовление и эксплуатацию, отсутствием движущихся частей. Но они имеют большое гидравлическое сопротивление и чувствительны к изменению

скоростей потока [12]. Высокая влажность продукта на выходе и недостаточная степень разделения характеризуют работу гидроциклонов, поэтому они и применяются в основном для предварительного сгущения суспензий и их классификации.

Более высокая степень разделения фаз суспензии достигается с помощью центрифуг, благодаря центробежным силам которых значительно увеличивается движущая сила процесса и тем самым повышается скорость разделения неоднородных систем [5, 13].

Важной характеристикой центрифуг является фактор разделения, позволяющий сделать сравнение ускорений, действующих на частицу в центробежном и гравитационных полях:

$$K_p = V_\phi^2 / (rg),$$

где  $V_\phi^2 / r$  – центробежное ускорение;  $g$  – ускорение силы тяжести.

Для разделения суспензий применяют нормальные центрифуги с фактором разделения  $K_p < 3000$ . Сверхцентрифуги с фактором разделения больше 3000 позволяют производить разделение на молекулярном уровне. Грубодисперсные суспензии разделяют в осадительных центрифугах. Твердый осадок после разделения в таких центрифугах имеет низкую влажность – в пределах 0,5–5,0% [13]. При небольших габаритах центрифуги обеспечивают высокую производительность. Недостатком осадительных и фильтрующих центрифуг является сложность выгрузки осадка. В устройствах периодического действия процесс центрифугирования прерывается при выгрузке осадка. Центрифуги с непрерывным удалением осадка инерционным способом, пульсирующим поршнем или шнеком сложны в устройстве, требуют более высоких энергетических затрат [13].

Широкое применение в промышленности имеет способ разделения суспензий с помощью фильтровальных проницаемых перегородок, которые являются важной частью фильтра любой конструкции – барабанного, ленточного, патронного и др. [14]. Твердые частицы, задерживаясь на перегородке, образуют влажный осадок. Эффективность процесса фильтрования определяется свойствами перегородки и образовавшегося осадка.

Повышение производительности требует увеличения перепада давления, что возможно только при достаточной механической прочности перегородки. Образование осадка и закупоривание ведет к повышению сопротивления, требует удаления осадка и регенерации проницаемой поверхности. Повышение производительности фильтров ведет к увеличению их

размеров, что усложняет изготовление и эксплуатацию фильтровального оборудования. Применяемые в промышленности фильтры громоздки по размерам, сложны в эксплуатации и характеризуются большими затратами энергии.

**Основная часть.** В области разделения суспензий актуальной задачей является повышение производительности, качества, надежности и долговечности применяемого оборудования.

*Аппараты для разделения многокомпонентных систем.* Избавиться от ряда недостатков серийного оборудования позволяют разработанные сотрудниками кафедр «Машины и аппараты химических и силикатных производств» и «Процессы и аппараты химических производств» Белорусского государственного технологического университета конструкции и способ разделения суспензий, классификации твердых материалов, сушки высоковлажных материалов, сепарации жидкости, массообмена и др. [15]. Газоцентрические разделители суспензии и центробежные сепараторы достаточно близки как по конструкции, так и по своему техническому назначению. Эффективное отделение жидкой фазы является основной задачей данных конструкций. Реализуемый в этих конструкциях способ позволяет использовать положительные эффекты проточного фильтрования и избавиться от отмеченных выше недостатков изменяемого оборудования.

Основной частью созданных конструкций является фильтровальный элемент, внутрь которого подаются закрученный газовый поток и разделяемая суспензия (рис. 1). Возникающие при этом центробежные силы способствуют процессу разделения. Фильтровальная перегородка задерживает твердые частицы, пропуская жидкость и газ. Особенностью процесса является то, что твердые частицы находятся в непрерывном движении относительно фильтровального элемента, а это препятствует отложению осадка или полностью предотвращает его. При этом имеется возможность изменять режим работы устройств с целью выбора оптимальных технологических параметров процесса разделения фаз.

Данный способ может использоваться для разделения суспензий и газожидкостных потоков, классификации твердых материалов в газовом или жидкостном потоке, сухой очистки газов от частиц пыли. Фильтровальная поверхность может быть различной формы: цилиндрической, конической, спиралеобразной. Сужение проницаемых элементов позволяет сохранять интенсивность движущегося потока.

Рассмотрим способ разделения суспензий в цилиндрическом газоцентрическом фильтре. Устройство для осуществления данного способа (рис. 1) состоит из цилиндрического элемента 1,

помещенного в корпус 2. Сверху корпус закрыт съемной крышкой 3. В крышке находится конический карман 4 с патрубком подачи воздуха 5 и штуцером подачи суспензии 6. Нижняя крышка 7 имеет патрубок 8 для отвода жидкой фазы в разгрузочное отверстие 9. Газовый поток закручивается с помощью лопаточного завихрителя 10.

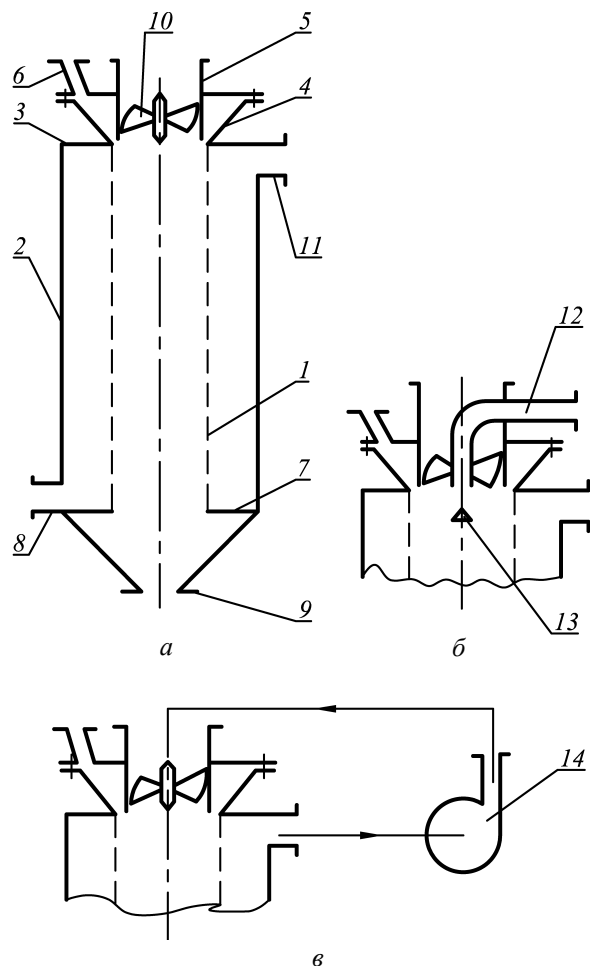


Рис. 1. Газоцентрические фильтры: а – с пленочным вводом суспензии; б – с центробежным вводом суспензии; в – с замкнутым циклом по воздуху; 1 – проницаемый элемент; 2 – корпус; 3 – верхняя крышка; 4 – конический карман; 5 – патрубок подачи воздуха; 6 – штуцер подачи суспензии; 7 – нижняя крышка; 8 – патрубок отвода жидкой фазы; 9 – разгрузочное отверстие; 10 – лопаточный завихритель; 11 – патрубок отвода воздуха; 12 – питательная труба; 13 – конический отбойник; 14 – вентилятор

Суспензия через кольцевой зазор между карманом и газоподводящим патрубком подается пленкой на цилиндрический проницаемый элемент и под воздействием газового потока движется по спиральным траекториям (рис. 1, а). Избыточное давление на стенке, создаваемое центробежными силами в пленке и газовым потоком, вызывает принудительное движение

жидкой фазы через отверстия фильтровальной поверхности. Жидкость и воздух из корпуса аппарата отводятся через патрубки 8 и 11 соответственно.

После отвода основной массы жидкости влажные частицы движутся вдоль фильтровальной поверхности под воздействием газового потока по спиральным траекториям, достигают нижней части элемента и удаляются из аппарата. При контакте частиц с проницаемым элементом и взаимодействии с газом происходит удаление влаги с их поверхности.

Важное значение для эффективной работы аппарата имеет движение суспензии на начальном участке, где происходит закрутка пленки. Одной из основных характеристик, определяющих данный процесс, является начальная толщина пленки, которая зависит от зазора между корпусом и питательным карманом. При достаточно малой величине зазора жидкая фаза равномерно распределяется по периметру цилиндрического элемента.

При наличии крупных частиц целесообразно изменить способ подачи суспензии. Устройство с осевой подачей суспензии и диспергированием жидкой фазы имеет конструктивные отличия лишь в верхней части (рис. 1, б). Суспензия подается через питательную трубу 12 в область за завихрителем на конический отбойник 13. Отбойник способствует дроблению жидкой фазы и препятствует попаданию жидкости в область пониженного давления вблизи оси цилиндра. Жидкая фаза сепаруется под воздействием центробежных сил на фильтровальную поверхность, где формируется вращательно-поступательное пленочное течение и происходит фильтрование жидкости.

В устройстве, представленном на рис. 1, в, воздух вентилятором 14 отводится из аппарата и подается снова на завихритель. В результате создается дополнительная движущая сила процесса разделения.

Анализ литературных источников теоретических исследований выявил сложность процесса разделения суспензий, происходящего с помощью закрученного газового потока. Для дополнения и проверки созданных моделей были выполнены экспериментальные исследования.

*Экспериментальные исследования процесса точечного разделения суспензий в перфорированном элементе.* Основной целью является минимизация влажности продукта при устойчивом протекании процесса разделения. При этом должна быть обеспечена достаточно высокая производительность.

Выявление и исследование основных факторов на экспериментальной установке (рис. 2) позволяет выбрать оптимальные конструктивные параметры аппарата и режимы его работы.

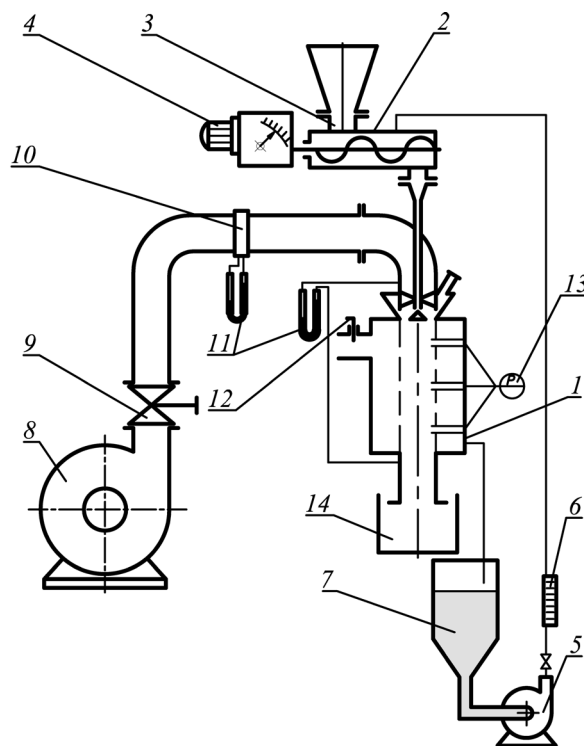


Рис. 2. Схема экспериментальной установки для исследования газоцентрифужного разделения суспензии:

- 1 – опытный фильтр; 2 – шнековый питатель;
- 3 – бункер; 4 – вариатор; 5 – насос; 6 – ротаметр;
- 7 – емкость для фильтрата; 8 – вентилятор;
- 9 – вентиль; 10 – диафрагма; 11 – дифманометр;
- 12 – заслонка; 13 – датчики давления;
- 14 – емкость для осадка

Основной частью опытной установки является газоцентрифужный разделитель с фильтровальной цилиндрическим элементом и лопастным завихрителем. Твердая и жидкая фазы подавались раздельным способом в шнековый питатель 2, приводимый в движение электрическим мотором. Твердые частицы засыпались в бункер 3, и их расход регулировался вариатором 4. Вода подавалась насосом 5, ее количество замерялось ротаметром 6. В установке подача воды организована по замкнутому циклу. Для сбора фильтрата предусмотрена емкость 7. Подача суспензии была организована различными способами: в поток перед завихрителем, в область после завихрителя и кольцевой пленкой. Раздельная подача фаз позволяет регулировать их соотношение: Ж : Т. Расход газа, подаваемого вентилятором 8, регулировался вентилем 9 и измерялся с помощью диафрагмы 10 и дифманометра 11.

Подача воздуха через проницаемый элемент регулировалась заслонкой 12. Датчики давления 13 предусмотрены для измерения профиля скорости газа и перепада давления на стенке проницаемого

элемента. Емкость 14 служит для сбора обезвоженного продукта.

Первоочередной задачей проводимого эксперимента были исследование и подбор проницаемых элементов, определение допустимых нагрузок по разделяемым фазам, выявление доминирующих факторов, влияющих на конечную влажность твердого продукта.

Испытания проводились с гранулами полистирола размером 2–4 мм, плотностью 1000–1050 кг/м<sup>3</sup>, полиэтилена плотностью 930–970 кг/м<sup>3</sup>, размером 1,5–3,0 мм, фракцией песка размером 2–3 мм, плотностью 1500 кг/м<sup>3</sup>. Жидкой фазой служила вода плотностью 1000 кг/м<sup>3</sup>. Гранулы полиэтилена имели цилиндрическую форму одинакового диаметра высотой 2–4 мм. Форма частиц полистирола – сферическая.

Измерения проводились в соответствии с методикой и рекомендациями работы [16].

На экспериментальной установке исследовались цилиндрические проницаемые элементы диаметром 0,15 м и длиной 1 м:

- а) металлокерамика пористостью 27%, толщиной 1 мм;
- б) стальной перфорированный лист с размерами отверстий 0,75 мм, площадью отверстий 8%.
- в) фильтровальные сетки с относительной площадью косых, невидимых на свету отверстий 16 и 21%;
- г) сетки для классификации сыпучих материалов с площадью отверстий 36 и 48%.

Нагрузка суспензии на фильтровальный элемент изменялась в пределах 0,5–4,0 м<sup>3</sup>/ч. Отношение фаз Ж : Т было различным, от 5 : 1 до 1 : 1.

В исследуемом проницаемом элементе могут быть выделены два основных этапа:

- 1) пленочное течение жидкости и ее фильтрование через проницаемую перегородку;
- 2) удаление влаги с поверхности частицы после отвода основной массы жидкости.

Первый этап позволяет увеличить давление или брать элемент с высокой проницаемостью.

Эффективность удаления поверхностной влаги зависит от времени и интенсивности взаимодействия частицы с газовым потоком.

Испытания выбранных проницаемых элементов показали, что отвод жидкой фазы в довольно широком диапазоне нагрузок происходит на небольшом участке длиной порядка в один диаметр.

Конечная влажность твердой фазы зависела от количества газа, прошедшего через проницаемый элемент.

В сетках с большой площадью отверстий на небольших участках наблюдался отвод основной массы газа. Вследствие недостаточности времени взаимодействия твердой и газовой фаз

на выходе получали продукт высокой влажности.

В этой связи сетки с площадью отверстий 36 и 48% оказались непригодными. Испытания перфорированного листа с площадью отверстий 8% показали, что элементы малой проницаемости не обеспечивают достаточно эффективного разделения вследствие того, что через них проходит относительно малая часть газового потока.

Требуемым условиям удовлетворяют металлокерамика с площадью отверстий 27% и фильтровальные сетки с площадью отверстий 16 и 21%.

Предъявляемым требованиям соответствует фильтровальная сетка проницаемостью 16%. К тому же ее стоимость более низкая по сравнению с другими проницаемыми материалами.

Дальнейшие испытания проводились с целью выбора оптимальных геометрических параметров конструкции. Нагрузка по суспензии составляла 1000 кг/ч при соотношении фаз Т : Ж = 1 : 2

Давление в аппарате, соотношение касательной и осевой составляющих скорости, крутка газового потока зависят от параметров завихрителя. В исследуемой установке завихрение потока происходило лопаточными завихрителями. Плоские лопатки имели сужающую к центру форму и были наклонены под одинаковым углом к плоскости перпендикулярного оси сечения. Исследование зависимости влажности при разных соотношениях подаваемых фаз показали, что оптимальный угол находится в пределах 30–40° (рис. 3). Повышение влажности при уменьшении угла может быть объяснено увеличением размера зоны обратных токов, увеличением уноса жидкости с газовым потоком и коагуляцией жидкости на поверхности частиц твердой фазы. При угле наклона, превышающем 40°, степень закрутки потока уменьшается и сокращается время интенсивного взаимодействия частиц с газовым потоком, что ведет к увеличению влажности.

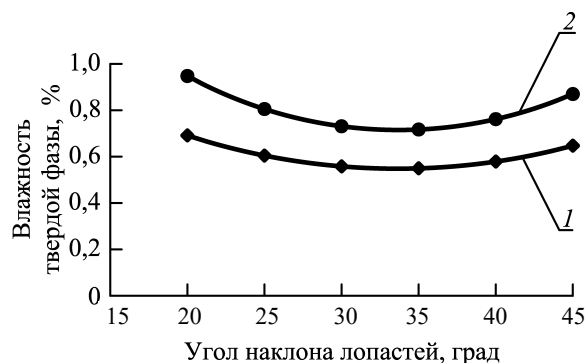


Рис. 3. Зависимость влажности твердой фазы от угла наклона лопастей завихрителя:  
Суспензия: 1 – полистирол – вода;  
2 – полиэтилен – вода

В дальнейшем угол наклона лопастей завихрителя составлял 35°.

Были проведены исследования с элементами различной длины при среднерасходной скорости газового потока 20 м/с и соотношении фаз Ж : Т = 2 : 1. В пределах до  $L/D = 6$  наблюдалось быстрое уменьшение влажности при увеличении длины (рис. 4). Изменение длины в пределах  $L/D = 6-10$  уменьшает влажность, но незначительно. Дальнейшее увеличение длины не оказывает существенного влияния на влажность.

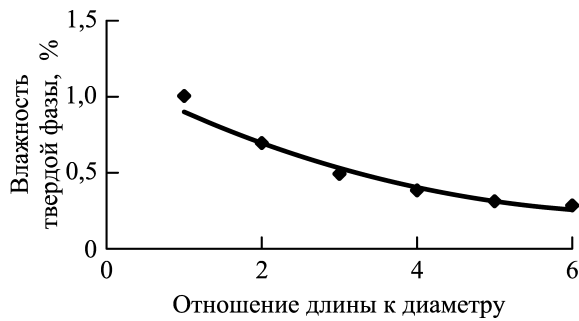


Рис. 4. Зависимость влажности твердой фазы от длины проникаемого элемента: суспензия: полиэтилен – вода

Впоследствии исследование проводилось с проникаемыми элементами диаметром 0,15 м, длиной 1 м при нагрузке по суспензии 1000 кг/ч.

Изменение соотношения фаз не оказывает существенного влияния на конечную влажность твердого продукта (рис. 5).

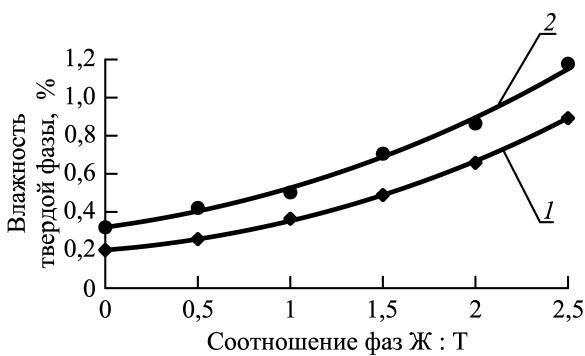


Рис. 5. Зависимость влажности твердой фазы от соотношения фаз: Суспензия: 1 – полистирол – вода; 2 – полиэтилен – вода

Гидродинамика процесса разделения в значительной степени зависит от конструкции завихрителя и скорости газового потока.

Исследование зависимости влажности твердого продукта от среднерасходной скорости газового потока при начальном соотношении фаз Ж : Т = 2 : 1 показало, что оптимальной является скорость 18–20 м/с (рис. 6).

Данная закономерность верна для различных суспензий, отличающихся как физическими свойствами, так и размерами частиц твердой фазы.

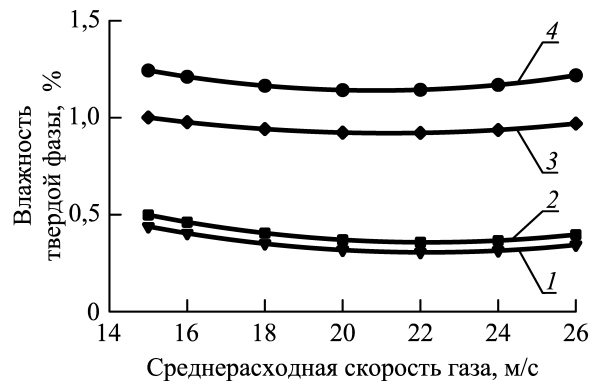


Рис. 6. Влияние скорости газа на влажность твердой фазы: Суспензия: 1 – полистирол (1,53 мм) – вода; 2 – полиэтилен (2–4 мм) – вода; 3 – сульфат аммония (0,5–5,0 мм) – вода; 4 – песок (2–4 мм) – вода

Размеры частиц твердой фазы в значительной степени определяют конечную влажность. При гидродинамических способах удаления поверхностной влаги (ударе о сетку, продувке воздухом) на поверхности частиц всегда остается некоторое количество жидкости, зависящее от свойств смачиваемости твердого материала. Для исследуемых суспензий наблюдалось увеличение влажности с уменьшением размера частиц (рис. 7). Данная закономерность может быть объяснена только увеличением общей площади поверхности совокупности твердых частиц.

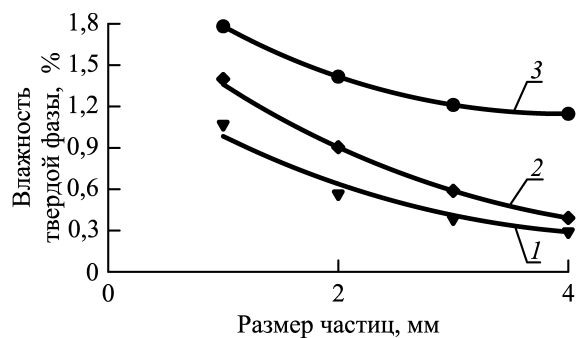


Рис. 7. Зависимость влажности твердой фазы от размера частиц: Суспензия: 1 – полистирол – вода; 2 – полиэтилен – вода; 3 – песок – вода

**Заключение.** Применение разработанных газодобрососредств позволяет достичь высокой эффективности процесса разделения крупнодисперсных суспензий и получить на выходе твердый продукт более низкой влажности, чем при использовании известных в промышленности конструкций фильтров и центрифуг.



Высокая производительность достигается при равномерном распределении пленки по фильтровальной поверхности. После удаления основной массы жидкой фазы твердые частицы совершают сложное движение по спиральным траекториям, вращаются с высокой скоростью вокруг своей оси, периодически контактируют с фильтровальной поверхностью.

Выполненные исследования позволили определить оптимальные конструктивные характеристики: угол  $35^\circ$  для наклона лопастей завихрителя, площадь отверстий сетки 15–27%, длина проницаемого элемента  $L/D = 6-7$ .

Способ подачи суспензии в аппарат не влияет на конечную влажность. Лишь подача суспензии в область перед завихрителем незначительно, на 0,04%, уменьшает влажность, но при этом намного увеличивается гидравлическое сопротивление аппарата. Подача суспензии в центр несколько увеличивает влажность по сравнению с подачей пленкой. Но данный способ позволяет более равномерно орошать поверхность на начальном участке и получить более высокую производительность.

Гидродинамика процесса разделения в значительной степени зависит от конструкции завихрителя и скорости газового потока.

Исследование зависимости влажности твердого продукта от среднерасходной скорости газа

показало, что оптимальной является скорость 18–20 м/с.

Размеры частиц твердой фазы в значительной степени определяют конечную влажность. При гидродинамических способах удаления поверхностной влаги (ударе о сетку, продувке воздухом) на поверхности частиц всегда остается некоторое количество жидкости, зависящее от свойств смачиваемости твердого материала.

Удаление влаги с поверхности твердых частиц на заключительном этапе процесса разделения суспензии в газоцентрических элементах происходит при воздействии многих факторов: обдува частиц потоком газа, центробежных сил, возникающих при вращении частицы, контакте частицы с поверхностью. Данные факторы взаимно связаны между собой и позволяют достичь глубокого обезвоживания твердой фазы.

Исследования выявили, что глубокое обезвоживание твердого продукта достигается при фильтровании жидкости на небольшом начальном участке фильтра, при эффективном осаждении жидких частиц на стенку элемента, при активном взаимодействии газового потока и движущихся твердых частиц. Основное влияние при этом оказывает расход суспензии. Для увеличения производительности твердой фазы необходимо предварительное сгущение суспензии.

### Список литературы

1. Гельперин Н. И. Основные процессы и аппараты химической технологии: в 2 кн. М.: Химия, 1981. Кн. 1. 384 с. (Серия «Процессы и аппараты химической и нефтехимической технологии»).
2. Фортъе А. Механика суспензий. М.: Мир, 1971. 264 с.
3. Переработка природных солей и рассолов: справочник / И. Д. Соколов [и др.]. Л.: Химия, 1985. 208 с.
4. Кутепов А. М., Полянин А. Д. Химическая гидродинамика. М.: Квантум, 1996. 336 с.
5. Соколов В. И. Центрифугирование. М.: Химия, 1976. 407 с.
6. Медников Е. М. Турбулентный перенос и осаждение аэрозолей. М.: Наука, 1981. 176 с.
7. Шрайбер А. А., Милютин В. Н., Яценко В. П. Гидродинамика двухкомпонентных потоков с твердым полидисперсным веществом. Киев: Наук. думка, 1980. 249 с.
8. Бемфорд А. В. Промышленная кристаллизация. М.: Химия, 1968. 326 с.
9. Найдено В. В. Применение математических методов и ЭВМ для оптимизации и управления процессами разделения суспензий в гидроциклонах. Горький: Волго-Вятское кн. изд-во, 1976. 287 с.
10. Гупта А. Закрученные потоки. М.: Мир, 1988. 588 с.
11. Поваров А. И. Гидроциклоны на обогатительных фабриках. М.: Недра, 1978. 266 с.
12. Троянкин Ю. В., Балувев Е. Д. Аэродинамическое сопротивление и совершенство циклонной камеры // Теплоэнергетика. 1969. № 6. С. 29–32.
13. Шкоропад Д. Е., Новиков О. П. Центрифуги и сепараторы для химических производств. М.: Химия, 1987. 256 с.
14. Жужиков В. А. Фильтрация. Теория и практика разделения суспензий. М.: Химия, 1980. 400 с.
15. Левданский Э. И., Левданский А. Э. Высокоэффективные проточные процессы и аппараты. Минск: БГТУ, 2001. 234 с.
16. Левданский Э. И., Волк А. М. Сгущение крупнодисперсных суспензий газовым потоком в перфорированном канале. М., 1987. 15 с. Деп. в ЦИНТИхимнефтемаш, № 1702.

## References

1. Gel'perin N. I. *Osnovnyye protsessy i apparaty khimicheskoy tekhnologii: v 2 knigakh* [The main processes and apparatuses of chemical technology: in 2 books]. Moscow, Khimiya Publ., 1981. Book 1. 384 p. (Series "Processes and Apparatuses of Chemical and Petrochemical Technology") (In Russian).
2. Fortier A. *Mekhanika suspenziy* [Mechanics of Suspensions]. Moscow, Mir Publ., 1971. 264 p. (In Russian).
3. Sokolov I. D., Muravyev A. V., Safirygin Yu. S., Seballo V. A. *Pererabotka prirodnykh soley i rassolov: spravochnik* [Processing of natural salts and brines: Reference book]. Leningrad, Khimiya Publ., 1985. 208 p. (In Russian).
4. Kutepov A. M., Polyenin A. D. *Khimicheskaya gidrodinamika* [Chemical hydrodynamics]. Moscow, Quantum Publ., 1996. 336 p. (In Russian).
5. Sokolov V. I. *Tsentrifugirovaniye* [Centrifugation]. Moscow, Khimiya Publ., 1976. 407 p. (In Russian).
6. Mednikov E. M. *Turbulentnyy perenos i osazhdeniye aerorozley* [Turbulent transport and deposition of aerosols]. Moscow, Nauka Publ., 1981. 176 p. (In Russian).
7. Shrayber A. A., Milyutin V. N., Yatsenko V. P. *Gidrodinamika dvukhkomponentnykh potokov s tverdym polidispersnym veshchestvom* [Hydrodynamics of two-component flows with solid polydisperse matter]. Kiev, Naukova Dumka Publ., 1980. 249 p. (In Russian).
8. Bamford A. W. *Promyshlennaya kristallizatsiya* [Industrial crystallization]. Moscow, Khimiya Publ., 1968. 326 p. (In Russian).
9. Naidenko V. V. *Primeneniye matematicheskikh metodov i EVM dlya optimizatsii i upravleniya protsessami razdeleniya suspenziy v gidrotsiklonah* [Application of mathematical methods and computers for optimisation and control of suspension separation processes in hydrocyclones]. Gorky, Volgo-Vyatskoye knizhnoye izdatel'stvo Publ., 1976. 287 p. (In Russian).
10. Gupta A., Lilly D., Sayred N. *Zakruchennyye potoki* [Swirling Flows]. Moscow, Mir Publ., 1988. 588 p. (In Russian).
11. Povarov A. I. *Gidrotsiklony na obogatitel'nykh fabrikakh* [Hydrocyclones at enrichment plants]. Moscow, Nedra Publ., 1978. 266 p. (In Russian).
12. Troyankin Yu. V., Baluev E. D. Aerodynamic resistance and perfection of a cyclone chamber. *Teploenergetika* [Teploenergetika], 1969, no. 6, pp. 29–32. (In Russian).
13. Shkoropad D. E., Novikov O. P. *Tsentrifugi i separatory dlya khimicheskikh proizvodstv* [Centrifuges and separators for chemical production]. Moscow, Khimiya Publ., 1987. 256 p. (In Russian).
14. Zhuzhikov V. A. *Fil'trovaniye. Teoriya i praktika razdeleniya suspenziy* [Filtration. Theory and practice of suspension separation]. Moscow, Khimiya Publ., 1980. 400 p. (In Russian).
15. Levdansky E. I., Levdansky A. E. *Vysokoeffektivnyye protochnyye protsessy i apparaty* [Highly efficient flow processes and apparatuses]. Minsk, BGTU Publ., 2001. 234 p. (In Russian).
16. Levdansky E. I., Volk A. M. Thickening of large-dispersed suspensions by gas flow in a perforated channel. Moscow, 1987. 15 p. *Dep. v TsINTIkhimneftemash* [Deposited in Central Institute of Scientific and Technical Information and Technical and Economic Research on Chemical and Petroleum Engineering], no. 1702.

## Информация об авторах

**Волк Анатолий Матвеевич** – кандидат технических наук, доцент, доцент кафедры высшей математики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: volk@belstu.by

**Вилькоцкий Андрей Иванович** – кандидат технических наук, доцент, доцент кафедры процессов и аппаратов химических производств. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: andrzej.wilkocki@belstu.by

**Янович Сергей Владимирович** – старший преподаватель кафедры высшей математики. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: yanovichs@belstu.by

## Information about the authors

**Volk Anatoliy Matveevich** – PhD (Engineering), Associate Professor, Assistant Professor, the Department of Higher Mathematics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: volk@belstu.by

**Wilkocki Andrzej Ivanovich** – PhD (Engineering), Associate Professor, Assistant Professor, the Department of Processes and Apparatus for Chemical Production. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: andrzej.wilkocki@belstu.by

**Yanovich Siarhei Vladimirovich** – Senior Lecturer, the Department of Higher Mathematics. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: yanovichs@belstu.by

Поступила после доработки 16.02.2024

# ФИЗИКА PHISICS

---

УДК 535.37+541.65+543.4

**А. Ю. Шакель, А. Д. Мельник, Н. Н. Крук**

Белорусский государственный технологический университет

## **СПЕКТРАЛЬНО-ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА МОНОДЕПРОТОНИРОВАННЫХ ФОРМ ГИДРОФИЛЬНЫХ КАТИОННЫХ ПОРФИРИНОВ И ИЗУЧЕНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ ИХ J-АГРЕГАТОВ**

В работе методами абсорбционной и флуоресцентной спектроскопии изучены спектрально-люминесцентные характеристики монодепротонированных форм двух изомерных гидрофильных катионных порфиринов: 5,10,15,20-(4-*N*-метилпиридил)-порфирина и 5,10,15,20-(3-*N*-метилпиридил)-порфирина. Показано, спектрально-люминесцентные характеристики двух изомеров существенно различаются, что объяснено различными механизмами электронной коммуникации между макроциклом и заместителями. Для *para*-замещенного производного наблюдаются как мезомерный, так и индуктивный эффекты, приводящие к смещению электронной плотности с молекулярных орбиталей порфирина на заместители, а в случае *meta*-замещенного производного мезомерный эффект отсутствует. Исследована возможность формирования этими соединениями J-агрегатов при увеличении концентрации в растворе. Установлено, что, несмотря на выполнение необходимого требования, заключающегося в биполярном характере распределения заряда в мономере, J-агрегаты не образуются. Предложено, что устойчивость монодепротонированных мономеров исследованных порфиринов к агрегации обусловлена двумя факторами: во-первых, положительный заряд в периферических заместителях делокализован по всему фрагменту, что не позволяет обеспечить точечное кулоновское взаимодействие; во-вторых, протон в ядре макроцикла также делокализован, причем находится в плоскости макроцикла, что увеличивает расстояние между взаимодействующими центрами. В результате сила кулоновских взаимодействий оказывается недостаточной, чтобы обеспечить связывание.

**Ключевые слова:** порфирин, периферическое замещение, депротонирование, флуоресценция, J-агрегат, кулоновские взаимодействия.

**Для цитирования:** Шакель А. Ю., Мельник А. Д., Крук Н. Н. Спектрально-люминесцентные свойства монодепротонированных форм гидрофильных катионных порфиринов и изучение возможности формирования их J-агрегатов // Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика. 2024. № 1 (278). С. 26–31.

DOI: 10.52065/2520-6141-2024-278-4.

**A. Yu. Shakel, A. D. Melnik, M. M. Kruk**

Belarusian State Technological University

## **SPECTRAL-LUMINESCENT PROPERTIES OF MONODEPROTONATED FORMS OF HYDROPHYLIC CATIONIC PORPHYRINS AND STUDY OF THE POSSIBILITY TO FORM THEIR J-AGGREGATES**

In this work, the spectral and luminescent characteristics of monodeprotonated forms of two isomeric hydrophilic cationic porphyrins, 5,10,15,20-(4-*N*-methylpyridyl)-porphyrin and 5,10,15,20-(3-*N*-methylpyridyl)-porphyrin, have been studied. It was shown that the spectral and luminescent characteristics of two isomers differ significantly, and the difference is explained by different mechanisms of electronic communication between the macrocycle and the substituents. For a *para*-substituted derivative, both mesomeric and inductive effects are observed, leading to a shift in electron density from the molecular orbitals of the porphyrin to the substituents, while in the case of a *meta*-substituted derivative, the mesomeric effect is absent. The possibility of the formation of J-aggregates by these compounds with increasing concentration in solution was investigated. It has been established that, despite the fulfillment of the necessary requirement, which consists in the bipolar nature of the charge distribution in the monomer, J-aggregates are not formed. It is proposed that the stability of monodeprotonated monomers of the studied porphyrins against the aggregation is due to two factors: firstly,

the positive charge in the peripheral substituents is delocalized throughout the fragment, which does not allow for point Coulomb interaction; secondly, the proton in the macrocycle core is also delocalized, and is located in the plane of the macrocycle, which increases the distance between interacting centers. As a result, the strength of the Coulomb interactions is insufficient to ensure binding.

**Keywords:** porphyrine, peripheral substitution, deprotonation, fluorescence, J-aggregate, Coulomb interactions.

**For citation:** Shakel A. Yu., Melnik A. D., Kruk M. M. Spectral-luminescent properties of monodeprotonated forms of hydrophilic cationic porphyrins and study of the possibility to form their J-aggregates. *Proceedings of BSTU, issue 3, Physics and Mathematics. Informatics*, 2024, no. 1 (278), pp. 26–31 (In Russian).

DOI: 10.52065/2520-6141-2024-278-4.

**Введение.** Гидрофильные тетрапиррольные молекулы благодаря наличию на периферии макроцикла ионизирующихся заместителей, несущих положительный либо отрицательный заряд, обладают существенно большим потенциалом межмолекулярных взаимодействий по сравнению с их гидрофобными аналогами. Гидрофильным тетрапиррольным молекулам свойственны галохромные явления, заключающиеся во взаимодействии ионизированных периферических заместителей с ионами в растворах (в том числе со своими собственными противоионами) и при взаимодействии с (био)полимерами, что влечет за собой существенные изменения их спектрально-люминесцентных и фотофизических характеристик [1]. Гидрофильные тетрапиррольные соединения при взаимодействии друг с другом при увеличении концентрации и ионной силы раствора способны образовывать сэндвичеобразные димеры Н-типа и упорядоченные линейные J-агрегаты [2–4]. Формированию агрегированных форм способствуют не только кулоновские взаимодействия периферических заместителей, но и гидрофобные взаимодействия самих макроциклов.

J-агрегаты представляют собой упорядоченные супрамолекулярные системы, спектрально-люминесцентные характеристики которых определяются экситонными взаимодействиями, что представляет значительный интерес с точки зрения перспектив их использования для создания новых элементов молекулярной электроники [5–6]. Установлено, что необходимым условием для мономеров тетрапиррольных соединений, обеспечивающим их способность к формированию J-агрегатов в растворе, является их биполярный (цвиттерионный) характер, который необходим для обеспечения кулоновских взаимодействий мономеров при формировании линейной структуры J-агрегата [5–6]. К настоящему времени было предложено обеспечить выполнение этого условия, во-первых, за счет того, что на периферии макроцикла присоединяются ионизирующиеся анионные заместители, и, во-вторых, за счет сообщения макроциклу избыточного положительного заряда путем формирования

дважды протонированной формы при добавлении к раствору кислот. Для мономеров такого строения J-агрегаты образуются благодаря двум парам кулоновских взаимодействий между отрицательно заряженными периферическими заместителями и положительно заряженными ядрами соседних макроциклов (рис. 1, а). J-агрегаты с таким способом взаимодействия мономеров получены также для гидрофильных анионных гетеропорфиринов [7], в которых одно из пиррольных колец заменено на тиофеновое. Такая замена существенно изменяет молекулярную конформацию ядра макроцикла, у гетеропорфирина протонированное ядро макроцикла содержит три протона, а не четыре, как у порфирина, однако это не влияет на способность к образованию J-агрегатов.

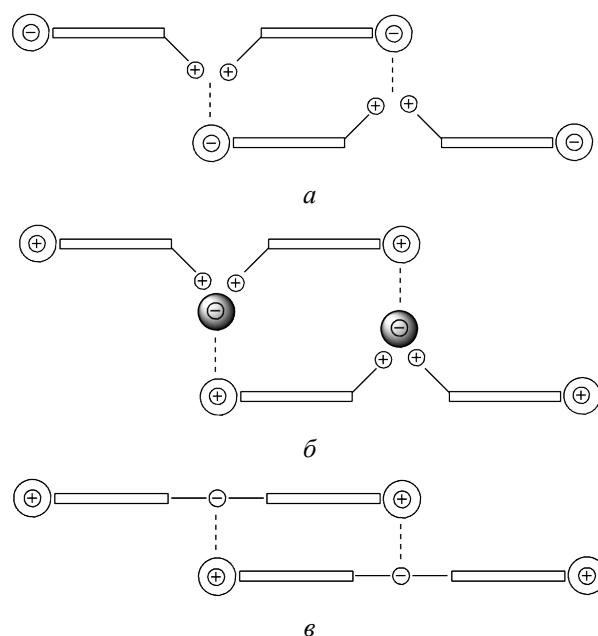


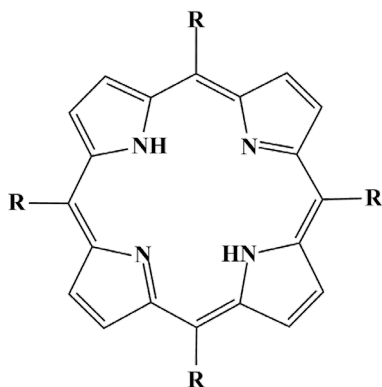
Рис. 1. Схема связывающих кулоновских взаимодействий между двумя соседними мономерами в J-агрегате (см. текст для пояснений)

Другой способ придать мономерам биполярный характер предполагает протонирование периферических заместителей и ядра макроцикла

и последующее комплексообразование анионов в ядре макроцикла (рис. 1, б). Таким способом были получены J-агрегаты 5,10,15,20-тетра-пиридил-порфирина в органических растворителях [8], где в качестве спейсерных анионов использованы галогенид-ионы.

Используя дополнительное комплексообразование анионов в ядре макроцикла, в принципе, возможно получить и J-агрегаты гидрофильных катионных порфиринов. В настоящей работе мы предприняли попытку получить J-агрегаты катионных порфиринов путем формирования биполярного характера мономеров посредством депротонирования ядра макроцикла. В этом случае J-агрегаты могут формироваться благодаря двум парам кулоновских взаимодействий между положительно заряженными периферическими заместителями и отрицательно заряженными ядрами соседних макроциклов (рис. 1, в).

В качестве объектов исследования выбраны изомерные молекулы 5,10,15,20-(4-N-метилпиридил)-порфирина и 5,10,15,20-(3-N-метилпиридил)-порфирина (ниже соответственно обозначенные **1** и **2**), различающиеся положением ионизирующей группы в периферическом заместителе (рис. 2), что позволяет варьировать межцентровое расстояние для связывающих биполярных взаимодействий между двумя соседними мономерами в J-агрегате: соответственно равное 0,88 и 0,75 нм для порфиринов **1** и **2**. Соединения синтезированы по известным методикам [9].

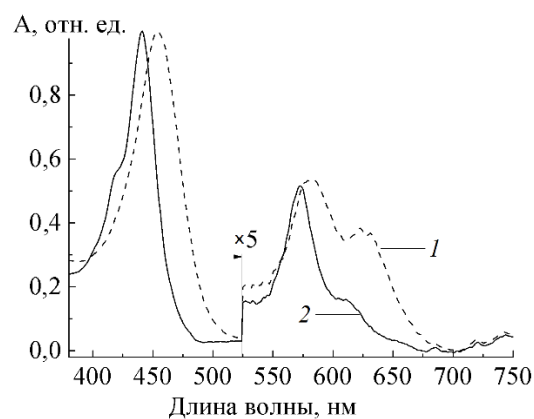


**1** – R = 4-N-метилпиридил  
**2** – R = 3-N-метилпиридил

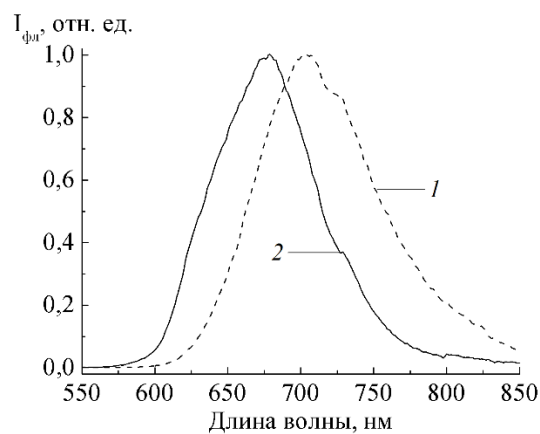
Рис. 2. Молекулярная структура свободных оснований исследованных порфиринов

В работе нами получены депротонированные формы исследованных соединений в щелочных водных растворах, измерены их спектры поглощения и флуоресценции, определены квантовые выходы флуоресценции  $\Phi_{\text{фл}}$ . Изучена возможность получения J-агрегатов при увеличении концентрации порфиринов в растворе.

**Основная часть.** Спектры поглощения и флуоресценции монодепротонированных порфиринов **1** и **2** в растворах приведены на рис. 3. Необходимо отметить, что монодепротонированная форма порфирина **2** получена в настоящей работе впервые, и ее спектрально-люминесцентные характеристики исследовали в сравнении с монодепротонированной формой порфирина **1**, изученной ранее [10]. Сопоставление спектров для двух исследованных соединений показывает, что у порфирина **2** наблюдается гипсохромный сдвиг Q-полос поглощения в видимой и В-полосы в ближней ультрафиолетовой области по сравнению с порфирином **1**.



а



б

Рис. 3. Спектры поглощения (а) и флуоресценции (б) монодепротонированных форм порфиринов **1** и **2**. Длина волны возбуждения флуоресценции 570 нм

Так, например, доминирующая в видимой области вибронная Q(0,1) полоса депротонированной формы порфирина **2** имеет максимум при 572,5 нм, в то время как у порфирина **1** максимум расположен при 582 нм. Величина сдвигов примерно одинакова для всех полос поглощения. Следует указать, что в спектре порфирина **2**

происходит заметное уменьшение относительной интенсивности полос чисто электронного и вибронного переходов  $A(0,0)/A(0,1)$ , которое равно 0,30, в то время как у порфирина **1** оно составляет 0,63. Согласно четырехорбитальной модели Гоутермана [11], величина этого отношения пропорциональна квадрату разности энергий двух одноэлектронных синглетных конфигураций  $A(0,0)/A(0,1) \sim [{}^1E(a_{2u}e_g) - {}^1E(a_{1u}e_g)]^2$ . Это соотношение обычно используется в качестве меры энергетической расстройки верхних заполненных молекулярных орбиталей ВЗМО ( $a_{2u}$ ) и ВЗМО – 1 ( $a_{1u}$ ). Очевидно, что исключение из электронной коммуникации с макроциклом резонансных взаимодействий приводит в порфирине **2** к понижению энергии ВЗМО ( $a_{2u}$ ), которое влечет за собой усиление конфигурационного взаимодействия, приводящего к падению экстинкции полосы длинноволнового электронного перехода.

Спектр флуоресценции монодепротонированной формы порфирина **2** также испытывает гипсохромный сдвиг по сравнению с положением спектра флуоресценции порфирина **1**. При этом форма спектра флуоресценции в обоих случаях остается подобной, очень слабая полоса чисто электронного перехода, которая проявляется в виде плеча на коротковолновом склоне вибронной полосы. Величина квантового выхода флуоресценции монодепротонированной формы порфирина **2**  $\Phi_{\text{фл}} = 0,025$  оказалась заметно меньше по сравнению с порфирином **1** ( $\Phi_{\text{фл}} = 0,038$ ). Причины наблюдаемых различий могут заключаться либо в уменьшении вероятности флуоресценции, либо в увеличении вероятностей безызлучательных каналов дезактивации нижнего синглетного  $S_1$  состояния и будут исследованы дополнительно.

Эксперименты по формированию J-агрегатов монодепротонированных форм порфиринов **1** и **2** при увеличении концентрации растворов оказались безрезультатными. Порфирины находились в растворе в виде мономеров и не обнаружили никакой тенденции к образованию J-агрегированных форм при хранении в течение 400 ч. Одной из причин, которые могут препятствовать связывающим кулоновским взаимодействиям между двумя мономерами, является делокализация отрицательного заряда в макроцикле и его планарная конформация. По сравнению с дважды протонированной формой анионных порфиринов, у которой несущие положительный заряд NH-группы экспонированы в раствор благодаря значительному наклону пиррольных колец относительно средней плоскости макроцикла, это существенно увеличивает расстояние между взаимодействующими центрами, так как из-за кулоновского отталкивания  $\pi$ -электронных облаков взаимодействующих макроциклов

межплоскостное расстояние не может быть меньше, чем 0,34 нм [12, 13].

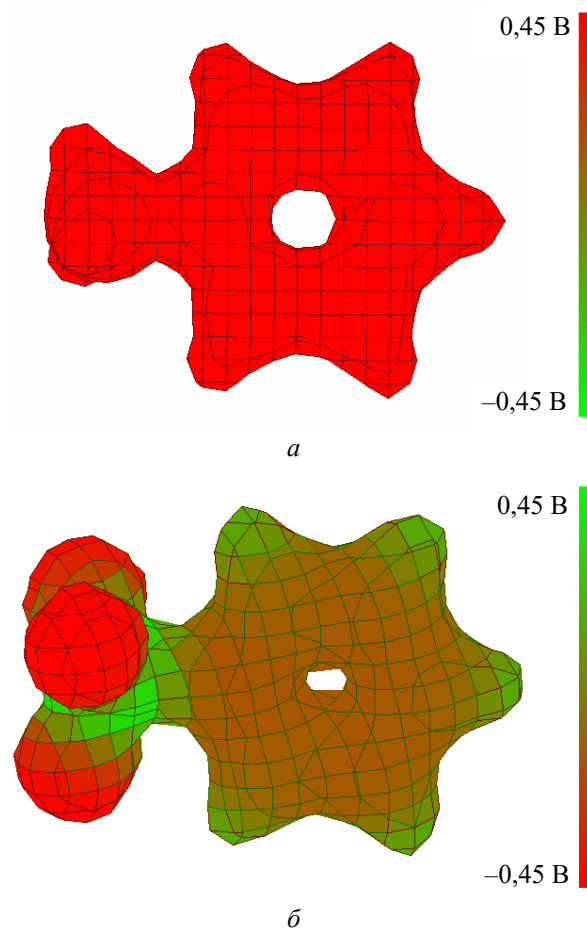


Рис. 4. Контурные графики распределения электростатического потенциала в периферических заместителях: (а) метилпиридил; (б) сульфатофенил

С другой стороны, на константу связывания будет влиять распределение электронной плотности в заместителях. С использованием квантово-химических методов (полуэмпирический метод PM3) нами рассчитано распределение электронной плотности и построены графики электростатического потенциала в метилпиридильном и сульфатофенильном заместителях (рис. 4). Оказалось, что в метилпиридильном заместителе электрический заряд делокализован по пиридиновому кольцу и весь заместитель имеет практически одинаковый положительный потенциал 0,426 В. Этим он разительно отличается от сульфатофенильного фрагмента, в котором сульфогруппа имеет локализованный отрицательный потенциал – 0,403 В, а фенильное кольцо обладает положительным потенциалом. В последнем случае формируется точечный центр для взаимодействия, а в случае метилпиридильного фрагмента такого центра нет.

**Заключение.** Таким образом, в работе изучены спектрально-люминесцентные характеристики монодепротонированных форм изомерных 5,10,15,20-(4-N-метилпиридил)-порфирина и 5,10,15,20-(3-N-метилпиридил)-порфирина и установлены различия в электронной коммуникации между заместителями и макроциклом, которые определяют форму и положение полос в спектрах поглощения и флуоресценции. Обнаружено, что монодепротонированные формы изученных порфиринов не образуют J-агрегатов в растворах при увеличении концентрации, и предложено объяснение причин стабильности

мономеров порфиринов в депротонированной форме.

Работа выполнена при финансовой поддержке Государственной программы научных исследований Республики Беларусь «Конвергенция 2025» (подпрограмма «Междисциплинарные исследования и новые зарождающиеся технологии», задание шифр 3.03.10 (НИР 2)), гранта Министерства образования Республики Беларусь № 20230675 (Мельнику А. Д., Шакелю А. Ю.) и гранта Президента Республики Беларусь в сфере науки на 2023 г. (Круку Н. Н.).

### Список литературы

1. Крук Н. Н. Строение и оптические свойства тетрапиррольных соединений. Минск: БГТУ, 2019. 216 с.
2. On the aggregation of meso-substituted water-soluble porphyrins / R. F. Pasternack [et al.] // *J. Am. Chem. Soc.* 1972. Vol. 94, no. 13. P. 4511–4517.
3. Akins D.L., Zhu H.-R., Guo Ch. Aggregation of tetraaryl-substituted porphyrins an homogeneous solution // *J. Phys. Chem.* 1996. Vol. 100, no. 13. P. 5420–5425.
4. Factors influencing self-aggregation tendencies of cationic porphyrins in aqueous solution / K. Kano [et al.] // *J. Am. Chem. Soc.* 2000. Vol. 122, no. 31. P. 7494–7502.
5. Ohno O., Kaizu Y, Kobayashi H. J-aggregate formation of water-soluble porphyrin in acidic aqueous media // *J. Chem. Phys.* 1993. Vol. 99, no. 5. P. 4128–4139.
6. Koti A. S. R., Taneja J., Periasamy N. Control of coherence length and aggregate size in the J-aggregate of porphyrin // *Chem. Phys. Lett.* 2003. Vol. 375, no. 2. P. 171–176.
7. Формирование J-агрегатов 21-тиа-5,10,15,20-тетра-(4-сульфофенил)-порфирина в водных растворах / А. Д. Мельник [и др.] // *Журн. прикл. спектр.* 2022. Т. 89, № 2. С. 177–183.
8. Role of counteranions in acid-induced aggregation of isomeric tetrapyrrolylporphyrins in organic solvents / G. de Luca [et al.] // *J. Phys. Chem.* 2005. Vol. 109, no. 15. P. 7149–7158.
9. Intramolecular interactions in the ground and excited state of tetrakis(N-methylpyridyl)porphyrins / F. J. Vergeldt [et al.] // *J. Phys. Chem.* 1995. Vol. 99, no. 13. P. 4397–4405.
10. Крук Н. Н. Флуоресцентные свойства и симметрия монодепротонированной формы 5,10,15,20-тетракис-(4-N-метилпиридил)-порфирина // *Журн. прикл. спектр.* 2006. Т. 73, № 5. С. 613–619.
11. Gouterman M., Wagniere G., Snyder L. R. Spectra of porphyrins. Part II. Four orbital model // *Journal of Molecular Spectroscopy.* 1963. Vol. 11, no. 2. P. 108–127.
12. Stone A., Fleischer E. B. The molecular and crystal structure of porphyrin diacids // *J. Am. Chem. Soc.* 1968. Vol. 90, no. 11. P. 2735–2748.
13. Hunter C. A., Sanders J. K. M. The nature of  $\pi$ - $\pi$  interactions // *J. Am. Chem. Soc.* 1990. Vol. 112, no. 14. P. 5525–5534.

### References

1. 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).
2. Pasternack R. F., Huber P. R., Boyd P., Engasser G., Francesconi L., Gibbs E., Fasella P., Cerio Ventura G., de Hinds L.C. On the aggregation of meso-substituted water-soluble porphyrins. *J. Am. Chem. Soc.*, 1972, vol. 94, no. 13, pp. 4511–4517.
3. Akins D. L., Zhu H.-R., Guo Ch. Aggregation of tetraaryl-substituted porphyrins an homogeneous solution. *J. Phys. Chem.*, 1996, vol. 100, no. 13, pp. 5420–5425.
4. Kano K., Fukuda K., Wakami H., Nishiyaby R., Pasternack R. F. Factors influencing self-aggregation tendencies of cationic porphyrins in aqueous solution. *J. Am. Chem. Soc.*, 2000, vol. 122, no. 31, pp. 7494–7502.
5. Ohno O., Kaizu Y, Kobayashi H. J-aggregate formation of water-soluble porphyrin in acidic aqueous media. *J. Chem. Phys.*, 1993, vol. 99, no. 5, pp. 4128–4139.
6. Koti A. S. R., Taneja J., Periasamy N. Control of coherence length and aggregate size in the J-aggregate of porphyrin. *Chem. Phys. Lett.*, 2003, vol. 375, no. 2, pp. 171–176.

7. Melnik A. D., Zhebit T. S., Pukhovskaya S. G., Ivanova Yu. B., Kruk M. M. Formation of J-aggregates of the 21-thia-5,10,15,20-tetra-(4-sulfonatophenyl)-porphyrin in water solutions. *Journ. Appl. Spectr.*, 2022, vol. 89, no. 2, pp. 232–237.

8. De Luca, Romeo A., Scolaro L. M. Role of coneranions in acid-induced aggregation of isomeric tetrapyridylporphyrins in organic solvents. *J. Phys. Chem.*, 2005, vol. 109, no. 15, pp. 7149–7158.

9. Vergeldt F. J., Koehorst R. B. M., van Hoek A., Schaafsma T. J. Intramolecular interactions in the ground and excited state of tetrakis(N-methylpyridyl)porphyrins. *J. Phys. Chem.*, 1995, vol. 99, no. 13, pp. 4397–4405.

10. Kruk N. N. Fluorescent properties and symmetry of the monodeprotonated form of 5,10,15,20-tetrakis-(4-N-methylpyridyl)-porphyrin. *Journ. Appl. Spectr.*, 2006, vol. 73, no. 5, pp. 686–693.

11. Gouterman M., Wagniere G., Snyder L. R. Spectra of porphyrins. Part II. Four orbital model. *Journal of Molecular Spectroscopy*, 1963, vol. 11, no. 2, pp. 108–127.

12. Stone A., Fleischer E. B. The molecular and crystal structure of porphyrin diacids. *J. Am. Chem. Soc.*, 1968, vol. 90, no. 11, pp. 2735–2748.

13. Hunter C. A., Sanders J. K. M. The nature of  $\pi$ - $\pi$  interactions. *J. Am. Chem. Soc.*, 1990, vol. 112, no. 14, pp. 5525–5534.

### Информация об авторах

**Шакель Антон Юрьевич** – студент. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: a.shakel@mail.ru

**Мельник Алексей Дмитриевич** – студент. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: alex.mel.am99@gmail.com

**Крук Николай Николаевич** – доктор физико-математических наук, профессор, 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

**Shakel Anton Yur'evich** – student. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: a.shakel@mail.ru

**Melnik Aliaksei Dzmitrievich** – student. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: alex.mel.am99@gmail.com

**Kruk Mikalai Mikalaeovich** – DSc (Physics and Mathematics), 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 20.11.2023



УДК: 547.455:535.33/34:539.194

**В. М. Андрианов, М. В. Королевич, А. А. Шевченко**  
Белорусский государственный аграрный технический университет

**ПОЛНЫЙ РАСЧЕТ КОЛЕБАТЕЛЬНОГО СПЕКТРА  
МОЛЕКУЛЫ 28-ГОМОКАСТАСТЕРОНА (RR - КОНФИГУРАЦИЯ)  
В ВОЗМОЖНЫХ КОНФОРМАЦИЯХ**

В рамках оригинального комбинированного подхода, сочетающего классический анализ нормальных колебаний методом молекулярной механики с квантово-химической оценкой абсолютных интенсивностей, проведен согласованный расчет частот и интенсивностей нормальных колебаний одного из представителей стероидных фитогормонов, обладающего биологической активностью, – молекулы 28-гомокастастерона. На основе сопоставления экспериментальной и теоретической спектральных кривых поглощения дана интерпретация полос поглощения ИК спектров и изучено влияние структурных различий в пределах боковой цепи конформеров этой молекулы на формирование ИК спектра в области 1500–950 см<sup>-1</sup>.

**Ключевые слова:** ИК спектроскопия, анализ нормальных колебаний, абсолютные ИК интенсивности, характеристические частоты, интерпретация ИК спектра, брассиностероиды.

**Для цитирования:** Андрианов В. М., Королевич М. В., Шевченко А. А. Полный расчет колебательного спектра молекулы 28-гомокастастерона (RR-конфигурация) в возможных конформациях // Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика. 2024. № 1 (278). С. 32–38. DOI: 10.52065/2520-6141-2024-278-5.

**V. M. Andrianov, M. V. Korolevich, A. A. Shevchenok**  
Belarusian State Agrarian Technical University

**COMPLETE CALCULATION OF THE VIBRATIONAL SPECTRUM  
OF THE 28-HOMOCASTASTERONE MOLECULE (RR-CONFIGURATION)  
IN POSSIBLE CONFORMATIONS**

Within the framework of the original combined approach, combining the classical analysis of normal vibrations by the method of molecular mechanics with a quantum-chemical estimation of absolute intensities, a consistent calculation of the frequencies and intensities of normal vibrations of one of the representatives of steroidal phytohormones with biological activity, the 28-homocastasterone molecule, was carried out. Based on a comparison of the experimental and theoretical spectral absorption curves, an interpretation of the absorption bands of the IR spectra is given and the influence of structural differences within the side chain of the conformers of this molecule on the formation of the IR spectrum in the region of 1500 – 950 cm<sup>-1</sup> is studied.

**Keywords:** IR spectroscopy, normal coordinate analysis, absolute IR intensities, characteristic frequencies, interpretation of the IR spectrum, brassinosteroids.

**For citation:** Andrianov V. M., Korolevich M. V., Shevchenok A. A. Complete calculation of the vibrational spectrum of the 28-homocastasterone molecule (RR-configuration) in possible conformations. *Proceedings of BSTU, issue 3, Physics and Mathematics. Informatics*, 2024, no. 1 (278), pp. 32–38 (In Russian). DOI: 10.52065/2520-6141-2024-278-5.

**Введение.** Брассиностероиды (БС) представляют собой уникальный класс растительных гормонов, структурно родственных стероидным гормонам животных и насекомых. Они являются регуляторами роста растений, влияют на активность системы путей метаболизма, способствуют регулированию деления клетки, стимулируют вегетативный рост и прорастание семян, взаимодействуют на эндогенном уровне с другими гормонами, регулируют экспрессию генов и обладают антистрессовой активностью [1]. Важнейшими представителями этого класса соединений являются брассинолиды и кастастероны. Для брассинолида характерно наличие в стероидном скелете семичленного

цикла, в который входит карбонильная группа С=О и эфирная С–О–С связь, в то время как для кастастерона – шестичленного цикла с карбонильной группой.

Изучение взаимосвязи структура – активность брассиностероидов выявило ряд специфических структурных характеристик, необходимых для их высокой биологической активности. Это – наличие смежных гидроксильных групп в цикле А у С<sub>2α</sub> и С<sub>3α</sub>, транс-сочленение циклов А/В, присутствие 6-кето- или 7-окса-6-кето-группы в цикле В, существование диольной системы в положениях 22 и 23 с конфигурацией RR или SS и наличие метильной или этильной

группы в положении 24 боковой цепи [2]. Для выявления механизмов проявления высокой биологической активности и объяснения ее взаимосвязи со структурными особенностями брасиностероидов в ряде работ [3–6] в качестве предположения рассматривается роль молекулярных орбиталей в селективной активности этих соединений. Показана важная роль атомов кислорода, в частности, и боковой цепи, в их биологической активности и, следовательно, их пространственной ориентации. Высокая биологическая активность связана с 22R, 23R-диольной структурой в стероидной боковой цепи. Синтетические аналоги с 22S, 23S-гидроксилами намного менее активны [7]. В то же время в природной 22R, 23R-конфигурации БС соединения с 24S-метил- или этилгруппой показывают большую биоактивность, чем соответствующие гормоны с 24R-алкил функцией [2], отражая значимость стереохимии также и у этого асимметрического центра. В связи с этим актуален вопрос о связи биоактивности БС со структурой и конформационным поведением в растворе их боковой цепи.

ИК спектроскопия обладает высокой информативностью о структуре молекул и может быть успешно использована для установления корреляций между биологическими свойствами и особенностями ИК спектров этих молекул.

Для детальной интерпретации экспериментально регистрируемых ИК спектров и установления достаточно надежных структурных корреляций молекул класса брасиностероидов необходимо проведение теоретических исследований.

Цель работы – установление структурных аспектов биологической активности БС на основе молекулярного моделирования, моделирования инфракрасных спектров и их сопоставления с экспериментом для анализа, предсказания и направленной модификации структуры этих соединений при разработке новых препаратов медицинского и сельскохозяйственного назначения.

**Основная часть.** Для решения поставленной задачи применен оригинальный комбини-

рованный подход к анализу ИК спектров сложных органических соединений, разработанный и реализованный в виде комплекса программ при исследовании спектров углеводов [8, 9]. Он сочетает классический анализ нормальных колебаний многоатомных молекул с квантово-химической оценкой абсолютных интенсивностей, соответствующих интегральным интенсивностям ИК полос поглощения [8].

Расчет частот, форм, распределения потенциальной энергии (РПЭ) нормальных колебаний, смещений атомов в декартовых координатах в каждом нормальном колебании для расчета абсолютных интенсивностей ИК полос поглощения проведен в рамках метода молекулярной механики (ММ).

Теоретическая спектральная кривая оптической плотности в расчете на один моль вещества и единицу оптического пути моделировалась как сумма полос гауссовой формы по теоретически рассчитанным абсолютным интенсивностям и заданным полуширинам, которые оцениваются на основании экспериментального спектра [8]. Полуширины полос полагались равными  $15 \text{ см}^{-1}$ , некоторые из них принимали значения от 8 до  $20 \text{ см}^{-1}$ .

Интерпретация наблюдаемого ИК спектра выполнена на основе сопоставления экспериментальных значений частот  $\nu_{\text{эксп}}$  и интегральных интенсивностей полос поглощения с рассчитанными частотами  $\nu_{\text{расч}}$  и абсолютными интенсивностями нормальных колебаний. Анализируемый ИК спектр регистрировался ИК-фурье-спектрометром NEXUS и представлен на рис. 1. Синтезированное вещество растиралось с обезвоженным мелкодисперсным KBr, приготовленный порошок прессовался в вакууме по стандартной методике.

Ранее нами были проведены полные расчеты колебательных спектров и моделирование спектральных кривых оптической плотности ряда биологически активных молекул брасинолидов, относящихся к классу фитогормональных стероидов (ФС) [10, 11].

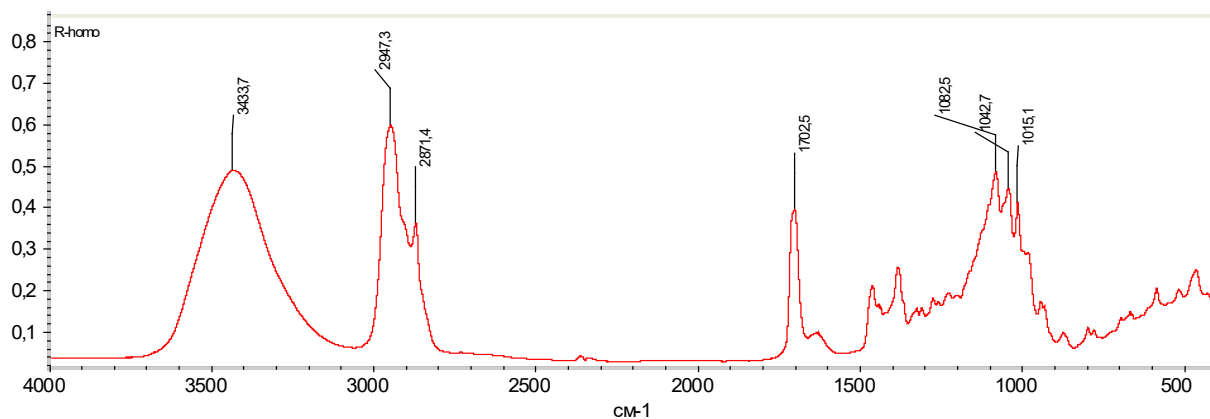


Рис. 1. ИК-фурье спектры поглощения 28-гомокастастерона (RR-конфигурация)

Цель данной работы заключалась в детальной интерпретации ИК спектра биологически активной молекулы 28-гомокастастерона на основе полного расчета частот и интенсивностей нормальных колебаний этой молекулы в возможных конформациях боковой цепи и моделирования спектральной кривой оптической плотности.

Для получения структурных параметров и декартовых координат атомов молекулы 28-гомокастастерона использован современный пакет программ для молекулярного моделирования "HyperChem 7.5". Конформационный анализ боковой цепи проведен методом ММ, а оптимизация геометрии каждого конформера – квантово-химическим методом РМ3. В качестве исходных параметров использованы данные РСА о кристаллической и молекулярной структуре молекулы 24-эпибрассинолида [12]. В результате проведенного конформационного анализа получено 20 конформеров боковой цепи молекулы 28-гомокастастерона, два из которых по энергетическому критерию, как показано в табл. 1, могут реализоваться в растворе.

На основе полученных данных нами построены молекулярные структуры gcR1 и gcR2, схематическое изображение которых представлено на рис. 2, и определены декартовы координаты атомов этих конформеров исследуемой молекулы (энергетический зазор между ними составляет 0,267 ккал/моль) для проведения расчета их колебательных спектров.

Таблица 1  
Конформации боковой цепи и относительные энергии напряжения конформеров  $\Delta U$  (ккал/моль), полученные методом ММ и оптимизированные методом РМ3 исследуемой молекулы

Молекула	Конформеры	$\Delta U$	Конформация боковой цепи
(22R, 23R)-28-гомокастастерон	gcR1	0	$g^+g_1^-g_2^+g_1^+g_2^-g_1^-g^+$
	gcR2	0.287	$g^+t g^+t t g^-g_1^-g^+$
	gcR3	1.420	$g^+g_1^+g_1^-g^-t g^-g_1^-g_2^+$

*Примечание.* В графе «Конформация боковой цепи» буквами  $g^+$   $g^-$   $t$  обозначены гош+, гош- и транс-конформации, соответственно, вокруг последовательности связей С-С боковой цепи: C17-C20, C20-C22, C22-C23, C23-C24, C24-C25 и C24-C28.

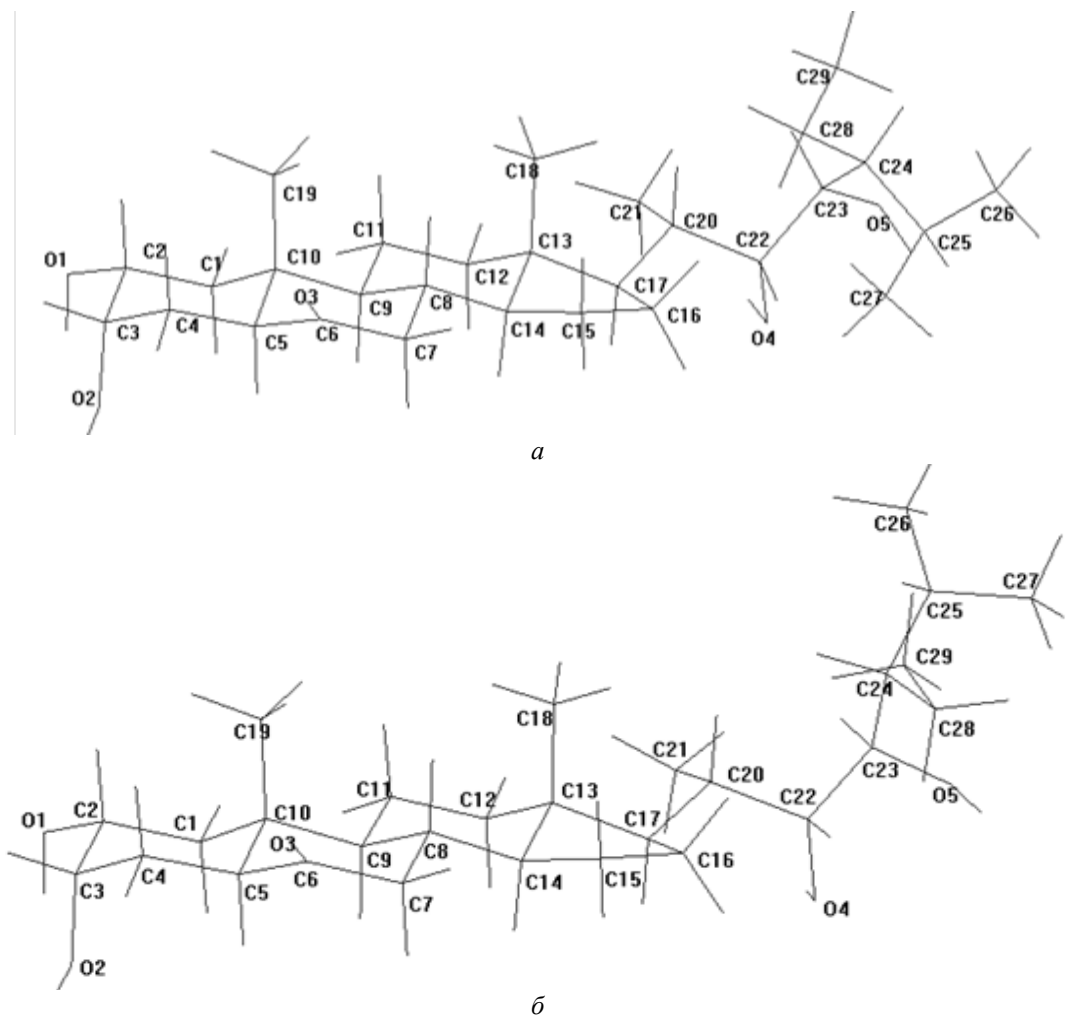


Рис. 2. Молекулярная структура конформеров gcR1 (а) и gcR2 (б) 28-гомокастастерона

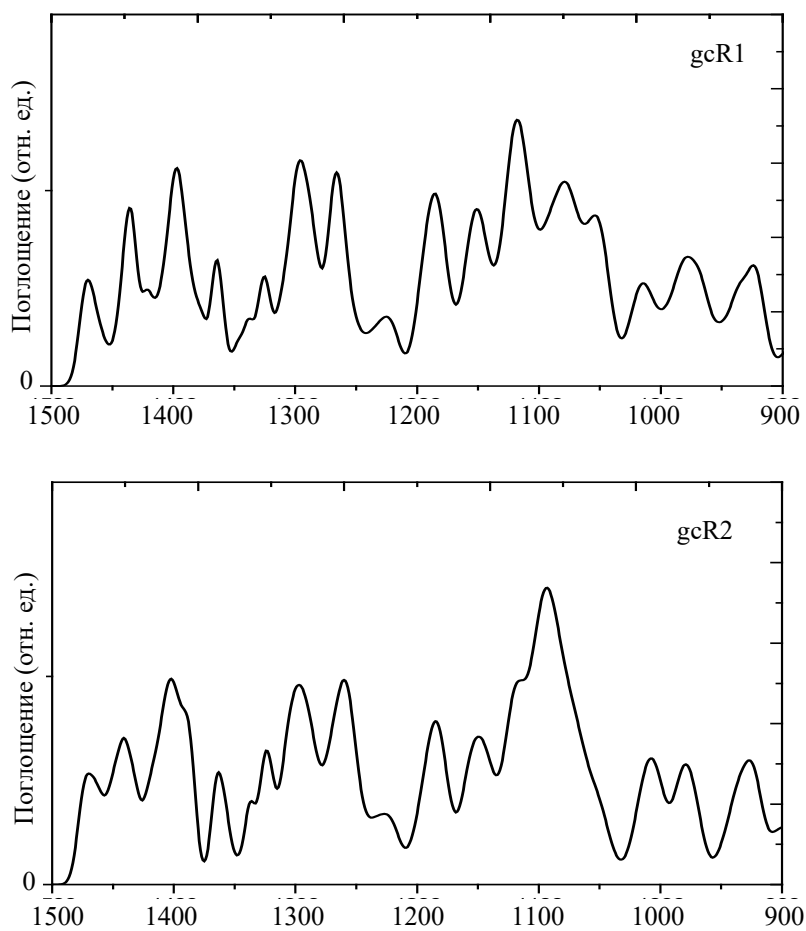


Рис. 3. Теоретические ИК спектры поглощения конформеров gcR1 и gcR2 28-гомокастестерона в диапазоне частот 1550–900  $\text{см}^{-1}$

Расчет частот и интенсивностей нормальных колебаний исследуемой молекулы в двух конформациях боковой цепи выполнен в рамках оригинального комбинированного подхода, сочетающего классический анализ нормальных колебаний методом молекулярной механики с квантово-химической оценкой интенсивностей методом CNDO/2. По этим данным смоделированы спектральные кривые оптической плотности исследуемой молекулы, представленные на рис. 3

Теоретический спектр удовлетворительно описывает основные, наиболее интенсивные характеристические полосы поглощения экспериментального спектра 28-гомокастестерона в спектральном диапазоне 1500–900  $\text{см}^{-1}$ .

Отнесение экспериментальных полос и интерпретация наблюдаемого ИК спектра этой молекулы выполнены на основе сопоставления наблюдаемых частот  $\nu_{\text{эксп}}$  с частотами нормальных колебаний  $\nu_{\text{рас}}$  и интегральных интенсивностей наблюдаемых полос поглощения с рассчитанными абсолютными интенсивностями. В табл. 2 дана интерпретация наиболее интенсивных характеристических полос поглощения ИК спектра исследуемой молекулы в области 1500–900  $\text{см}^{-1}$ .

Сопоставительный анализ результатов расчета колебательных спектров двух конформеров молекулы 28-гомокастестерона в рассматриваемом диапазоне частот 1500–900  $\text{см}^{-1}$  показал, что различия конформации боковой цепи приводят к изменениям формы колебания в ряде нормальных колебаний с близкими или совпадающими частотами, следствием чего является изменение интенсивностей соответствующих полос поглощения.

Расчет показал, что различия конформации боковой цепи приводят к изменениям формы ряда нормальных колебаний с близкими или совпадающими частотами, следствием чего является изменение интенсивностей соответствующих полос поглощения. Поскольку каждая полоса экспериментального спектра имеет сложное происхождение и представляет собой наложение полос разной интенсивности (в теоретическом спектре – сумма полос гауссовой формы по теоретически рассчитанным абсолютным интенсивностям и полуширинам, заданным от 8 до 20  $\text{см}^{-1}$ ), то перераспределение интенсивностей составляющих полос при переходе от одного конформера к другому приводит к изменению интенсивности суммарных полос поглощения.

Таблица 2

Экспериментальные (ИК) характеристические ( $\nu_{\text{экс}}$ ) и рассчитанные ( $\nu_{\text{рас}}$ ) частоты ( $\text{см}^{-1}$ ), абсолютные интенсивности  $A$  ( $10^{16} \cdot \text{см}^2 \cdot \text{моль}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$ ) и РПЭ (%) нормальных колебаний двух конформеров (gcR1 (I), gcR2 (II)) молекулы 28-гомокастестерона в спектральной области 1500–900  $\text{см}^{-1}$

$\nu_{\text{экс}}$	$\nu_{\text{рас}}$ I	$\nu_{\text{рас}}$ II	A I	A II	РПЭ	
					I	II
1463	1479	1475	6	2	HC21H 32 C20C21H 20 CC12H 8 HC12H 6	HC19H 20 CC19H 18 HC4H 10 CC4H 9 C13C18H 7 HC18H 7
	1475	1472	3	15	HC19H 22 C10C19H 20 HC4H 11 C3C4H 10	HC18H 18 C13C18H 16 HC11H 8 CC11H 7 HC4H 5 CC4H 5
	1472	1471	12	1	HC18H 19 CC18H 17 HC11H 12 CC11H 10	HC21H 22 C20C21H 14 HC12H 9 CC12H 8 HC11H 8 CC11H 6
	1465	1465	13	13	HC4H 18 HC19H 18 C10C19H 17 CC4H 16	HC19H 19 HC4H 18 C10C19H 17 CC4H 16
	1459	1459	6	1	HC18H 17 CC18H 15 HC11H 11 CC11H 9	HC18H 16 CC18H 14 HC11H 12 CC11H 10 CC21H 6 HC21H 6
1445	1455	1455	2	1	HC12H 16 CC12H 14 HC1H 12 CC1H 10 HC11H 6	HC12H 17 CC12H 15 HC1H 11 CC1H 9 HC11H 6 CC21H 5
	1453	1453	3	15	HC28H 27 C29C28H 12 CC28H 11 HC29H 8 CC29H 7	HC1H 19 CC1H 16 HC12H 9 CC12H 8 CC11H 6 HC11H 6
	1453	1449	2	12	HC1H 17 CC1H 14 HC12H 9 HC11H 7 CC12H 7	HC28H 25 C29C28H 11 CC28H 9 C28C29H 9 HC29H 9 CC27H 7
1438	1438	1445	8	10	HC27H 20 CC27H 18 HC26H 11 CC26H 10 HC29H 12	HC27H 24 CC27H 22 HC29H 19 HC28H 8 CC28H 6 CC29H 6
	1437	1438	6	1	HC19H 35 CC19H 9 HC18H 6 HC4H 5	H1C26H2 39 C25C26H 36
	1435	1437	4	5	HC26H 26 CC26H 24 HC27H 11 CC27H 10	HC19H 36 CC19H 10 HC18H 8 HC4H 5
	1433	1433	0	12	HC18H 26 HC15H 12 CC15H 12 HC19H 5 CC18H 5	HC18H 26 HC15H 13 CC15H 12 HC19H 6 CC14H 5 CC18H 5
1385	1403	1401	5	7	HC19H 46 CC19H 13	HC27H 15 CC14H 8 CC23H 6 C22O4H 5 C25C24H 5 C23O5H 4
	1400	1400	3	3	HC26H 18 CC14H 15 HC27H 7	CC14H 18 HC27H 5 HC15H 4 HC16H 4
	1399	1497	6	15	CC14H 15 H1C26H2 14 HC27H 6	CC1H 18 C2O1H 14 CC11H 8 CC2H 5
	1394	1495	18	33	CC24H 10 HC26H 10 HC27H 8 CC20H 7 CO4H 6	HC26H 25 C22O4H 10 HC27H 8 CC26H 5 C23O5H 4
	1391	1391	3	1	HC27H 20 CC11H 6 C22O4H 5 C25C27H 5	HC27H 38 HC26H 18 CC27H 7 HC29H 7
	1387	1387	6	3	CC11H 15 CC12H 8 CC1H 6	CC11H 17 CC12H 9 CC9H 6 HC21H 6 HC29H 5
	1387	1387	1	2	HC29H 35 CC29H 6 CC24H 6 CC28H 5	CC29H 26 CC28H 8 CC11H 7
	1379	1379	2	2	CC20H 7 CC22H 7 CC25H 7 CC24H 6 HC27H 5	HC21H 29 CC11H 6 C20C21H 6
	1375	1375	3	1	HC21H 28 CC1H 6 CC11H 6 CC21H 5	CC25H 13 CC28H 13 HC29H 9 HC27H 7 CC24H 5 CC29H 5
1326	1332	1331	2	5	CC25H 12 CC23H 9 CC28H 9 C23O5H 5	CC4H1 21 CC1H 12 C4C5H 12 CC3H 8 CC7H 7
	1331	1330	6	1	CC4H21 CC5H 13 CC1H 12 CC3H 9 CC7H 7	CC23H 13 CC20H 7 CC25H 7 CC22H 6
	1327	1327	3	5	CC7H 12 CC12H 12 CC11H 8	CC12H 11 CC7H 9 CC11H 8
	1319	1321	1	2	CC5H 10 CC2H 7 CC3H 5 CC8H 5 CC12H 5	CC5H 10 O1C2H 5 CC3H 5 CC2H 5 CC8H 5 CC12H 5
1311	1314	1318	2	11	CC23H 10 CC28H 9 CC20H 6 CC25H 6 CC16H 5	CC20H 8 CC7H 6 CC24H 6 C22C23H 5 O5C23H 5 CC25H 5
	1313	1311	3	14	CC7H 9 CC14H 6 CC15H 6 CC17H 5 CC20H 5	CC7H 9 CC14H 7 CC15H 7 CC16H 7 CC23H 5
	1304	1303	2	8	CC16H 12 CC20H 10 CC15H 8 CC17H 5 CC22H 5	CC2H 10 CC9H 7 CC11H 7 CC12H 7
1083	1096	1094	11	16	CC7H 12 CC16H 10 CC12H 6	CC4H 9 CC16H 9 CC1H 5 CCC 5
	1092	1090	3	1	CC7H 8 CC15H 5	CC7H 10 CC16H 8 CC15H 5
	1088	1086	3	1	CC12H 13 CCC 12 CC16H 5	CC12H 14 CCC 8 CC4H 6 CC15H 5 CC16H 5
	1080	1084	5	2	CC4H 9 CC12H 8 CC1H 7 CCC 6 C2O1H 5	CC 8 CCC 8 CC26H 7 CC29H 6 CC23H 6 CC28H 5 CC27H 5
	078	1076	27	8	CC4H 17 CCC 7 CC1H 6 CC2H 5	CC4H 16 CCC 8 CC1H 6
1043	1053	1057	8	3	CC15H 14 CC16H 5 CCC 5	CCC 9 CC16H 6 CC21H 5 CC18H 5 CC15H 5
	1048	1048	0	8	CC15H 26 CC16H 5 CCC 5	CC15H 18 CC27H 8 CC26H 7 CCC 5
	1047	1047	4	1	CC27H 9 CCC 9 CC26H 8 CC21H 5	CC15H 18 CC27H 7 CC26H 7 CCC 5
	1023	1025	0	1	CC27H 7 CC26H 7 CC29H 7 CC15H 5	CC27H 11 CC26H 10 CC29H 10
1015	1022	1022	0	0	CC15H 7 CC27H 5 CC18H 5 CC26H 5 CC29H 5	CCC 11 CC15H 10 CC18H 7 CC16H 5
	1016	1015	0	1	CC19H 6 CC11H 5 CC29H 5	CC19H 7 CC11H 7 CCC 5
	1013	1004	5	4	CC21H 6 CC29H 5	CC29H 13 CC27H 8 CC21H 7 CCC 7 CC28H 5 CC26H 5

Так, например, из представленных в табл. 2 результатов следует, что интенсивная полоса с максимумом 1463  $\text{см}^{-1}$  в экспериментальном спектре состоит из пяти составляющих полос, основной вклад в которые вносят деформационные колебания метильных (HC18H, HC19H, HC21H, CC18H, CC19H, CC21H) и метиленовых (HC4H, HC12H, HC11H) групп, входящих в

состав шестичленных циклов А и С остова молекулы. Вторая интенсивная полоса этого спектрального диапазона с максимумом 1385  $\text{см}^{-1}$  в экспериментальном спектре, согласно расчету, состоит из девяти составляющих полос, обусловленных главным образом деформационными колебаниями СН всех метильных групп, деформационными колебаниями ССН метиновых групп С14Н

и C17H, расположенных на стыке циклов С и D и цикла D с боковой цепью, а также деформационными колебаниями СОН гидроксильных О1Н и О4Н. Что же касается интенсивных характеристических полос с максимумами 1083, 1043 и 1015 см<sup>-1</sup> в экспериментальном спектре, то, по данным расчета (полосы в теоретическом спектре, представленном на рис. 3, с максимумами 1100, 1060 и 1027 см<sup>-1</sup>), основной вклад в формирование этих полос, вносят деформационные колебания ССН метиленовых и метильных групп, в меньшей степени – деформационные колебания ССС боковой цепи и валентные колебания связей С–С.

**Заключение.** Таким образом, в результате проведенных теоретических исследований смоделирована молекулярная структура 28-гомокастастерона с различными конформациями боковой цепи. Выполнены полный расчет колебательного спектра и моделирование спектральной кривой оптической плотности двух конформеров этой молекулы. На основе сопоставления экспериментального ИК спектра и рассчитанной спектральной кривой поглощения молекулы 28-гомокастастерона впервые дана интерпретация наиболее интенсивных характеристических ИК полос поглощения в области 1500–900 см<sup>-1</sup>.

### Список литературы

1. Sasse J. M. Physiological Actions of Brassinosteroids: An Update // *J. Plant Growth Regul.* 2003. Vol. 22. P. 276–288.
2. Yokota T., Mori K. Molecular structure and biological activity of brassinolide and related brassinosteroids // *In Molecular Structure and Biological Activity of Steroids.* CRC Press, Boca Raton, FL, 1992. P. 317–340.
3. New synthetic brassinosteroids: a 5 $\alpha$ -hydroxy-6-ketone analog with strong plant growth promoting activity / Brosa C. [et al.] // *Tetrahedron.* 1998. Vol. 54. P. 12337–12348.
4. A novel in-silico approach for QSAR studies of anabolic and androgenic activities in the 17 (3-hydroxy-5 $\alpha$ -androstane) steroid family / Y. M. Alvarez-Ginarte [et al.] // *QSAR Comb. Sci.* 2005. Vol. 24. P. 218–226.
5. Quantitative Structure – Activity Relationship of the 4,5 $\alpha$ -Dihydrotestosterone Steroid Family / Y. M. Alvarez-Ginarte [et al.] // *QSAR Comb. Sci.* 2006. Vol. 25. P. 881–894.
6. Validation of performances of some semiempirical Hamiltonians for predicting molecular structure calculation of natural brassinosteroids: Towards understanding their biological activity by electron exchange effects / Morera-Boado C. // *J. Mol. Struct.: THEOCHEM* 2007. Vol. 819. P. 109–120.
7. Synthesis of Brassinosteroids of Varying Acyl Side Chains and Evaluation of Their Brassinolide-like Activity / S. Uesusuki [et al.] // *Biosci Biotechnol Biochem.* 2004. Vol. 68. P. 1097–1105.
8. Королевич М. В. Аналитическая инфракрасная спектроскопия сахаридов: дис. ... д-ра физико-математических наук. Минск: 2009. 333 л.
9. Korolevich M. V., Zhbakov R. G. Theoretical vibrational spectroscopy of saccharides: software, perspectives, results // *Spectroscopy of Biological Molecules: Modern Trends: Proc. 7-th European Conference on the Spectroscopy of Biological Molecules.* Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 1997. P. 569–570.
10. Андрианов В. М., Королевич М. В. Расчет и сравнительный анализ ИК спектров гомобрасинолида и (22S, 23S)-гомобрасинолида // *Журн. прикл. спектр.* 2015. Т. 82, № 4. С. 485–496.
11. Андрианов В. М., Королевич М. В., Вельченко А. А. Расчет и сравнительный анализ ИК спектров гомобрасинолида и (22S,23S)-24-эпибрасинолида // *Журн. прикл. спектр.* 2019. Т. 86. № 6. С. 847–858.
12. Voigt B., Porzel A., Wagner C., Merzweiler K. Private Communication to the Cambridge Structural Database, deposition number CCDC 119112 (2001).

### References

1. Sasse J. M. Physiological Actions of Brassinosteroids: An Update. *J. Plant Growth Regul.* 2003, vol. 22, pp. 276–288.
2. Yokota T., Mori K. Molecular structure and biological activity of brassinolide and related brassinosteroids. *In Molecular Structure and Biological Activity of Steroids.* CRC Press, Boca Raton, FL, 1992, pp. 317–340.
3. Brosa C. [et al.]. New synthetic brassinosteroids: a 5 $\alpha$ -hydroxy-6-ketone analog with strong plant growth promoting activity. *Tetrahedron*, 1998, vol. 54, pp. 12337–12348.
4. Alvarez-Ginarte Y. M. [et al.]. A novel in-silico approach for QSAR studies of anabolic and androgenic activities in the 17 (3-hydroxy-5 $\alpha$ -androstane) steroid family. *QSAR Comb. Sci.*, 2005, vol. 24, pp. 218–226.
5. Alvarez-Ginarte Y. M. [et al.]. Quantitative Structure – Activity Relationship of the 4,5 $\alpha$ -Dihydrotestosterone Steroid Family. *QSAR Comb. Sci.*, 2006, vol. 25, pp. 881–894.
6. Morera-Boado C. Validation of performances of some semiempirical Hamiltonians for predicting molecular structure calculation of natural brassinosteroids: Towards understanding their biological activity by electron exchange effects. *J. Mol. Struct.: THEOCHEM*, 2007, vol. 819, pp. 109–120.

7. Uesusuki S. [et al.]. Synthesis of Brassinosteroids of Varying Acyl Side Chains and Evaluation of Their Brassinolide-like Activity. *Biosci Biotechnol Biochem*, 2004, vol. 68, pp. 1097–1105.

8. Korolevich M. V. *Analiticheskaya infrakrasnaya spektroskopiya sakharidov. Dissertatsiya doktora fiziko-matematicheskikh nauk* [Analytical infrared spectroscopy of saccharides. Dissertation DSc (Physics and Mathematics)]. Minsk, 2009. 333 p. (In Russian).

9. Korolevich M. V., Zhbankov R. G. Theoretical vibrational spectroscopy of saccharides: software, perspectives, results. *Spectroscopy of Biological Molecules: Modern Trends: Proc. 7-th European Conference on the Spectroscopy of Biological Molecules*. Dordrecht, 1997, pp. 569–570.

10. Andrianov V. M., Korolevich M. V. Calculation and comparative analysis of IR spectra of homobrassinolide and (22S,23S)-homobrassinolide. *Zhurnal prikladnoy spektroskopii* [Journal of Applied Spectroscopy], 2015, vol. 82, no. 4, pp. 485–496 (In Russian).

11. Andrianov V. M., Korolevich M. V., Velcheanko A. A. Calculation and comparative analysis of IR spectra of homobrassinolide and (22S, 23S)-24-epibrassinolide. *Zhurnal prikladnoy spektroskopii* [Journal of Applied Spectroscopy], 2019, vol. 86, no. 6, pp. 847–858 (In Russian).

12. Voigt B., Porzel A., Wagner C., Merzweiler K. Private Communication to the Cambridge Structural Database, deposition number CCDC 119112 (2001).

### Информация об авторах

**Андрианов Виктор Михайлович** – доктор физико-математических наук, профессор кафедры электроснабжения и электротехники. Белорусский государственный аграрный технический университет (220023, Минск, пр. Независимости, 99/1, Республика Беларусь). E-mail: v.andrianov71@gmail.com

**Королевич Майя Васильевна** – доктор физико-математических наук, доцент, профессор кафедры естественнонаучных дисциплин. Белорусский государственный аграрный технический университет (220023, Минск, пр. Независимости, 99/1, Республика Беларусь). E-mail: korolevi@dragon.bas-net.by

**Шевченко Александр Аркадьевич** – кандидат технических наук, доцент, доцент кафедры естественнонаучных дисциплин. Белорусский государственный аграрный технический университет (220023, Минск, пр. Независимости, 99/1, Республика Беларусь). E-mail: alexshev56@mail.ru

### Information about the authors

**Andrianov Viktor Mikhailovich** – DSc (Physics and Mathematics), Professor, the Department of Power Supply and Electrical Engineering. Belarusian State Agrarian Technical University (99/1, Nezavisimosti Ave., 220023, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: v.andrianov71@gmail.com

**Korolevich Maya Vasilievna** – DSc (Physics and Mathematics), Associate Professor, Professor, the Department of Natural Sciences. Belarusian State Agrarian Technical University (99/1, Nezavisimosti Ave., 220023, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: korolevi@dragon.bas-net.by

**Shevchenok Aleksander Arkadievich** – PhD (Engineering), Associate Professor, Assistant Professor, the Department of Natural Sciences. Belarusian State Agrarian Technical University (99/1, Nezavisimosti Ave., 220023, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: alexshev56@mail.ru

Поступила 29.08.2023

УДК 543.42+535.34

Л. Л. Гладков<sup>1</sup>, Г. А. Гладкова<sup>2</sup><sup>1</sup>Белорусская государственная академия связи<sup>2</sup>Военная академия Республики Беларусь**РАСЧЕТ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СОСТОЯНИЙ Zn-ХЛОРИНА  
МЕТОДОМ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ**

Методом функционала плотности выполнен расчет геометрической структуры, нормальных колебаний и интенсивностей в ИК-спектре Zn-хлорина. Оптимизация геометрии показала нарушение плоского строения гидрированного пиррольного кольца, один из атомов С<sub>б</sub> которого расположен над плоскостью макроцикла, а другой – под ней. Связь атома цинка с азотом данного кольца на 0,05 Å больше других связей цинк – азот. Пересмотрена интерпретация колебательных и тонкоструктурных электронно-колебательных спектров металлохлоринов.

**Ключевые слова:** металлокомплексы хлорина, расчет нормальных колебаний, метод функционала плотности.

**Для цитирования:** Гладков Л. Л., Гладкова Г. А. Расчет колебательных состояний Zn-хлорина методом функционала плотности // Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика. 2024. № 1 (278). С. 39–42.

DOI: 10.52065/2520-6141-2024-278-6.

L. L. Gladkov<sup>1</sup>, G. A. Gladkova<sup>2</sup><sup>1</sup>Belarusian State Academy of Communications<sup>2</sup>Belarusian Military Academy**DFT CALCULATION OF Zn-CHLORINE VIBRATIONAL STATES**

The geometric structure, normal vibrations and intensities in the IR spectrum of Zn-chlorin were calculated using the density functional method. Geometry optimization showed a violation of the planar structure of the hydrogenated pyrrole ring, one of the C<sub>b</sub> atoms of which is located above the plane of the macrocycle, and the other below it. The bond of the zinc atom to the nitrogen of this ring is 0.05 Å larger than other zinc-nitrogen bonds. The interpretation of vibrational and fine-structure electronic-vibrational spectra of metallochlorins has been revised.

**Keywords:** metallochlorins, normal coordinate calculations, DFT calculations.

**For citation:** Gladkov L. L., Gladkova G. A. DFT calculation of Zn-chlorine vibrational states. *Proceedings of BSTU, issue 3, Physics and Mathematics. Informatics*, 2024, no. 1 (278), pp. 39–42 (In Russian).

DOI: 10.52065/2520-6141-2024-278-6.

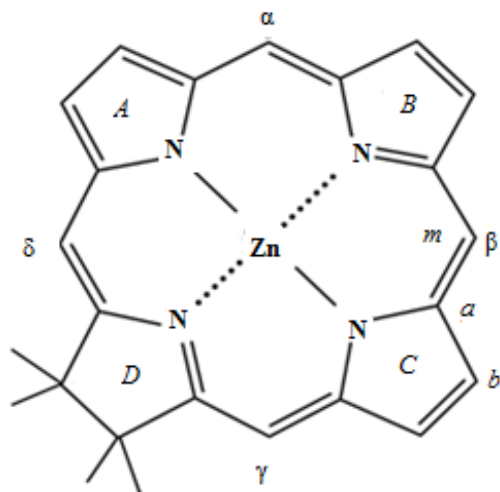
**Введение.** Метод функционала плотности показал свою высокую эффективность при моделировании структуры, колебательных, электронных и вибронных состояний сложных молекул, таких как, например, порфирины [1–4], представляющих большой интерес как с точки зрения фундаментальных, так и прикладных исследований.

В настоящей работе представлены результаты расчета методом функционала плотности структуры и колебательных спектров Zn-хлорина (рисунок), простейшего соединения среди металлокомплексов гидропорфиринов, на основании которых предложена интерпретация экспериментальных данных. Интерес к молекулам хлоринов вызван прежде всего принадлежностью к ним таких соединений, как феофетины и хлорофиллы, играющих важнейшую роль в процессе фотосинтеза. Кроме того, хлорины показали себя как эффективные фотосенсибилизаторы, широко

применяемые при лечении онкологических заболеваний методами фотодинамической терапии.

**Основная часть.** Ранее для изучения колебательных состояний металлокомплексов хлорина были получены ИК-спектры Zn-хлорина и Zn-7,8-диэтилхлорина (Zn-ДЭХ) [5], тонкоструктурные спектры флуоресценции этих соединений [6], а также ИК-спектры и спектры резонансного КР (РКР) Cu-хлорина [7]. Выбор молекулы Zn-ДЭХ связан с тем, что присоединение двух этильных групп к гидрированному кольцу изменит динамические характеристики данной части молекулы и позволит выявить ее колебания. Экспериментальные данные были интерпретированы на основании расчетов нормальных колебаний. Поскольку для гидрированного кольца *D* отсутствовал проверенный набор силовых постоянных, вычисленные значения ряда частот заметно отличались от экспериментальных.





Структурная формула Zn-хлорина  
и обозначения атомов углерода

Для представления более надежной интерпретации в данной работе проведен расчет колебаний методом функционала плотности. При этом использовался обменно-корреляционный функционал BPE и трехэкспонентный базисный набор 3z по алгоритму, реализованному в квантово-химической программе [8]. Процесс оптимизации геометрии был остановлен, когда компоненты градиента энергии не превышали  $10^{-6}$ . Затем были проведены расчеты нормальных колебаний и интенсивностей в ИК-спектрах. Отсутствие мнимых значений частот свидетельствует о достижении стационарной точки при оптимизации геометрии молекул. Масштабирование вычисленных частот не производилось.

Оптимизация геометрии показала нарушение плоского строения макроцикла. Один из атомов C<sub>6</sub> гидрированного пиррольного кольца расположен над плоскостью макроцикла, а другой – под ней. В этом случае симметрия молекулы Zn-хлорина становится C<sub>2</sub>, что ниже симметрии хлорина (C<sub>2v</sub>). Чтобы легче сравнивать колебания этих соединений, в дальнейшем будем рассматривать колебания в рамках симметрии C<sub>2v</sub> (см. таблицу).

Сопоставление теоретических и экспериментальных данных для металлокомплексов хлорина, приведенное в таблице для колебаний A<sub>1</sub>- и B<sub>1</sub>-типов симметрии, основывается не только на близости частот, но и на расчетах интенсивностей ИК-полос, отнесении колебаний по типам симметрии [6, 7], а также на анализе колебательных состояний металлопорфинов и хлоринов [1–4].

Сравнение данных таблицы показывает значительные изменения в отнесении ряда ИК-полос и линий РКР. В первую очередь это относится к валентным колебаниям макроцикла, хотя есть отличия и в форме деформационных скелетных колебаний.

### Отнесение частот колебаний A<sub>1</sub>- и B<sub>1</sub>-типов симметрии металлохлоринов, см<sup>-1</sup>, активных в спектрах РКР и ИК-спектрах

Zn-хлорин			Cu-хлорин		Zn-хлорин
ν <sub>теор</sub>	ν <sub>ТС</sub>	ν <sub>ИК</sub>	ν <sub>РКР</sub>	ν <sub>ИК</sub>	Форма колебаний
A <sub>1</sub> -колебания					
208	–	–	202	–	ZnN, ZnNZn
216	200	–	248	–	ZnN
349	353	350	–	–	mab <sup>A</sup> , maN <sup>A</sup> , ZnNa
353	362	–	366	–	ZnN 18, mab <sup>A</sup> , maN <sup>A</sup>
375	378	376	385	383	ZnN, maN <sup>A</sup> , mab <sup>A</sup>
716	728	729	730	727	ama, baN, mab
720	734	–	–	–	aNa, amH
732	748	742	744	742	aNa <sup>B</sup> , am <sup>a</sup> , baN <sup>a</sup>
785	798	799	–	804	abb <sup>A</sup> , ama, baN <sup>A</sup>
884	899	–	900	–	ab <sup>D</sup> , aN <sup>D</sup> , ZnN <sup>D</sup>
969	–	968	–	975	bbH <sup>D</sup> , ρ(C <sub>β</sub> ) <sup>D</sup> , ρ(C <sub>α</sub> ) <sup>D</sup>
986	–	–	998	–	bb <sup>D</sup> , ab <sup>A</sup> , aN <sup>A</sup>
996	1008	1005	1008	1003	ab <sup>A</sup> , aN <sup>A</sup> , ZnN <sup>A</sup>
1012	1030	–	1035	1032	bb <sup>D</sup> , aN <sup>A</sup> , ab <sup>A</sup>
1050	1056	1050	1056	1050	δ(bH) <sup>A</sup> , bb <sup>A</sup>
1053	1056	–	1067	–	δ(bH) <sup>B</sup>
1126	–	1145	–	–	ab <sup>AB</sup> , aN <sup>AB</sup> , δ(bH), δ(mH)
1157	–	–	1152	–	δ(mH), aN, ab
1187	1179	–	–	–	δ(bH) <sup>D</sup> , bb <sup>D</sup>
1286	1260	1258	1267	1265	ab, aN, abb, δ(bH)
1302	1309	1310	1308	1308	ab <sup>A</sup> , am, abb,
1338	1309	1310	1316	1314	ab, aN, ama
1359	1356	1350	1365	–	aN, δ(mH)
1374	1381	1381	–	–	aN, ab, δ(mH)
1421	–	1419	–	1419	HbH <sup>D</sup> , am <sup>a</sup> bb <sup>A</sup>
1425	–	1438	–	1440	bb <sup>A,B</sup> , am <sup>a</sup> , HbH <sup>D</sup>
1446	1464	1464	1475	1471	bb <sup>A</sup> , am <sup>γ</sup>
1506	1506	1499	1517	1515	bb, am <sup>γ</sup> , δ(bH)
1539	–	1531	1552	1550	bb <sup>A,B</sup> , am <sup>γ</sup>
1575	1575	1578	1600	1597	am <sup>γ</sup> , am <sup>a</sup> , aNa <sup>B</sup>
1613	1622	1623	1648	1647	am <sup>γ</sup> , am <sup>a</sup> , aNa <sup>D</sup>
B <sub>1</sub> -колебания					
213	–	–	218	–	ZnN, ZnNZn
215	–	–	262	–	ZnN <sup>A</sup> , ZnNa <sup>A</sup>
327	–	330	–	–	mab <sup>D,B</sup> , maN <sup>D,B</sup> , ZnN
366	–	342	–	343	ZnN, mab <sup>A</sup> , maN <sup>A</sup>
379	–	405	–	–	mab, maN, ZnN
404	–	428	–	–	mab <sup>A</sup> , maN <sup>A</sup> , am <sup>a</sup>
737	–	742	744	742	ama <sup>γ</sup> , am <sup>a</sup> , abb <sup>D</sup>
795	–	816	819	816	abb <sup>A,B</sup> , baN <sup>A,B</sup> , ama <sup>a</sup> 4
981	–	990	–	992	ab <sup>A,D</sup> , aN <sup>A</sup> abb <sup>D</sup>
996	–	1005	–	1003	ab, aN, ZnNa
1048	–	1050	–	1055	δ(bH) <sup>A</sup> , bb <sup>A</sup>
1159	–	1170	1175	1175	δ(mH) <sup>γ</sup> , aN <sup>D</sup> , am <sup>γ</sup>
1211	–	1206	–	1215	δ(bH) <sup>A</sup>
1303	–	1320	1325	1323	ab <sup>AD</sup> , aN <sup>B</sup> , δ(bH) <sup>AD</sup> , δ(mH) <sup>a</sup>
1321	1333	–	–	–	ab <sup>B</sup> , aN <sup>B</sup> , δ(bH) <sup>B</sup> , δ(mH) <sup>γ</sup>
1355	–	1350	1355	1351	aN <sup>A</sup> , δ(mH) <sup>a</sup>
1392	–	1381	1387	1384	bb <sup>A</sup> , am, δ(mH)
1406	–	1419	–	1419	HbH <sup>D</sup> , δ(bH) <sup>D</sup> , bb <sup>A</sup> , am <sup>γ</sup>
1446	1457	1459	–	–	bb <sup>A</sup> , am, δ(mH) <sup>γ</sup>
1501	–	–	–	1485	bb <sup>A</sup> , am <sup>γ</sup>
1530	1530	1522	–	1536	am, bb <sup>A</sup> , aN
1562	–	1578	1608	1607	am, δ(mH) <sup>γ</sup>

Примечание. Верхние индексы указывают пиррольное кольцо или метиновый мостик, причем индекс α относится к α- и β-, γ – к γ- и δ-мостикам; индекс A – к пиррольным кольцам A и C ввиду их эквивалентности; отсутствие индексов указывает на участие в данном колебании аналогичных координат всех пиррольных колец или метиновых мостиков.

Не обсуждая отнесение каждой полосы, остановимся на наиболее интересных аспектах интерпретации.

В низкочастотной области до  $400\text{ см}^{-1}$  в нормальных колебаниях значителен вклад координат, включающих атом металла. Так, дублет  $248$  и  $262\text{ см}^{-1}$  линий РКР был предположительно отнесен к аналогичным колебаниям  $\text{Cu}$ -хлорина [7], а причиной расщепления дважды вырожденной частоты является гидрирование пиррольного кольца. Согласно нашему расчету, длина связи  $\text{ZnN}^D$  на  $0,05\text{ \AA}$  больше других связей цинк – азот. Следует отметить, что такие колебания чувствительны к природе центрального металла.

В области частот до  $900\text{ см}^{-1}$  в ИК-спектрах активнее неплоские колебания макроцикла. Их отнесение аналогично выполненному ранее для неплоских колебаний близких по строению молекул хлоринов и металлопорфинов [4]. Не-плоским колебаниям типа симметрии  $B_2$  соответствуют ИК-полосы  $652, 697, 762, 838, 853$  и  $892\text{ см}^{-1}$   $\text{Zn}$ -хлорина. Чувствительность полос  $838$  и  $853\text{ см}^{-1}$   $\text{Zn}$ -хлорина к введению заместителей на гидрированном пиррольном кольце подтверждает сделанный ранее вывод о сложной форме соответствующих колебаний. Из таблицы видно, к колебаниям только гидрированного кольца относятся рассчитанные частоты  $884, 969$  и  $1406\text{ см}^{-1}$ . Первое из них мы сопоставляем со слабой линией РКР  $900\text{ см}^{-1}$ , два последних относим к ИК-полосам  $968$  и  $1419\text{ см}^{-1}$ . При переходе к  $\text{Zn}$ -ДЭХ эти полосы исчезают [5]. Следует отметить, что колебательные координаты этого кольца также участвуют в ряде колебаний сложной формы (см. таблицу).

Полосы в ИК-спектрах металлохлоринов с частотами свыше  $1300\text{ см}^{-1}$  намного интенсивнее, чем у металлопорфинов. Это означает, что изменение распределения  $\pi$ -электронной плотности в макроцикле при гидрировании одного пиррольного кольца приводит к значительному увеличению дипольных моментов связей, особенно для  $\text{C-C}$ -связей метиновых мостиков.

Отметим, что в ИК-спектрах наиболее активны колебания  $\gamma$ -,  $\delta$ -мостиков, тогда как в тонкоструктурных спектрах флуоресценции более активны колебания  $\alpha$ -,  $\beta$ -мостиков [5, 6, 9]. Данное различие объясняется следующим образом.

Интенсивность ИК-полос описывается распределением электронной плотности в основном электронном состоянии. В свою очередь, интенсивность электронно-колебательных полос хлоринов определяется по механизму Франка – Кондона изменением геометрии молекулы при переходе из одного электронного состояния в другое. Действительно, согласно квантово-химическим расчетам [10], у молекулы металлохлорина в  $S_1$ -состоянии по сравнению с  $S_0$  сильнее изменяются  $\pi$ -порядки  $\text{C-C}$ -связей  $\alpha$ - и  $\beta$ -мостиков, а значит, активность колебаний этих связей в вибронных спектрах будет выше (между длинами связей и их  $\pi$ -порядками существует хорошая корреляция).

**Заключение.** Методом функционала плотности вычислено строение молекулы  $\text{Zn}$ -хлорина, рассчитаны частоты и форма их нормальных колебаний. Расчет показал неплоское строение гидрированного пиррольного кольца. Пересмотрена интерпретация колебательных и тонкоструктурных электронно-колебательных спектров металлохлоринов.

### Список литературы

1. Kozłowski P. M., Jarzecki A. A., Pulay P. Vibrational assignment and definite harmonic force field for porphine. 1. Scaled quantum mechanical results and comparison with empirical force field // *J. Phys. Chem.* 1996. Vol. 100, no 17. P. 7007–7013.
2. Березин К. В., Нечаев В. В. Расчет частот нормальных колебаний хлорина методом функционала плотности // *Журн. прикл. спектр.* 2004. Т. 71, № 3. С. 283–294.
3. Evolution of electronic and vibronic transitions in metal(II) meso-tetra(4-pyridyl)porphyrins / J. M. S. Lopes [et al.] // *Spectrochim. Acta Part A. Mol. Biomol. Spectrosc.* 2019. Vol. 215. P. 327–333.
4. Гладков Л. Л. Молекулярная структура и колебательная спектроскопия тетрапиррольных соединений. Минск: БГАС. 2023. 216 с.
5. Гладков Л. Л., Старухин А. С., Шульга А. М. Интерпретация колебательных спектров металлокомплексов хлорина // *Журн. прикл. спектр.* 1987. Т. 47, № 2. С. 231–236.
6. Гладков Л. Л., Старухин А. С., Шульга А. М. Тонкоструктурные спектры флуоресценции металлохлоринов // *Журн. прикл. спектр.* 1986. Т. 45, № 3. С. 410–414.
7. Resonance Raman spectra of deuterated metalloporphyrins / K. N. Solov'yov [et al.] // *J. Mol. Struct.* 1978. Vol. 45. P. 267–305.
8. Laikov D.N. Fast evaluation of density functional exchange-correlation terms using the expansion of the electron density in auxiliary basis sets // *Chem. Phys. Lett.* 1997. Vol. 281, no. 1. P. 151–156.
9. Колебательные спектры хлорина и его дейтеропроизводных / Л. Л. Гладков [и др.] // *Журн. прикл. спектр.* 1983. Т. 38, № 4. С. 598–606.
10. Weiss C. C., Kobayashi H., Gouterman M. Spectra of porphyrins. Part III. Self-consistent molecular orbital calculations of porphyrins and related ring systems // *J. Mol. Spectrosc.* 1965. Vol. 16, no. 2. P. 416–450.

### References

1. Kozłowski P. M., Jarzecki A. A., Pulay P. Vibrational assignment and definite harmonic force field for porphine. 1. Scaled quantum mechanical results and comparison with empirical force field. *J. Phys. Chem.*, 1996, vol. 100, no. 17, pp. 7007–7013.
2. Berezin K. V., Nechaev V.V. Calculation of frequencies of normal vibrations of chlorin by the density functional method. *Zhurnal prikladnoy spektroskopii* [Journ. Appl. Spectr.], 2004, vol. 71, no. 3, pp. 283–294 (In Russian).
3. Lopes J. M. S., Sampaio R. N., Ito A. S., Batista A. A., Machado A. E H., Araujo P. T., Barbarosa Neto N. M. Evolution of electronic and vibronic transitions in metal(II) meso-tetra(4-pyridyl)porphyrins. *Spectrochim. Acta Part A. Mol. Biomol. Spectrosc.*, 2019, vol. 215, pp. 327–333.
4. Gladkov L. L. *Molekulyarnaya stryktura i kolebatel'naya spektroskopiya tetrapirrol'nykh soyedineniy* [Molecular structure and vibrational spectroscopy of tetrapyrrole compounds]. Minsk, BGAS Publ., 2023. 216 p. (In Russian).
5. Gladkov L. L., Starukhin A. S., Shulga A. M. Fine-structure fluorescence spectra of metallochlorins. *Zhurnal prikladnoy spektroskopii* [Journ. Appl. Spectr.], 1986, vol. 45, no. 3, pp. 410–414 (In Russian).
6. Gladkov L. L., Starukhin A. S., Shulga A. M. Interpretation of vibrational spectra of chlorin metal complexes. *Zhurnal prikladnoy spektroskopii* [Journ. Appl. Spectr.], 1987, vol. 47, no. 2, pp. 231–236 (In Russian).
7. Solovyov K. N., Gladkov L. L., Gradyushko A. T., Ksenofontova N. M., Shulga A. M., Starukhin A. S. Resonance Raman spectra of deuterated metalloporphins. *J. Mol. Struct.*, 1978, vol. 45, pp. 267–305.
8. Laikov D.N. Fast evaluation of density functional exchange-correlation terms using the expansion of the electron density in auxiliary basis sets. *Chem. Phys. Lett.*, 1997, vol. 281, no. 1, pp. 151–156.
9. Gladkov L. L., Ksenofontova N. M., Solovyov K. N., Starukhin A. S., Shulga A. M., Gradyushko A. T. Vibrational spectra of chlorin and deuterated derivatives. *Zhurnal prikladnoy spektroskopii* [Journ. Appl. Spectr.], 1983, vol. 38, no. 4, pp. 598–606 (In Russian).
10. Weiss C. C., Kobayashi H., Gouterman M. Spectra of porphyrins. Part III. Self-consistent molecular orbital calculations of porphyrins and related ring systems. *J. Mol. Spectrosc.*, 1965, vol. 16, no. 2, pp. 416–450.

### Информация об авторах

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

**Гладкова Галина Александровна** – кандидат технических наук, доцент, доцент кафедры высшей математики. Военная академия Республики Беларусь (220057, г. Минск, пр. Независимости, 220, Республика Беларусь). E-mail: llglad@tut.by

### Information about the authors

**Gladkov Lev L'vovich** – DSc (Physics and Mathematics), Associate Professor, Professor, the Department of Physical and Mathematical Foundations of Informatics. Belarusian State Academy of Communications (8/2, Francysk Skaryna str., 220114, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: llglad@tut.by

**Gladkova Galina Aleksandrovna** – PhD (Engineering), Associate Professor, Assistant Professor, the Department of Higher Mathematics. Belarusian Military Academy (220, Nezavisimosti Ave., 220057, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: llglad@tut.by

Поступила после доработки 26.12.2023

# 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 621.3.011.712

Д. А. Гринюк, Д. С. Карпович, Н. М. Олиферович,  
И. Г. Сухорукова, И. О. Оробей, М. В. Чепурко  
Белорусский государственный технологический университет

### СХЕМА ЗАМЕЩЕНИЯ ЭЛЕКТРОКИНЕТИЧЕСКОГО ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЯ НА СДВИГОВОМ ПОТОКЕ С ПЕРЕМЕННЫМ ИЗМЕРИТЕЛЬНЫМ СИГНАЛОМ

В статье с использованием результатов предыдущей работы расширяется анализ схемы замещения измерительного преобразователя электрокинетического потенциала на область переменных значений. Поскольку работа измерительных преобразователей основана на контактном методе измерения тока и напряжения в водном растворе с помощью электродной системы, следует учитывать электрохимические процессы, которые происходят в электродной системе. Делается вывод, что именно электродная система во многом определяет динамические характеристики измерительного канала. Для отражения динамически свойств принят типовой слаботорочный вариант схемы замещения электродной системы.

Для рассмотренного варианта измерительного преобразователя могут наблюдаться сложные распределения движения заряженных частиц вследствие наличия одновременно двух источников энергии. Токи утечки между ними могут способствовать искажению измерительных потенциалов при пересчете измерительных потенциалов в электрокинетический потенциал. Сделан вывод, что токи утечки могут повлиять на граничные частоты рабочего диапазона измерительного преобразователя. Для измерительного преобразователя, который будет работать на низких частотах, предложен вариант схемы замещения для низких и инфранизких частот.

Проложенные конструкции измерительных преобразователей характеризуются сложной геометрией участка протекания токов утечек. Для варианта подвижного элемента преобразователя в виде цилиндра с сечения параллельно оси цилиндра получена формула, которая связывает параметры измерительной ячейки с эквивалентным сопротивлением в схеме замещения.

**Ключевые слова:** схема замещения, электрокинетический потенциал, переменный ток течения.

**Для цитирования:** Гринюк Д. А., Карпович Д. С., Олиферович Н. М., Сухорукова И. Г., Оробей И. О., Чепурко М. В. Схема замещения электрокинетического преобразователя на сдвиговом потоке с переменным измерительным сигналом // Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика. 2024. № 1 (278). С. 43–51.

DOI: 10.52065/2520-6141-2024-278-7.

D. A. Hryniuk, D. S. Karpovich, N. M. Oliferovich,  
I. G. Suhorukova, I. O. Orobei, M. V. Chepurko  
Belarusian State Technological University

## SUBSTITUTION CIRCUIT OF ELECTROKINETIC CONVERTER ON SHEAR FLOW WITH AN ALTERNATIVE MEASUREMENT SIGNAL

In the article, using the results of previous work, the analysis of the substitution circuit of the electrokinetic potential measuring transducer is expanded to the range of variable values. Since the operation of measuring transducers is based on the contact method of measuring current and voltage in an aqueous solution using an electrode system, the electrochemical processes that occur in the electrode system should be taken into account. It is concluded that it is the electrode system that largely determines the dynamic characteristics of the measuring channel. To reflect the dynamic properties, a typical low-current substitution circuit of the electrode system is adopted.

For the considered version of the measuring transducer, complex distributions of motion of charged particles can be observed due to the simultaneous presence of two energy sources. Leakage currents between them can contribute to distortion of the measuring potentials when converting the measuring potentials into electrokinetic potential. It is concluded that leakage currents can affect the limiting frequencies of the operating range of the measuring transducer. For a measuring transducer that will operate at low frequencies, an substitution circuit option for low and infra-low frequencies is proposed.

The laid structures of measuring transducers are characterized by the complex geometry of the area where leakage currents flow. For the version of the moving element of the converter in the form of a cylinder with a cross section parallel to the cylinder axis, a formula is obtained that relates the parameters of the measuring cell with the equivalent resistance in the equivalent circuit.

**Keywords:** substitution circuit, electrokinetic potential, alternating current flow.

**For citation:** Hryniuk D. A., Karpovich D. S., Oliferovich N. M., Suhorukova I. G., Orobei I. O., Chepurko M. V. Substitution circuit of electrokinetic converter on shear flow with an alternative measurement signal. *Proceedings of BSTU, issue 3, Physics and Mathematic. Informatics*, 2024, no. 1 (278), pp. 43–51 (In Russian).

DOI: 10.52065/2520-6141-2024-278-7.

**Введение.** Схемы замещения являются элементом исследования электрокинетических явлений в многофазных микро- и наносистемах [1–3], которые активно используются для современного химического и биологического анализа. Вопросы схем замещения всегда являются актуальными при анализе систем, в которых происходят преобразования энергии в электрическую из других видов [4–7]. В связи с развитием методов анализа с помощью математического моделирования происходит дальнейшее развитие данного направления. Продолжением этого вопроса является получение схемы замещения для построения измерительных преобразователей [8–13]. В предыдущей работе [14] произведена попытка построения схемы замещения при возникновении электрокинетических явлений в сдвиговом потоке. Однако наиболее актуально изучение схем замещения для измерительных преобразователей с переменным сигналом. В [15–18] было показано, что измерительный преобразователь электрокинетического потенциала целесообразно строить путем формирования переменного измерительного потенциала течения.

Кроме оценки преобразования эффекта электрокинетических явлений в электрический сигнал, весьма существенна проблема необходимости учитывать свойства электродной системы для измерения потенциала (тока) течения или генерации

электрического воздействия для переменного электроосмоса. При постоянных значениях электрических параметров проблема обусловлена в основном поляризацией электродов и относительно легко может быть учтена алгоритмом работы и подбором материалов электродов. При переменном измерительном сигнале или воздействии могут сильно проявляться емкостные и индуктивные эффекты электродных систем [3, 9, 11, 13, 19].

**Учет наличия переменного сигнала.** Определим коэффициент преобразования момента вращения в электрическое напряжение  $\underline{\Delta U}$  по переменному сигналу

$$\underline{\Delta N} = \sum_{k=0}^{\infty} \Delta N_k e^{j\omega k t}. \quad (1)$$

В этом случае необходимо учесть шунтирующее влияние междуэлектродной емкости  $C_{E,C}$ , емкости проводов  $C_L$  и входной емкости предварительного усилителя  $C_A$ . Эти емкости, включенные параллельно нагрузочному сопротивлению, увеличивают обратные токи утечки. В эквивалентную электрическую цепь преобразующего элемента по сравнению со случаем постоянного течения жидкости добавляются дополнительные элементы  $C_{E,P}$  и  $C_{E,C}$  (рис. 1), причем

$$C_{E,P} = C_L + C_A. \quad (2)$$

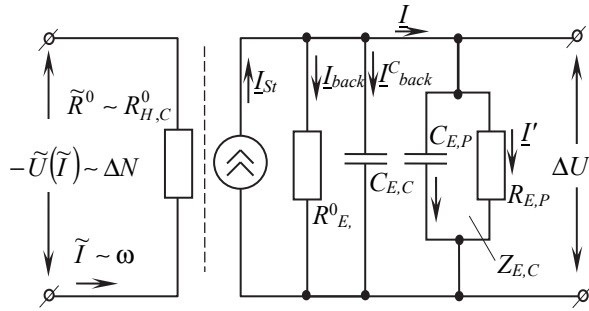


Рис. 1. Простейшая эквивалентная электрическая цепь преобразующего элемента в случае переменного тока течения жидкости

Как было показано в исследованиях [14], величина тока формируется одновременно наличием сдвига  $\Delta N$  и падения напряжения в капилляре  $\Delta U$ :

$$I = S\Delta U - \frac{\Delta N}{R_{E,C}^0}. \quad (2a)$$

Выражение для тока преобразуется к виду

$$\underline{I} = \underline{I}_{back}^c + \underline{I}^c + \underline{I}', \quad (3)$$

где  $\underline{I}_{back}^c$ ,  $\underline{I}_{back}$ ,  $\underline{I}'$  – обратные токи утечки, вызванные потерями цепи.

В свою очередь они могут быть определены как:

$$\underline{I}_{back}^c = \Delta U j\omega C_{E,C}; \quad (4a)$$

$$\underline{I}^c = \Delta U j\omega C_{E,P}; \quad (4б)$$

$$\underline{I}' = \Delta U / R_{E,P}. \quad (4в)$$

Уравнения (2а), (3) и (4а–4в) образуют замкнутую систему. Подставив значения токов из (3), (4а–4в) в (2а) с заменой  $I$ ,  $\Delta N$ ,  $\Delta U$  комплексными изображениями  $\underline{I}$ ,  $\underline{\Delta N}$ ,  $\underline{\Delta U}$  при  $R_{E,C}^0 = R_{E,C}^\infty = R_{E,C}$ , получим:

$$\underline{\Delta U} = \frac{SR_{E,P}R_{E,C}\underline{\Delta N}e^{j\omega t}}{R_{E,P} + R_{E,C} + j\omega(C_{E,C} + C_{E,P})R_{E,P}R_{E,C}}. \quad (5)$$

Если  $\underline{\Delta U}$  представить в виде

$$\underline{\Delta U} = \sum_{k=0}^{\infty} \underline{\Delta U}_k e^{j(k\omega t + \Psi_k)}, \quad (6)$$

то коэффициент преобразования сдвига в напряжение по первой гармонике

$$\frac{\underline{\Delta U}}{\underline{\Delta N}} = \frac{\Delta U e^{j\Psi}}{\Delta N}. \quad (7)$$

Выделяя модуль и аргумент комплексного выражения правой части (7), получаем абсолютный коэффициент преобразования напряжения сдвига в электрическое напряжение при любом нагрузочном сопротивлении:

$$\frac{\Delta U}{\Delta N} = \frac{SR_{E,P}R_{E,C}}{\sqrt{(R_{E,P} + R_{E,C})^2 + \omega^2(C_{E,C} + C_{E,P})^2 R_{E,P}R_{E,C}}}. \quad (8)$$

и выражение для сдвига фаз  $\Psi$  между  $\underline{\Delta U}$  и  $\underline{\Delta N}$  при  $S > 0$

$$\Psi = -\pi - \arctg\left(\frac{\omega(C_{E,C} + C_{E,P})R_{E,P}R_{E,C}}{R_{E,P} + R_{E,C}}\right). \quad (9)$$

В потенциальном режиме ( $R_{E,C} \ll R_{E,P}$ ) с электродов снимается максимальное электрическое напряжение. При гармонических сигналах  $S_{\Delta U} = \Delta U / \Delta P$ . Из (8) и (9) следует выражение для чувствительности ЭКПР по напряжению

$$S_{\Delta U} = \frac{SR_{E,C}}{\sqrt{1 + (f/f_{H,C})^2}}; \quad (10)$$

$$\Psi = -\pi - \arctg\left(\frac{f}{f_{H,C}}\right), \quad (11)$$

где

$$f_{H,C} = \frac{1}{2\pi(C_{E,C} + C_{E,P})R_{E,C}}. \quad (12)$$

Коэффициент преобразования напряжения сдвига на щелевом капилляре для потенциального режима  $S_{\Delta U}$  из-за влияния межэлектродной емкости, электрической емкости проводов и входной емкости электронного усилителя начинает уменьшаться с увеличением частоты при частотах, соизмеримых с  $f_{H,C}$  (верхней частотой, при которой происходит спад  $S_{\Delta U}$  на уровень  $\sqrt{2}$  из-за емкостных утечек). Амплитудная переходная характеристика электрокинетической системы представляет собой функцию

$$\frac{1}{\sqrt{1 + (f/f_{H,C})^2}},$$

а частотная погрешность преобразования – функцию [19]

$$\delta^{St} = 1 - \frac{1}{\sqrt{1 + (f/f_{H,C})^2}}. \quad (13)$$

Формулу (10) для коэффициента преобразования с учетом (13) можно записать в виде

$$S_{\Delta U} = SR_{E,C} (1 - \delta^{St}). \quad (14)$$

В потенциальном режиме в области низких частот амплитудная переходная характеристика

электрокинетической системы имеет плоский параллельный оси абсцисс участок начиная с  $f=0,1$ . На этом участке  $\delta^{St} \ll 1$  и

$$S_{\Delta U} = SR_{E,C}. \quad (15)$$

В соотношениях (10), (14) и (15)  $S_{\Delta U}$ , так же как и  $S$ , представляет собой абсолютное значение коэффициента преобразования.

В токовом режиме (когда  $R_{E,P} \ll R_{E,C}$ ) шунтирующие емкости не влияют на коэффициент преобразования сдвига в электрический ток

$$\underline{S}_I = \frac{I}{\Delta N}.$$

При переменном течении по синусоидальному закону последнее соотношение имеет вид

$$\underline{S}_I = S. \quad (16)$$

В общем случае в электрокинетических преобразователях (ЭКПр) предполагается наличие двигателя с регулируемой частотой вращения передающего элемента (редуктора) и подвижного элемента. Движение жидкости в первичных преобразователях можно рассматривать как движение твердого тела. Для разработанного преобразователя в процессе измерения момент сопротивления и частота вращения постоянны и не влияют на информативный сигнал. Кроме того, номинальный момент значительно превосходит момент сопротивления, и рабочий диапазон частоты находится в пределах 0,25–5,00 Гц. Поэтому для ЭКПр с подвижным элементом, имеющим в сечении эллипс, влияние динамических свойств механической части на электрокинетическое преобразование несущественно [18].

В случае формирования на электродах негармонического сигнала необходим учет влияния диффузии заряженных ионов на ионный ток, что несколько усложняет схему замещения.

Перенос вещества к измерительным электродам и от них осуществляется по трем основным механизмам:

- диффузией  $I_D$  за счет разности концентраций вещества вблизи электродов и в объеме раствора;
- миграцией  $I_V$  ионов под действием электрического поля;
- конвекцией  $I_C$ , т. е. потоком жидкости, возникающим под механическим воздействием или при градиенте плотности жидкости в поле гравитационных сил.

При низких частотах электрический ток в ЭКПр переносится как путем миграции ионов в электрическом поле, так и путем их диффузии. При измерении чаще всего отсутствует избыток индифферентного электролита, поэтому миграция и диффузия являются единым токообразующим процессом. Для качественной оценки

влияния диффузии на ионный ток в эквивалентную цепь ЭКПр вводят последовательно соединенные электрические сопротивления  $Z_{M,E}$ , ответственные за миграцию ионов в электрическом поле, и электрическое сопротивление диффузии  $Z_D$ . Такое представление связано с тем, что при прохождении ионного тока между электродами создается электрическое напряжение, которое складывается из омических  $\Delta U_{M,E}$  и диффузных  $\Delta U_D$  потерь. Из-за изменения формы капилляра при прохождении подвижным элементом зоны измерения  $\Delta U_{M,E}$  существенно меняется. Поскольку  $\Delta U_D$  обусловлено накоплением диффундирующих избыточных униполярных заряженных ионов [21] и является интегральной функцией от ионного тока  $I$ , отстающей от  $I$  по фазе, в токовом режиме сопротивление

$$Z_D = R_D + jX_D$$

является функцией угла поворота ротора. Схема замещения, учитывающая изложенные соображения, приведена на рис. 2.

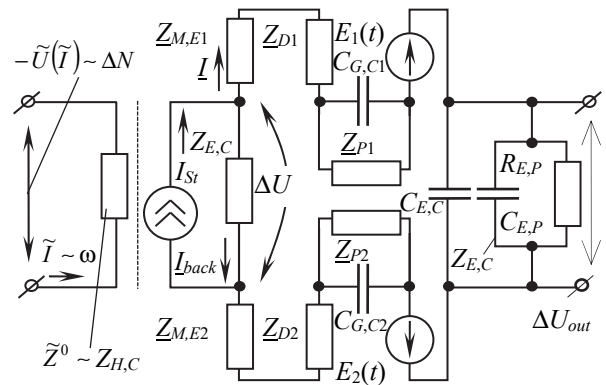


Рис. 2. Эквивалентная электрическая цепь преобразующего элемента в случае переменного тока течения жидкости при измерении по методу потенциала течения

В потенциальном режиме, когда нагрузочное сопротивление много больше, чем  $Z_{E,C}$ ,  $Z_{H,C}$ ,  $Z_D(\omega)$ ,  $Z_P(\omega)$ ,  $1/\omega C_{E,P}$ , последние элементы могут быть исключены из цепи (рис. 3). В токовом режиме, когда  $R_{E,P}$  много меньше, чем  $Z_{E,C}$ ,  $1/\omega C_{E,P}$ ,  $1/\omega C_{E,C}$ , эти элементы (рис. 4) могут влиять на переходную характеристику ЭКП. В цепи на рис. 4 гальванические потенциалы  $E_1(t)$ ,  $E_2(t)$ , обуславливающие возникновение потенциала асимметрии электродов, по теореме об эквивалентном генераторе заменены источниками тока  $I_{E1}(t)$ ,  $I_{E2}(t)$ , причем

$$I_{E1} = \frac{1 + j\omega C_{G,C1} Z_{P1}}{Z_{P1}} E_1(t); \quad (17)$$

$$I_{E2} = \frac{1 + j\omega C_{G,C2} Z_{P2}}{Z_{P2}} E_2(t). \quad (18)$$

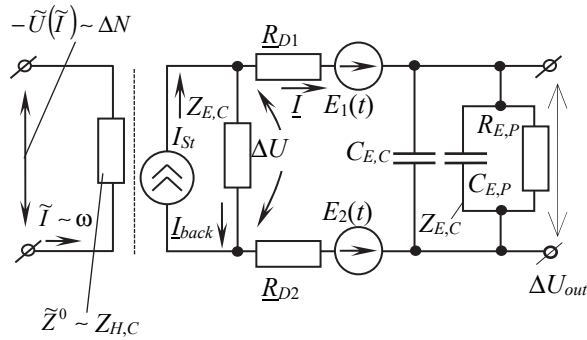


Рис. 3. Эквивалентная электрическая цепь преобразующего элемента по переменному сигналу при измерении методом потенциала течения для низких и инфранизких частот

В процессе измерения электрокинетического потенциала методом тока течения необходимо обеспечить выполнение условия измерения тока течения:

$$DD = \text{Re}(Z_{M,E1} + Z_{M,E2} + Z_{D1} + Z_{D2} + Z_{P1} + Z_{P2} + R_{E,P}) \ll \text{Re}(Z_{E,C}) \quad (19)$$

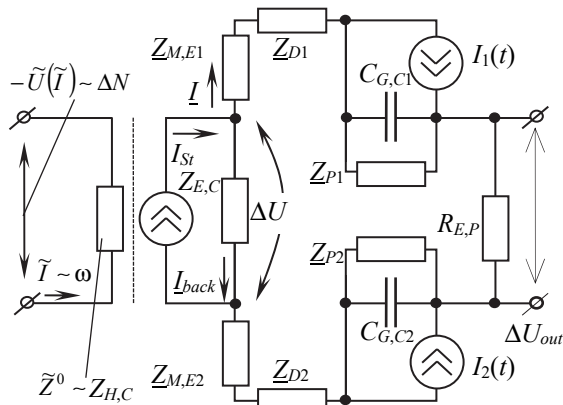


Рис. 4. Эквивалентная электрическая цепь преобразующего элемента в случае переменного тока течения жидкости при измерении по методу тока течения

При исследовании реальных сред все сопротивления, кроме  $R_{E,C}$ , будут изменяться в процессе эксплуатации в основном в сторону увеличения. Наибольшей способностью к увеличению своего сопротивления на низких частотах обладают сопротивления  $Z_P$  вследствие загрязнения поверхности электродов. Фирмы, выпускающие приборы SCD, встраивают периодическую ультразвуковую очистку электродов и дополнительную калибровку прибора в процессе эксплуатации.

Поскольку различные дисперсные среды по-разному выводят поверхность электродов из допустимого для измерений состояния, то можно рекомендовать несколько алгоритмов оценки степени загрязнения электродов. Один из методов

оценки осуществляется периодическим включением в цепь измерения последовательного резистора  $R_{E,P}^*$  с сопротивлением в  $N$  раз большим, чем  $R_{E,P}$ . При увеличении сигнала в  $N + 1$  раз состояние электродов можно считать удовлетворительным.  $R_{E,P}^*$  необходимо выбирать из предположения, что

$$\frac{R_{E,P}^* + \max(DD)}{\max(Z_{E,P})} > S_{\Delta I}, \quad (20)$$

где  $S_{\Delta I}$  – чувствительность схемы измерения;  $\max(DD)$  – максимально допустимое сопротивление  $DD$ ;  $\max(Z_{E,P})$  – максимальное возможное внутреннее сопротивление источника тока течения.

Другой метод оценки осуществляется периодическим кратковременным измерением сопротивления с помощью включения в цепь измерительного сопротивления источника переменного электрического сигнала.

Емкости электродов  $C_{G,C1}$  и  $C_{G,C2}$  имеют порядок десятков микрофард на квадратный сантиметр. В реальных средах они могут изменяться в широких пределах под воздействием минеральных и поверхностно-активных веществ. Межэлектродная емкость  $C_{E,C}$  характеризует конденсатор, состоящий из электродов ЭКПр, между которыми находится диэлектрик в виде слоя жидкости.  $C_{E,C}$  с достаточной для практики точностью можно определить по формуле

$$C_{E,C} = \frac{kS_0\epsilon}{c}, \quad (21)$$

где  $S_0$  – эффективная площадь электрода;  $k$  – коэффициент, определяемый положением ротора (максимален на рис. 5, а, минимален на рис. 5, б).

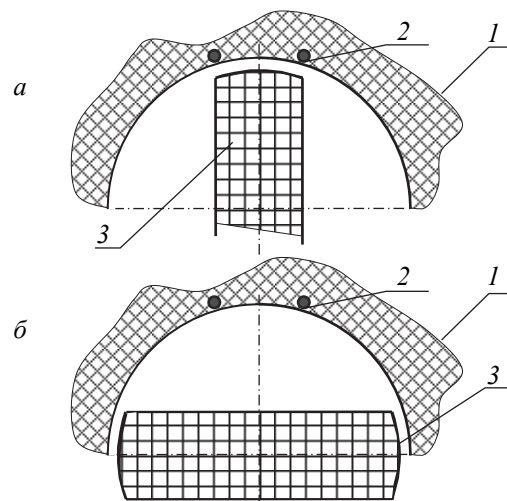


Рис. 5. Влияние расположения подвижного элемента на электродную систему: а – максимальное влияние; б – минимальное; 1 – корпус; 2 – электрод; 3 – подвижной элемент



Сопротивление  $Z_{E,C}$  можно условно разделить на две части, характеризующие разные потоки: 1) обратноосмотический поток, проходящий по щелевому капилляру (точки  $A$  и  $B$  на рис. 6); 2) поток между двумя соседними капиллярами (точки  $A$  и  $C$  на рис. 6). Влияние  $I_{back2}$  на процесс измерения сказывается при сравнимости сопротивлений между точками  $A, B$  и  $A, C$ , т. е.:

$$\frac{1}{Z_{E,C}} = \frac{1}{Z_{E,C1}} + \frac{1}{2R_{E,C2} + Z_{E,C2}}, \quad (22)$$

где  $Z_{E,C1}, Z_{E,C2}$  – сопротивления между точками  $A$  и  $B, C$  и  $D$  соответственно;  $R_{E,C2}$  – сопротивление между точками  $A$  и  $C$ , вычисляемое интегрированием по объему элементарных проводников между этими точками:

$$R_{E,C2} = \int_V dr = 2 \int_0^{x_1} \frac{dx}{\lambda A_0}$$

или

$$R_{E,C2} = \int_0^{x_1} \frac{1}{\lambda H (\sqrt{R^2 - x^2} - c)} dx, \quad (23)$$

где  $V$  – объем жидкости между точками  $A$  и  $C$ ;  $dr$  – сопротивление элементарного объема жидкости;  $A_0$  – поперечное сечение проводника шириной  $dx$ ;  $H$  – высота преобразователя;  $c, R, x_1, h$  – геометрические размеры преобразователя (рис. 7).

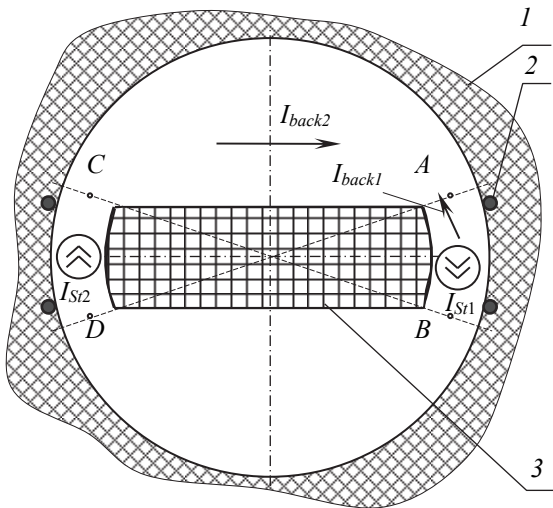


Рис. 6. Модель электрических процессов в щелевом капилляре: 1 – корпус; 2 – электрод; 3 – подвижной элемент

Координату  $x_1$  можно определить как

$$x_1 = \left(R - \frac{h}{2}\right) \cos \alpha = \left(R - \frac{h}{2}\right) \sqrt{1 - \left(\frac{c}{2(R-h)}\right)^2}. \quad (24)$$

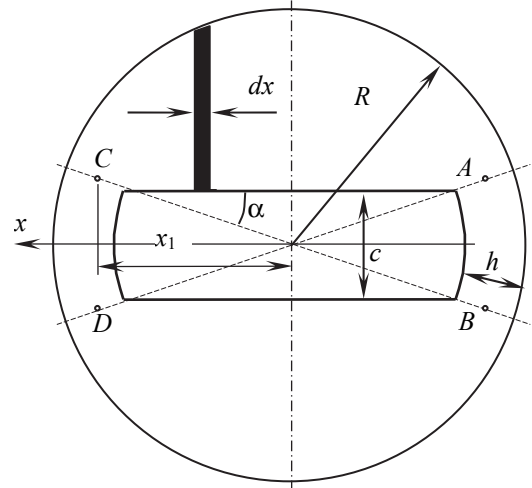


Рис. 7. Модель определения электрического сопротивления: 1 – корпус; 2 – электрод; 3 – подвижной элемент

В результате интегрирования получаем выражение:

$$R_{E,C2} = \frac{4 \left( \frac{\Lambda}{2\Psi} \ln \left( \Theta - \frac{\Psi}{\Theta} + \Psi \right) - \frac{t}{2} \right)}{H}, \quad (25)$$

где

$$\begin{aligned} \Lambda &= \frac{c}{2R}; \\ \Theta &= \operatorname{tg} \left( \frac{t}{2} \right) (1 - \Lambda); \\ t &= \arcsin \left( \frac{x_1}{R} \right); \\ \Psi &= \sqrt{1 - \Lambda^2}. \end{aligned}$$

Вклад поверхностной проводимости в  $R_{E,C2}$  необходимо учитывать при ширине ротора, сравнимой со значением  $2R$ , а также для жидкостей с малой объемной, но с высокой поверхностной проводимостью и широким ДЭС, т. е.

$$Z_{E,C} = Z_{E,C1} + 2(R_{E,C2} + R_{E,C2}^0), \quad (26)$$

где

$$R_{E,C2}^0 = 2H\lambda_S \left[ \sqrt{(R-h)^2 - \frac{c^2}{4}} + R(\pi - 2\alpha) \right];$$

$$\alpha = \arccos \left[ \sqrt{1 - \left( \frac{c}{2(R-h)} \right)^2} \right]$$

или

$$\alpha = \arcsin \left( \frac{c}{2(R-h)} \right).$$

Уровень развития теории поверхностных явлений не позволяет определить  $\zeta$ -потенциал или поверхностный заряд  $\sigma$  на основании свойств жидкой и твердой фаз с учетом структурных факторов пористого тела. Поэтому наиболее реальный путь расчета состоит в измерении основных параметров, характеризующих ЭКП, на модельных элементах и средах и введении этих параметров в расчетные формулы для преобразователей. Такой подход дает возможность на основании небольшого числа электрокинетических измерений проводить расчет различных вариантов ЭКПр. В приближении, которое используется при получении расчетных коэффициентов преобразователя, основными параметрами являются кинетические коэффициенты в уравне-

нии переноса  $S$ ,  $R_{H,C}^0$ ,  $R_{E,C}^0$  ( $S$ ,  $R_{H,C}$ ,  $R_{E,C}$  при  $\eta \gg 1/4$ ).

В некоторых работах отмечается, что для периодических процессов немаловажными являются оценка числа Рейнольдса [20], а также частотная зависимость электрокинетических явлений [13].

**Заключение.** Полученные решения по построению схем замещения показывают высокую зависимость качества полезного сигнала с электрокинетического преобразователя из-за электродной системы и геометрических параметров измерительного преобразователя. Более определенно можно будет утверждать после экспериментальной проверки построенного теоретического обоснования.

### Список литературы

1. Ajdari A. Steady flows in networks of microfluidic channels: building on the analogy with electrical circuits // *C. R. Phys.* 2004. Vol. 5. P. 539–546.
2. Wu J. Interactions of electrical fields with fluids: laboratory-on-a-chip applications // *IET Nanobiotechnol.* 2008. Vol. 2 (1). P. 14–27.
3. Fluid flow induced by nonuniform ac electric fields in electrolytes on microelectrodes. I. Experimental measurements / Green N. G. [et al.] // *Phys. Rev. E.* 2000. Vol. 61, issue 4. P. 4011–4018.
4. Osterle J. F. Electrokinetic Energy Conversion // *Journal of Applied Mechanics.* 1964. Vol. 31 (2). P. 161–164.
5. Morrison F. A., Osterle J. F. Electrokinetic Energy Conversion in Ultrafine Capillaries // *The Journal of Chemical Physics.* 1965. Vol. 43, issue 6. P. 2111–2115.
6. Chang C.-C., Yang R.-J. Electrokinetic energy conversion in micrometer-length nanofluidic channels // *Microfluid. Nanofluidics.* 2010. Vol. 9. P. 225–241.
7. Energy from streaming current and potential / W. Olthuis [et al.] // *Sensors and Actuators B: Chemical.* 2005. Vol. 111–112. P. 385–389.
8. Streaming potential/current measurement system for investigation of liquids confined in extended-nanospace / K. Morikawa [et al.] // *Lab Chip* 10. 2010. P. 871–875.
9. Saha P., Zenyuk I. V. Electrokinetic Streaming Current Method to Probe Polycrystalline Gold Electrode-Electrolyte Interface Under Applied Potentials // *J. Phys. Chem.* 2021. Vol. 168, issue 4. P. 19493–19505.
10. Streaming potential. Streaming potential and electroviscous effects inperiodical pressure-driven microchannel flow / L. Gong [et al.] // *Physics of Fluids.* 2008. Vol. 20, issue 46. P. 063603-1–063603-7.
11. Khademi M., Barz D. Structure of the Electrical Double Layer Revisited: Electrode Capacitance in Aqueous Solutions // *Langmuir.* 2020. Vol. 36, issue 16. P. 4250–4260.
12. Measurement and interpretation of electrokinetic phenomena / A. Delgado [et al.] // *Journal of Colloid and Interface Science.* 2007. Vol. 309, issue 2. P. 194–224.
13. Frequency dependent streaming potentials / P. M. Reppert [et al.] // *J. Colloid Interface Sci.* 2001. Vol. 234, issue 1. P. 194–203.
14. Схема замещения электрокинетического преобразователя на сдвиговом потоке / Д. А. Гринюк [и др.] // *Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика.* 2023. № 1 (266). С. 46–53.
15. Гринюк Д. А., Кузьмицкий И. Ф., Оробей И. О. Первичный преобразователь для измерения электрокинетических характеристик // *Приборы и техника эксперимента.* 1998. № 3. С. 124–127.
16. Преобразователи электрокинетического потенциала гидродисперсных систем / Д. А. Гринюк [и др.] // *Известия ТулГУ. Технические науки.* Вып. 3. Тула: Изд-во ТулГУ, 2011. С. 106–110.
17. Electrokinetic Converter Using An Unsteady Shift: A Quantitative Model / D. Hryniuk [et al.] // *Open Conference of Electrical, Electronic and Information Sciences (eStream).* Vilnius, Lithuania, 2019. P. 1–4. DOI: 10.1109/eStream.2019.8732159.
18. Математическая модель формирования измерительного сигнала в электрокинетическом преобразователе переменного сдвига / Д. А. Гринюк [и др.] // *Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика.* 2019. № 2 (224). С. 58–65.

19. Лидоренко Н. С., Ильин Б. И., Зайденман И. А. Введение в молекулярную электронику. М.: Энергоатомиздат, 1984. 320 с.
20. Дамаскин Б. Б., Петрий О. А. Введение в электрохимическую электрокинетическую / под общ. ред. А. Н. Фрункина. М.: Высшая школа, 1975. 416 с.

### References

- Ajdari A. Steady flows in networks of microfluidic channels: building on the analogy with electrical circuits. *C. R. Phys*, 2004, vol. 5, pp. 539–546.
- Wu J. Interactions of electrical fields with fluids: laboratory-on-a-chip applications. *IET Nanobiotechnol*, 2008, vol. 2 (1), pp. 14–27.
- Green N. G., Ramos A., González A., Morgan H., Castellanos A. Fluid flow induced by nonuniform ac electric fields in electrolytes on microelectrodes. I. Experimental measurements. *Phys. Rev. E.*, 2000. vol. 61, issue 4, pp. 4011–4018.
- Osterle J. F. Electrokinetic Energy Conversion. *Journal of Applied Mechanics*, 1964, vol. 31 (2), pp. 161–164.
- Morrison F. A., Osterle J. F. Electrokinetic Energy Conversion in Ultrafine Capillaries. *The Journal of Chemical Physics*, 1965, vol. 43, issue 6, pp. 2111–2115.
- Chang C.-C., Yang R.-J. Electrokinetic energy conversion in micrometer-length nanofluidic channels. *Microfluid. Nanofluidics*, 2010, vol. 9, pp. 225–241.
- Olthuis W., Schippers B., Eijkel J., van den Berg A. Energy from streaming current and potential. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 2005, vol. 111–112, pp. 385–389.
- Morikawa K., Mawatari K., Kato M., Tsukahara T., Kitamori T. Streaming potential/current measurement system for investigation of liquids confined in extended-nanospace. *Lab Chip* 10, 2010, pp. 871–875.
- Saha P., Zenyuk I. V. Electrokinetic Streaming Current Method to Probe Polycrystalline Gold Electrode-Electrolyte Interface Under Applied Potentials. *J. Phys. Chem.*, 2021, vol. 168, issue 4, pp. 19493–19505.
- Gong L., Wu J., Wang L., Cao K. Streaming potential. Streaming potential and electroviscous effects inperiodical pressure-driven microchannel flow. *Physics of Fluids*, 2008, vol. 20, issue 46, pp. 063603-1–063603-7
- Khademi M., Barz D. Structure of the Electrical Double Layer Revisited: Electrode Capacitance in Aqueous Solutions. *Langmuir*, 2020, vol. 36, issue 16, pp. 4250–4260.
- Delgado A., González-Caballero F., Hunter R., Koopal L., Lyklema J. Measurement and interpretation of electrokinetic phenomena. *Journal of Colloid and Interface Science*, 2007, vol. 309, issue 2, pp. 194–224.
- Reppert P. M., Morgan F. D., Lesmes D. P. and Jouniaux L.. Frequency dependent streaming potentials. *Journal of Colloid and Interface Science*, 2001, vol. 234, issue 1, pp. 194–203.
- Hryniuk D. A., Oliferovich N. M., Suhorukova I. G., Egorova A. L., A., Orobei I. O. Karpuk P. O. Substitution circuit of electrokinetic converter on shear flow. *Trudy BGTU [Proceedings of BSTU]*, issue 3, Physics and Mathematic. Informatics, 2023, no. 1 (266), pp. 46–53 (In Russian).
- Hryniuk D. A., Kuzmitsky I. F., Orobei I. O. Primary transducer for measuring electrokinetic characteristics. *Pribory i tekhnika eksperimenta [Instruments and Experimental Techniques]*, 1998, no. 3, pp. 124–127 (In Russian).
- Hryniuk D. A., Bogoslav N. M., Suhorukova I. G., Orobei I. O., Orobei O. I. Converters of the electrokinetic potential of hydrodispersed systems. *Izvestiya TulGU [Izvestiya TulGU]*, 2011, no. 3, pp. 106–110 (In Russian).
- Hryniuk D., Orobei I., Oliferovich N., Suhorukova I. Electrokinetic Converter using AN Unsteady Shift: A Quantitative Model. *Electrical, Electronic and Information Sciences (eStream): Open Conference*. Vilnius, 2019, pp. 1–4. DOI: 10.1109/eStream.2019.8732159.
- Hryniuk D. A., Oliferovich N. M., Orobei I. O., Suhorukova I. G. Mathematical model of formation of measuring signal in electrokinetic converter of variable shift. *Trudy BGTU [Proceedings of BSTU]*, issue 3, Physics and Mathematics. Informatics, 2019, no. 2 (224), pp. 58–65 (In Russian).
- Lidorenko N. S., Il'in B. I., Zajdenman I. A. *Vvedeniye v molekulyarnuyu elektroniku [Introduction to Molecular Electronics]*. Moscow, *Vysshaya shkola Publ.*, 1978. 448 p. (In Russian).
- Damaskin B. B. Petriy O. A. *Vvedeniye v elektrokhimicheskuyu elektrokinetiku [Introduction to electrochemical electrokinetics]*. Ed. by A. N. Frunkin. Moscow, *Vysshaya shkola Publ.*, 1975. 416 p. (In Russian).

### Информация об авторах

**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

**Карпович Дмитрий Семенович** – кандидат технических наук, доцент, заведующий кафедрой автоматизации производственных процессов и электротехники. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: karpovich@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

**Сухорукова Ирина Геннадьевна** – старший преподаватель кафедры программной инженерии. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: irina\_x@rambler.ru

**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.

**Чепурко Матвей Вячеславович** – студент. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: matvey.chepurko@gmail.com

#### **Information about the authors**

**Hryniuk Dzmitry Anatol'yevich** – 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

**Karpovich Dzmitry Anatol'yevich** – PhD (Engineering), Associate Professor, Head the Department of Automation of Production Processes and Electrical Engineering. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: karpovich@tut.by

**Oliferovich Nadezhda Mikhaylovna** – 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

**Suhorukova Irina Gennad'yevna** – Senior Lecturer, the Department of Software Engineering. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: irina\_x@rambler.ru

**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

**Chepurko Matvey Vyacheslavovich** – student. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: matvey.chepurko@gmail.com

*Поступила после доработки 15.11.2023*

УДК 681.62.06:620.178

**Е. В. Барковский, П. П. Урбанович**

Белорусский государственный технологический университет

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ИНФОРМАЦИОННОЙ СИСТЕМЫ  
ПОЛИГРАФИЧЕСКОГО ПРОИЗВОДСТВА В УСЛОВИЯХ ИЗНОСА  
ПОВЕРХНОСТИ МАТЕРИАЛОВ ПЕЧАТНОГО КОНТАКТА**

В статье представлена модель информационной системы управления полиграфической машиной в условиях износа поверхности материалов печатного контакта. Предлагаемая модель по сравнению с существующими включает в себя показатель износа поверхностей материалов печатного контакта и может быть использована в различных способах печати. Также рассмотрена структурная схема модели, которая включает основные элементы системы управления качеством печатной продукции и печатной формой. Модель позволяет учитывать то, что получение данных о состоянии поверхностей материалов печатного контакта и качества оттиска может осуществляться с помощью датчиков, которые представляют собой фотокамеры. Обработка получаемых снимков осуществляется использованием модуля анализа поверхностей материалов печатного контакта. Результаты анализа передаются в систему управления печатной машиной, в которой происходит регулирование подачи печатной краски. Конечным результатом анализа является функция износа, которая устанавливает изменение показателей качества печати в зависимости от тиража. Использование функции износа позволяет спрогнозировать появление брака и принять решение для оперативного регулирования настроек печатной машины.

**Ключевые слова:** информационная система, полиграфическое производство, печатное оборудование, печатный контакт, износ поверхности материала.

**Для цитирования:** Барковский Е. В., Урбанович П. П. Моделирование информационной системы полиграфического производства в условиях износа поверхности материалов печатного контакта // Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика. 2024. № 1 (278). С. 52–57. DOI: 10.52065/2520-6141-2024-278-8.

**E. V. Barkovskiy, P. P. Urbanovich**

Belarusian State Technological University

**MODELING OF THE PRINTING PRODUCTION INFORMATION SYSTEM  
UNDER WEAR CONDITIONS SURFACES OF PRINTED CONTACT MATERIALS**

The article presents a model of an information system for controlling a printing machine under conditions of wear on the surface of printed contact materials. The proposed model, in comparison with existing ones, includes an indicator of wear on the surfaces of printed contact materials and can be used in various printing methods. The structural diagram of the model, which includes the main elements of the quality management system for printed products and printed form, is also considered. The model allows us to take into account the fact that obtaining data on the state of the surfaces of printed contact materials and the quality of the print can be carried out using sensors, which are cameras. Processing of the resulting images is carried out using a module for analyzing the surfaces of printed contact materials. The results of the analysis are transmitted to the control system of the printing machine, in which the supply of printing ink is regulated. The final result of the analysis is the wear function, which determines the change in print quality indicators depending on the circulation. Using the wear function allows you to predict the occurrence of defects and make decisions to quickly adjust the settings of the printing machine.

**Keywords:** information system, printing production, printing equipment, printed contact, material surface wear.

**For citation:** Barkovskiy E. V., Urbanovich P. P. Modeling of the printing production information system under wear conditions the surfaces of printed contact materials. *Proceedings of BSTU, issue 3, Physics and Mathematics. Informatics*, 2024, no. 1 (278), pp. 52–57 (In Russian). DOI: 10.52065/2520-6141-2024-278-8.

**Введение.** В настоящее время развитие полиграфического производства сопровождается внедрением информационных технологий, позволяющих автоматизировать процессы изготовления печатной продукции, а также обеспечивать

контроль ее качества. Следует отметить, что большинство полиграфических систем, используемых на предприятиях Республики Беларусь, изготовлены и поставлены зарубежными фирмами. В силу известных ограничений существует проблема

обновления данных систем. Решение этой проблемы заключается в разработке отечественного программного обеспечения, которое должно быть адаптировано под базовые технологии управления качеством полиграфического производства для достижения конкурентных количественных и качественных результатов в условиях ограниченных инвестиционных ресурсов при минимизации издержек производства.

Полиграфическая система, как и любая иная техническая система, представляет собой совокупность элементов и связей между ними [1, 2]. Информационная же система оперирует информацией на основе использования средств ее сбора, обработки, передачи.

В полиграфическом производстве обработка данных происходит поэтапно с задействованием различных функциональных модулей системы. В основе практически всех систем управления полиграфическим производством лежат следующие модули: калькуляция заказа, планирование и диспетчеризация производства, взаиморасчеты с покупателями и поставщиками, учет склада материалов и готовой продукции. Представленные модули систем используются на этапе поступления заказа на производство и согласование условий изготовления печатной продукции с заказчиком.

Современные информационные системы управления технологическим процессом полиграфического производства также строятся по модульному принципу, то есть состоят из разного количества модулей, каждый из которых может быть усовершенствован с учетом текущих потребностей и имеющихся возможностей. Такие модули должны быть адаптированы под конкретные специфики функционирования той или иной типографии, так как технологический процесс зависит от вида выпускаемой продукции.

Благодаря модульности систем управления полиграфическим производством составные части системы, представляющие собой модули программного обеспечения, можно приобретать и внедрять поэтапно, что позволяет минимизировать затраты типографии [3].

Процесс управления печатным оборудованием включает в себя как ручное регулирование, выполняемое печатником, так и автоматическое регулирование в статическом или динамическом режиме работы печатной машины. Все сигналы управления преобразуются в систему цифровых кодов, записываются в память компьютерной системы, обрабатываются процессором и хранятся в протоколах соответствующей подсистемы. С использованием методов моделирования физических процессов в объектах управления и измерения параметров качества готовой продукции поступающие данные, которые необходимо

регулировать (подстраивать), сравниваются с соответствующими эталонными значениями [4].

В источниках [5–9] представлены модели взаимосвязи технологических процессов и бизнес-среды полиграфической отрасли и их структурные схемы. Модель системы в [7] представлена в виде графа состояний, формально задаваемого следующим выражением:

$$W = \langle L, P, M, I, N, X, S, C, IS \rangle, \quad (1)$$

где  $W$  – множество организационно-технологических операций системы;  $L$  – множество технологических процессов;  $P$  – основная линейка продуктов и/или услуг;  $M$  – множество рынков продуктов и/или услуг;  $I$  – множество банковских систем;  $N$  – множество дополнительных линеек продуктов;  $X$  – множество видов потерь системы;  $S$  – множество партнеров системы;  $C$  – клиенты;  $IS$  – множество функциональных операций в информационной системе.

В предлагаемой статье представлена модель системы информационной системы управления качеством, отличающаяся от существующей внедрением модуля для онлайн анализа износа поверхностей печатного контакта.

**Основная часть.** Модель (1) ориентирована на организацию производственного процесса с учетом экономических факторов, но не учитывает особенностей технологического процесса изготовления полиграфической продукции. Технологический процесс является основным в полиграфическом производстве и состоит из стадий допечатной, печатной и послепечатной подготовки выпуска продукции. В статье ниже будет анализироваться только информационная система, относящаяся к печатному процессу.

Печатный процесс состоит из операций подготовки оборудования к печати и получения оттисков с применением печатных форм, контрольных устройств, запечатываемых материалов и печатных красок. Печатные технологии определяют допечатные и послепечатные процессы, и их выбор зависит от параметров поступающего авторского оригинала, вида печатной продукции и тиража, а также качества применяемых запечатываемых материалов и красящих веществ. Если на стадии печатного процесса будет выявлено несоответствие печатной продукции установленным показателям качества, то она определяется как бракованная и не поступает на следующие стадии производства. С учетом сложности полиграфического производства из модели на основе (1) следует выделить технологический процесс, относящийся к множеству  $L$ . С учетом последнего обстоятельства предлагается следующая формальная модель информационной системы печатного процесса:

$$PS = \langle SM, T, PM, Q, PF, Ink \rangle, \quad (2)$$

где  $PS$  – параметры системы управления печатной машиной;  $SM$  – свойства поверхностей материалов печатного контакта;  $T$  – тираж,  $PM$  – характеристики печатной машины;  $Q$  – параметры системы измерений и контроля качества печати;  $PF$  – свойства печатной формы;  $Ink$  – свойства печатной краски.

Представленная на рис. 1 структурная схема информационной системы печатного процесса рассматривает взаимодействие различных элементов изготовления и контроля параметров качества полиграфической продукции, а также включает в себя решение по совершенствованию системы контроля качества, которое заключается в использовании модуля анализа поверхностей материалов печатного контакта. Для получения данных о состоянии поверхностей печатного контакта и качества получаемого изображения предлагается использовать датчики, которые устанавливаются на современных печатных машинах [7, 8]. К таким датчикам относятся денситометры и фотокамеры, которые позволяют получать снимок высокого разрешения растрового поля или штрихового элемента. Денситометры используются для считывания показателей качества с печатной формы и печатного оттиска (на рис. 1 обозначен как  $PI_m$ ), который получается на выходе печатной машины.

В предлагаемой модели элементы системы взаимосвязаны между собой и их также можно рассматривать как совокупность отдельных элементов. Например, свойства поверхностей материалов можно представить следующим образом:

$$SM = \langle S_p, S_f, S_b, S_m, W_s \rangle, \quad (3)$$

где  $S_p$  – свойства поверхности бумаги (запечатываемого материала);  $S_f$  – свойства поверхности печатной формы;  $S_b$  – свойства поверхности офсетного резинотканевого полотна;  $S_m$  – свойства поверхностей цилиндров печатной машины;  $W_s$  – показатель износа поверхностей материалов печатного контакта.

Параметры системы измерений и контроля качества печати следует рассматривать как совокупность алгоритмов, методов, показателей качества полиграфического производства и можно представить в следующем виде:

$$Q = \langle Al, PrM, PQ, W_s \rangle, \quad (4)$$

где  $Al$  – алгоритмы обработки данных;  $PrM$  – методы обработки данных;  $PQ$  – показатели качества печатного оттиска.

К показателям качества печатной продукции, которые контролируются во время печати и с учетом объема тиража изменяются, относятся оптическая плотность и относительная площадь растрового элемента. Оптическая плотность позволяет контролировать количество краски, нанесенной на печатный оттиск, и зависит от толщины красочного слоя и концентрации пигмента в краске. Показатель «относительная площадь растровых элементов» используется для оценки степени оптического растискивания. Механическое растискивание зависит от свойств краски, увлажнения печатной формы, характеристик офсетного резинотканевого полотна, количества подачи краски и характеристик поверхности запечатываемого материала. Причиной оптического растискивания является поглощение и рассеивание света в запечатываемом материале на границах растрового элемента.

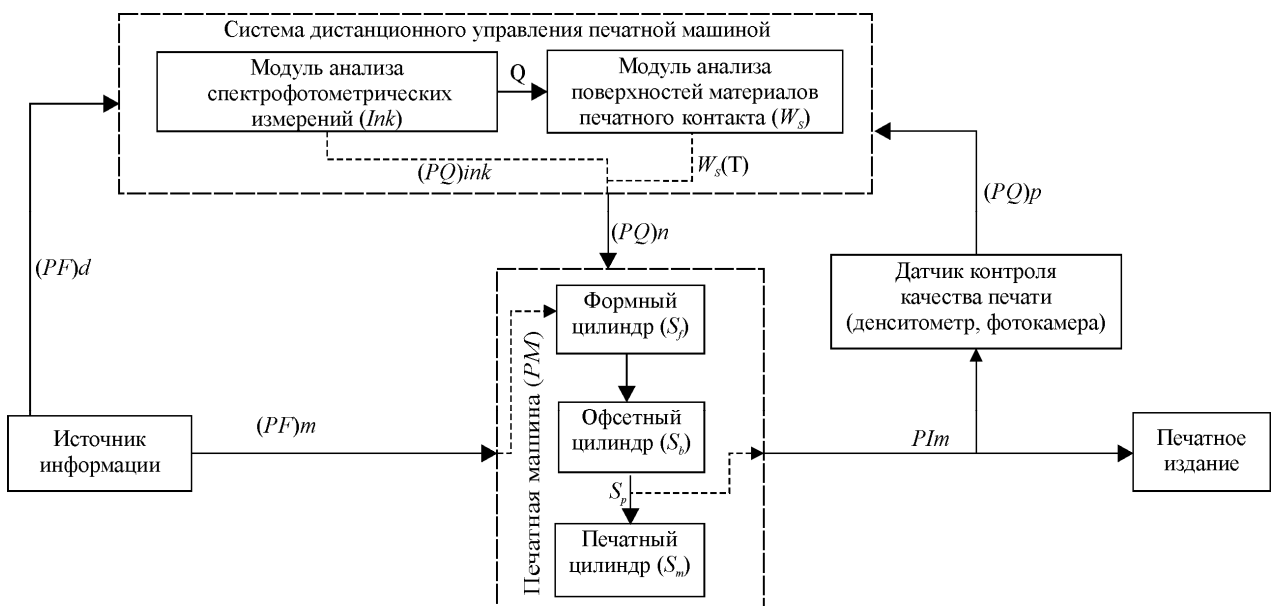


Рис. 1. Структурная схема информационной системы печатного процесса

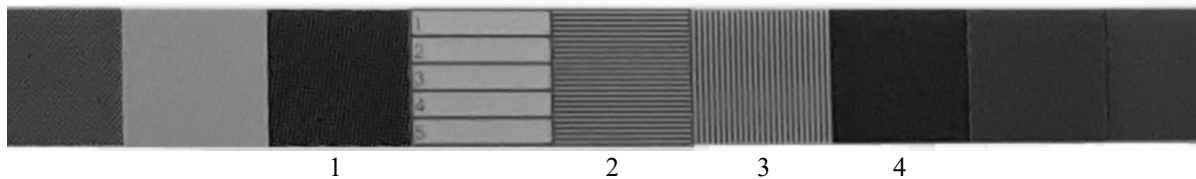


Рис. 2. Элементы шкалы оперативного контроля

Показатели качества считываются датчиком со шкалы оперативного контроля, которая содержит элементы, представленные на рис. 2. После считывания показателей печати они нормируются и подаются в виде сигнала установленной формы узлам печатной машины, отвечающим за осуществление процесса передачи краски на запекаемый материал. Элементы 1, 4 на рис. 2 соответствуют растровому полю с относительной площадью растровой точки, соответствующей 100 %, которая называется плашкой. Относительная площадь растрового элемента  $S_{отн}$  рассчитывается по формуле Шеберстова – Мюррея – Девиса [10] с введением поправочного коэффициента Юла – Нильсена [10] после считывания денситометром оптической плотности растрового поля  $D_R$ , не соответствующего 100%, и оптической плотности плашки  $D_S$ , которая описывается следующей формулой [10]:

$$S_{отн} = \frac{1 - 10^{-\frac{D_R}{n}}}{1 - 10^{-\frac{D_S}{n}}}, \quad (5)$$

где  $D_R$  – оптическая плотность растрового поля,  $D_S$  – оптическая плотность плашки;  $n$  – коэффициент Юла – Нильсена.

С учетом изложенного элемент  $PQ$  можно представить в следующем общем виде:

$$PQ = \langle S_{отн}, D_R, L_R, H, GB, F_r, R, \alpha_r \rangle, \quad (6)$$

где  $S_{отн}$  – относительная площадь растровой точки;  $L_R$  – линиятура растра;  $H$  – цветовой тон;  $GB$  – баланс по серому;  $F_r$  – форма растровой точки;  $\alpha_r$  – угол поворота растра;  $R$  – разрешающая способность

Печатная форма представляет собой носитель информации – монометаллическую пластину с негативным или позитивным копировальными слоями, нанесенными на тонкие алюминиевые подложки. Показатели, снимаемые с печатной формы для осуществления контроля качества печатной формы, представляют собой цифровой формат данных печатной формы, который можно формально представить в следующем виде:

$$(PF)_d = \langle PQ, W, V, t_{PF} \rangle, \quad (7)$$

где  $W$  – ширина печатной формы;  $V$  – высота печатной формы;  $t_{PF}$  – толщина печатной формы.

Элементы 2, 3 на рис. 2 используются для контроля скольжения и дробления в вертикальном и горизонтальном направлении и представляют собой штриховые линии, которые также могут быть использованы для контроля изменения геометрических размеров штриховых элементов.

Элемент  $T$  определяет количество экземпляров печатного издания одного названия и состоит из показателей, которые согласовываются до поступления в производство заказа с клиентом типографии. Данный показатель является временным и требуется для того, чтобы определить, в какой период времени может возникнуть бракованная продукция. Если представить выражение (3) как зависимость свойств поверхностей материалов от тиража, то оно будет иметь следующий вид:

$$SM(T) = \langle S_p(T), S_j(T), S_b(T), S_m(T), W_s(T) \rangle. \quad (8)$$

Элемент  $S_p(T)$  можно представить как совокупность основных свойств поверхности печатного контакта:

$$S_p(T) = \{R(T), h(T), m(T)\}, \quad (9)$$

где  $R(T)$  – показатели шероховатости;  $h(T)$  – толщина материала;  $m(T)$  – масса материала печатного контакта.

В зависимости от интенсивности изнашивания поверхностей материалов печатного контакта будут изменяться показатели шероховатости, толщина и будет иметь место потеря массы поверхностей материалов печатного контакта. Показатель износа поверхности будет включать в себя следующие параметры:

$$W_s(T) = \langle R(T), h(T), m(T), PQ(T) \rangle. \quad (10)$$

Процесс изнашивания материалов имеет характерные стадии: от 0 до  $T_1$  – стадия приработки, от  $T_1$  до  $T_2$  – стадия установившегося (нормального) износа, от  $T_2$  до  $T_{max}$  – стадия усиленного (катастрофического) износа. Получаемые изображения с помощью фотокамеры будут обрабатываться в модуле анализа поверхностей материалов печатного контакта алгоритмами нахождения границ растровых элементов и расстояния между этими границами. Результатом обработки изображения должны быть параметры  $T_1, T_2, T_{max}$ , которые определяются по зависимости показателя износа поверхностей материалов печатного контакта от тиража, общий вид которой представлен на рис. 3 [11].



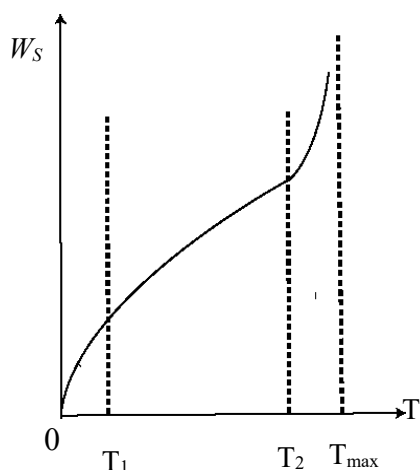


Рис. 3. Зависимость износа поверхностей материалов печатного контакта от тиража

По параметру  $T_{\max}$  можно определить максимально допустимое количество (тираж) получаемой продукции. Показатели качества должны находиться в пределах нормы на стадии установившегося износа. Данная стадия должна быть максимально продолжительной при изготовлении тиража, чтобы сохранить качество выпускаемой полиграфической продукции.

Элемент Ink в модели (2) представляет собой множество свойств и структурных элементов состава печатной краски. Согласно структурной схеме, влияние этого элемента будет определяться модулем анализа спектрофотометрических измерений, включающего математические операции колориметрического контроля и управления цветом.

Элемент PM включает в себя узлы печатной машины, к которым относятся цилиндры красочного, увлажняющего и печатного аппарата. Увлажняющий аппарат используется только в офсетном способе печати для предотвращения передачи краски на пробельные элементы. На печатной форме офсетного способа печати печатные элементы остаются невосприимчивыми к воде, а пробельные элементы, наоборот, удерживают воду на своей поверхности. Функцию нанесения воды на печатную форму выполняет система увлажняющего аппарата.

В современных печатных машинах стоят датчики, которые контролируют функционирование механизмов аппаратов. Система дистанционного управления печатной машиной, получая данные

от датчиков, производит расчет показателей качества, сравнение результатов со стандартами ISO 12647 [12, 13] и затем вырабатывает сигналы для настройки печатной машины под стандартизированные параметры.

Следует отметить, что существует возможность сохранения результатов регулирования печатной машины. Для этого используются модули системы архивирования и хранения статистических данных о заказе. Обработка статистических данных позволяет анализировать состояние поверхности офсетного полотна и возможность его дальнейшего использования для последующих заказов.

Изложенные в статье формальные представления элементов математической модели могут быть использованы при разработке необходимого программного обеспечения и его использования в технологическом процессе полиграфического производства.

**Заключение.** Рассмотрена модель информационной системы полиграфического производства на основе печатного процесса, включающая в себя модуль анализа износа поверхностей материалов печатного контакта, который обрабатывает данные, считываемые датчиком контроля качества печати. Результатом обработки этих данных явилась реальная зависимость с соответствующими параметрами ( $W_s$ ,  $T_1$ ,  $T_2$ ,  $T_{\max}$ ), общий вид которой представлен на рис. 2. Данная зависимость характеризует интенсивность изнашивания материалов при изготовлении печатной продукции и позволяет определить период установившегося износа и максимальный тираж, после которого может возникнуть ухудшение качества печати. В качестве датчика контроля качества печати следует использовать фотодатчик для измерения изменения геометрических размеров растровых точек и штриховых элементов, чтобы определять механическое растискивание.

Модель информационной системы может быть реализована в виде законченного программного продукта и внедрена в производство для анализа поверхностей материалов печатного контакта. Предварительно необходимо провести экспериментальные исследования для сбора статистических данных, учитывающих специфику работы системы управления полиграфическим предприятием.

#### Список литературы

1. Волкова В. Н., Козлова В. Н. Системный анализ и принятие решений. М.: Высшая школа, 2004. 616 с.
2. Волкова В. Н. Теория информационных систем. СПб.: СПбПУ, 2014. 300 с.
3. Самарин, Ю. Н. Автоматизация управления полиграфическим предприятием // КомпьюАрт. 2006. № 8. С. 50-53.
4. Шмаркова Л. И., Абрамешина А. А. Информационные системы управления полиграфическим предприятием // Научные записки ОрелГИЭТ. 2017. № 2. С. 35-40.
5. Кулак М. И., Ничипорович С. А., Медяк Д. М. Методы теории фракталов в технологической механике и процессах управления. Минск: Белорусская наука, 2007. 419 с.

6. Печатные системы фирмы Heidelberg. Листовые офсетные печатные машины / Л. Ф. Зирнзак [и др.]. М.: МГУП, 1998. 136 с.
7. Меняев М. Ф. Цифровые системы управления техническими процессами в полиграфии. М.: МГУП, 2006. 126 с.
8. Офсетные листовые печатные машины КБА / А. Перова [и др.]. М.: МГУП, 2006. 140 с.
9. Методы цифрового управления полиграфическими процессами / Е. В. Штефан [и др.] // *Технологія і техніка друкарства*, 2021. № 2. С. 54–63.
10. Синяк М. Еще раз о контроле // *КомпьюАрт*, 2004. № 9. С. 18–25
11. Крагельский И. В. Трение и износ. М.: Машиностроение, 1968. 478 с.
12. Технология полиграфии. Контроль процесса изготовления цифровых файлов, растровых цветоделений, пробных и тиражных оттисков. Ч. 1. Параметры и методы измерения: ГОСТ ИСО 12647-1–2017. М.: Стандартинформ, 2017. 22 с.
13. Graphic technology – Process control for the production of halftone colour separations, proof and production prints. Part 2. Offset lithographic process: ISO 12647-2:2013. Geneva: ISO, 2013. 24 p.

### References

1. Volkova V. N., Kozlova V. N. *Sistemnyy analiz i prinyatiye resheniy* [System analysis and decision making]. Minsk, Vysshaya shkola Publ., 2004. 616 p. (In Russian).
2. Volkova V. N. *Teoriya informatsionnykh system* [Information systems theory]. St. Petersburg, SPGPU Publ., 2014. 300 p. (In Russian).
3. Samarin Yu. N. Automation of management of a printing enterprise. *Komp'yutArt* [ComputerArt], 2006, no. 8, pp. 50–53 (In Russian).
4. Shmarkova L. I., Abrameshina A. A. Information management systems of the printing enterprise. *Nauchnye zapiski OrelGIET* [Scientific Journal of OrelSIET], 2017, no. 2, pp. 35–40 (In Russian).
5. Kulak M. I., Nichiporovich S. A., Medyak D. M. *Metody teorii fraktalov v tekhnologicheskoy mekhanike i protsessakh upravleniya* [Methods of fractal theory in technological mechanics and control processes]. Minsk, Belorusskaya nauka Publ., 2007. 419 p. (In Russian).
6. Zirnzak L. F., Leymont L. L., Samarin Yu. N., Shtolyakov V. I. *Pечатnyye sistemy firmy Heidelberg. Listovyye ofsetnyye pechatnyye mashiny* [Printing systems from Heidelberg. Sheet-fed offset printing machines.]. Moscow, MGUP Publ., 1998. 136 p. (In Russian).
7. Menyayev M. F. *Tsifrovyye sistemy upravleniya tekhnicheskimi protsessami v poligrafii* [Digital systems for managing technical processes in printing]. Moscow, MGUP Publ., 2006. 126 p. (In Russian).
8. Perova A., Shtolyakov V., Fedoseev A., Vartanyan S. *Ofsetnyye listovyye pechatnyye mashiny KBA* [Sheetfed offset printing machines KBA]. Moscow, MGUP Publ., 2006. 140 p. (In Russian).
9. Shtefan E. V., Roik T. A., Zorenko O. V., Shostachuk A. P. Methods of Digital Control of Printing Processes. *Tekhnologiya i tekhnika drukarstva* [Technology and Technique of Typography], 2021, no. 2, pp. 54–63, [https://doi.org/10.20535/2077-7264.2\(72\).2021.242474](https://doi.org/10.20535/2077-7264.2(72).2021.242474) (In Ukrainian).
10. Sinyak, M. Once again about control. *Komp'yutArt* [ComputerArt], 2004, no. 9, pp. 18–25 (In Russian).
11. Kragel'skiy I. V. *Treniye i iznos* [Friction and wear]. Moscow, Mashinostroeniye Publ., 1968. 478 p. (In Russian).
12. GOST ISO 12647-1–2017. Graphic technology. Process control for the production of half-tone colour separations, proof and production prints. Part 1. Parameters and measurement methods. Moscow, Standartinform Publ., 2017. 22 p. (In Russian).
13. ISO 12647-2:2013. Graphic technology – Process control for the production of halftone colour separations, proof and production prints. Part 2. Offset lithographic process. Geneva, ISO Publ., 2013. 24 p. (In English).

### Информация об авторах

**Барковский Евгений Валерьевич** – аспирант кафедры информационных систем и технологий. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: barkovski@belstu.by

**Урбанович Павел Павлович** – доктор технических наук, профессор. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: p.urbanovich@belstu.by

### Information about the authors

**Barkovskiy Evgeniy Valer'yevich** – PhD student, the Department of Information Systems and Technologies. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: barkovski@belstu.by

**Urbanovich Pavel Pavlovich** – DSc (Engineering), Professor, the Department of Information Systems and Technologies. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: p.urbanovich@belstu.by

*Поступила после доработки 16.01.2024*

УДК 004.032.26

**А. Н. Мушук**

Белорусский государственный технологический университет

**ПРОГНОЗИРОВАНИЕ КОЛИЧЕСТВА ПРОИСШЕСТВИЙ  
С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ НЕЙРОННОЙ СЕТИ  
НА ОСНОВЕ ФРЕЙМВОРКА KERAS**

В статье представлен процесс разработки архитектуры нейронной сети для прогнозирования количества происшествий на основе языка Python с использованием фреймворка Keras. Рассмотрен весь цикл проектирования подобных архитектур. Методика построения архитектуры включает несколько этапов: сбор, группировка и обработка данных с использованием соответствующих методов, формирование обучающей и тестовой выборки, подбор подходящей архитектуры сети с учетом специфических требований решаемой задачи прогнозирования. Далее осуществляется реализация, обучение и тестирование нейронной сети на независимом наборе данных для оценки производительности и точности. Проводится сравнительный анализ предложенной архитектуры с известными по критерию средней абсолютной ошибки.

**Ключевые слова:** нейронные сети, машинное обучение, Keras, долгая краткосрочная память.

**Для цитирования:** Мушук А. Н. Прогнозирование количества происшествий с использованием нейронной сети на основе фреймворка Keras // Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика. 2024. № 1 (278). С. 58–63.

DOI: 10.52065/2520-6141-2024-278-9.

**A. N. Mushchuk**

Belarusian State Technological University

**FORECASTING THE NUMBER OF INCIDENTS USING  
A NEURAL NETWORK BASED ON THE KERAS FRAMEWORK**

The article presents the process of developing a neural network architecture for predicting the number of incidents based on socio-economic indicators in Python using the Keras framework. The entire design cycle of such architectures is considered. The methodology for constructing an architecture includes several stages: collecting, grouping and processing data using appropriate methods, forming a training and test set, selecting a suitable network architecture taking into account the specific requirements of the forecasting problem being solved. Next, the neural network is implemented, trained, and tested on an independent data set to evaluate performance and accuracy. A comparative analysis of the proposed architecture with the known ones is carried out according to the criterion of mean absolute error.

**Keywords:** neural network, machine learning, Keras, long short-term memory.

**For citation:** Mushchuk A. N. Forecasting the number of incidents using a neural network based on the Keras framework. *Proceedings of BSTU, issue 3, Physics and Mathematics Informatics*, 2024, no. 1 (278), pp. 58–63 (In Russian).

DOI: 10.52065/2520-6141-2024-278-9.

**Введение.** Машинное обучение в настоящий момент используются во многих сферах жизнедеятельности человека для решения большого количества разных задач [1]. Это обусловлено их способностью к обучению на больших объемах данных и выявлению сложных зависимостей. Вот некоторые задачи, успешно решаемые при помощи алгоритмов машинного обучения.

Классификация объектов по категориям на основе их признаков. Данного вида задачи подразделяется на бинарные и многоклассовые. Примерами могут служить распознавание объектов на изображениях, классификация почтовых писем, определение категории товаров и пр. [2].

Алгоритмы машинного обучения широко применяются для обнаружения и отслеживания объектов на изображениях и видео. Это может

быть поиск лиц, транспортных средств, определение движущихся объектов и т. д. [3].

Все большую популярность приобретают алгоритмы, используемые для предоставления рекомендаций пользователям на основе их предыдущих действий и интересов, таких как рекомендации фильмов, музыки, товаров и др. [4].

Широкое применение машинное обучение получило для решения задач управления автономными системами и робототехникой, включая управление промышленными процессами, автопилотами, умными устройствами и пр. [5].

Также алгоритмы машинного обучения применяются для задач регрессии. Под регрессией подразумевается прогнозирование числовых значений на основе входных данных. Это может быть предсказание цен на акции, потребления энергии,

температурных изменений и др. [6]. Помимо этого, регрессия используется для прогнозирования социальных факторов и явлений. Следует понимать, что предсказания в рамках данной тематики в достаточной мере стихийны и не могут быть сведены к каким-либо математическим формулам или моделям. Из чего следует, что получение однозначного прогноза является сложной задачей. Однако есть множество примеров, которые говорят о том, что использование алгоритмов машинного обучения все же позволяет добиться приемлемой точности. Примерами такого рода исследований служат реализации нейронных сетей для прогнозирования ожидаемой продолжительности жизни [7], академической успеваемости [8], миграционных потоков [9], уровня преступности [10] и др.

Стоит подчеркнуть, что прогнозирование социальных явлений – задача, для решения которой требуется не только разработать нейронную сеть, но и понимать причины, влияющие на них.

Для задач предсказания используется довольно большое количество алгоритмов. Самыми распространенными являются линейная регрессия,  $k$ -ближайших соседей, случайный лес, многослойный перцептрон, рекуррентная нейронная сеть и ее модификации [11].

Независимо от выбора архитектуры процесс разработки будет включать в себя сбор информации, ее подготовку с учетом используемых функций, разделение входных данных на обучающую и тестовую выборки, реализацию алгоритма, обучение на подготовленных данных и проверку точности полученных результатов на тестовом наборе. При необходимости, по завершению всех этапов, делается реконфигурация настроек, а затем повторяются процессы обучения и проверки точности [12].

Большинство существующих регрессионных алгоритмов неприменимы для решения проблемы прогнозирования количества происшествий по социально-экономическим показателям стран, так как обрабатывают данные в соответствии с заложенной в них математической функцией. В то же время нейронные сети позволяют найти закономерность, при этом не сводя преобразование данных к линейной функции. Однако существующие архитектуры также нельзя использовать для решаемой проблемы. Причиной этому служит то, что каждая отдельная реализация нейронной сети отличается от других количеством входных данных, необходимой точностью расчетов, числом слоев и другими параметрами архитектуры нейронной сети.

Ниже рассмотрим процесс проектирования архитектуры и реализации прогнозирующей проишествия по социально-экономическим показателям нейронной сети, разработанной на языке

программирования *Python* с использованием фреймворка *Keras*.

**Основная часть.** Методика построения архитектуры нейронной сети включает в себя следующие этапы.

1. Сбор данных – это первейшая задача при разработке нейронных сетей. Для успешного прогноза необходимо собрать данные по значащим факторам. К таким относятся:

- исторические данные, представленные количеством, страной и годом произошедших инцидентов;

- социо-демографические показатели, представленные возрастной группой, численностью населения этой возрастной группы, полом, средним количеством лет на обучение и индексом развития человеческого потенциала;

- экономические показатели, представленные валовым внутренним продуктом;

- медицинские показатели, представленные статистикой психических расстройств в процентах от общего количества населения.

Сбор данных осуществляется из открытых источников (например *Kaggle*, сайт Всемирной организации здравоохранения и Всемирный банк данных).

2. Обработка данных. Для этого используются инструменты библиотек *Pandas* и *SkittLearn*. Первым этапом обработки является объединение всех данных в один набор. Для этого данные импортируются, после чего к ним применяется функция *merge* для объединения. Для слияния используется операция *Inner join*, поскольку потеря данных из-за отсутствия значений достаточно незначительна.

Следующим этапом является преобразование категориальных переменных в числовые значения. Категориальными переменными являются название страны, год, пол и возрастная группа. Для данного преобразования используется метод *get\_dummies* [13]. Он имеет один достаточно существенный минус: каждая категориальная переменная преобразуется в отдельный столбец, из чего следует, что при большом разнообразии значений получится большое количество столбцов. Так, из исходных 10 столбцов был получен 131.

Последний этап – преобразование значимых данных. Это необходимо для их сведения к единому виду с целью облегчить обучение. Видов преобразования достаточно много, самый универсальный и подходящий – это нормализация. Чаще всего для нормализации используются функции *StandartScaler* и *MinMaxScaler* [14]. *StandartScaler* подходит для ситуаций, когда значения могут быть как положительными, так и отрицательными. В данном же случае все значения строго положительные, поэтому использована функция *MinMaxScaler*. Итоговое значение каждого

входного параметра рассчитывается по следующей формуле:

$$X_s = \frac{X - X_{\min}}{X_{\max} - X_{\min}} (\max - \min) + \min, \quad (1)$$

где  $X$  – входной параметр;  $X_{\min}$  – минимальное значение параметра;  $X_{\max}$  – максимальное значение параметра;  $\max$  – предельный максимум, задаваемый при использовании функции;  $\min$  – предельный минимум, задаваемый при использовании функции.

Другими словами, *MinMaxScaler* нормализует значения в диапазон от  $\min$  до  $\max$ . Для данной нейронной сети диапазон будет иметь значения от 0 до 1 с точностью того же порядка, что и максимальное число.

3. Разделение нормализованных данных на обучающую и тестовую части. Для этой цели используется метод *train\_test\_split*, в который в качестве параметров передаются входные и выходные параметры, размер тестовой выборки в процентах от общего числа и целочисленная переменная *random\_state*, которая используется при рандомизации. Последняя необходима для однозначного воспроизведения случайных значений. Так, при многократном разделении данных, но неизменном *random\_state* на выходе будут получаться одинаковые выборки, что, в свою очередь, очень полезно при сравнении эффективности различных архитектур.

4. Выбор подходящей архитектуры. В зависимости от специфики предсказываемого значения для задач предсказания используются рекуррентные нейронные сети (RNN – Recurrent Neural Network) и их подвиды, метод случайного леса или комбинации различных слоев. Подходящим выбором будет архитектура долгой краткосрочной памяти (LSTM – Long Short-Term Memory), которая является подвидом RNN [12]. LSTM имеет ряд преимуществ:

- быстрая скорость обучения;
- использование результатов каждой итерации для обучения последующих;
- отсутствие проблемы исчезающих градиентов.

Для реализации нейронной сети используется фреймворк *Keras*, который дает возможность настройки типа и количества слоев, а также количества нейронов на каждом из них.

Перед тем как настраивать архитектуру, необходимо привести данные к корректному виду. Большинство архитектур на вход могут принимать данные в виде двумерного массива. Однако LSTM принимает на вход двумерный массив, где в ячейках содержатся также двумерные массивы. Для данного преобразования используем функцию *reshape*, в которую в качестве параметров передаются три: исходный двумерный массив,

единица, для указания того, что новый массив будет двумерным, и количество столбцов.

5. Реализация и настройка параметров нейронной сети. Экспериментальным путем было обнаружено, что оптимальной является сеть с четырьмя слоями, первые два из которых это, собственно, LSTM-слои, затем слой полносвязных нейронов, задача которых – скорректировать информацию, и последний – нейрон, объединяющий выходные данные в одно получаемое значение.

Для инициализации сети используется метод *Sequential*, после чего при помощи методов *add* в нее добавляются слои.

Первые два слоя добавляются с параметром LSTM, который, в свою очередь, является функцией со своими параметрами: количеством нейронов, формой ввода и функцией активации. Определить оптимальное количество нейронов можно лишь экспериментально, но в общем случае рекомендуется брать среднее значение количества входных и выходных параметров, при необходимости корректируя его. В данном случае экспериментально было установлено, что наиболее точный прогноз сеть выдает на значении 80 нейронов. Параметр формы ввода содержит в себе количество рассматриваемых в одну единицу времени срезов данных и число параметров в нем. Для данной сети одновременно рассматривается 1 срез со 131-м параметром.

Функции активации и повторной активации являются теми элементами нейрона, которые определяют, пойдут данные дальше по сети или нет [15]. Именно с ними сеть при обучении получала минимальное значение ошибки. Функция повторной активации осуществляет внутренние рекуррентные вычисления. Для обоих слоев функцией повторной активации является сигмоида, рассчитываемая по следующей формуле:

$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}}, \quad (2)$$

где  $e$  – экспонента (число Эйлера), а  $x$  – входное значение. Функция активации вычисляет конечный результат слоя. Функцией активации для LSTM-слоев является тангенсоида, рассчитываемая по следующей формуле:

$$f(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}}, \quad (3)$$

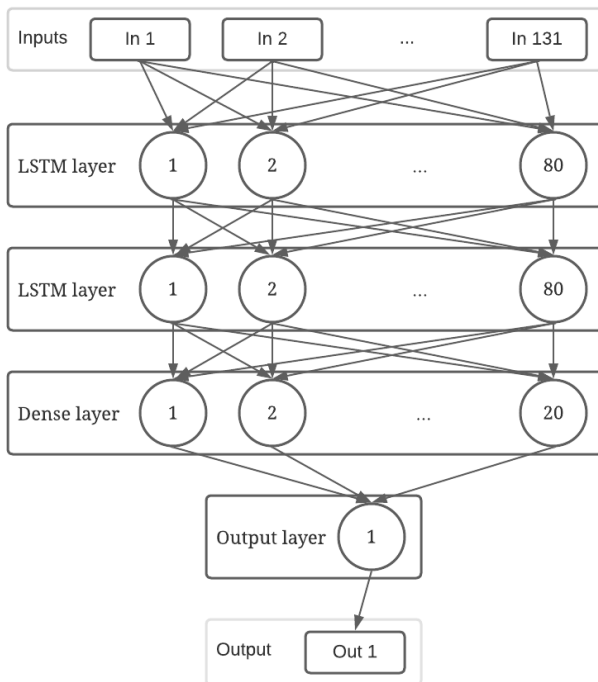
где  $e$  – экспонента (число Эйлера), а  $x$  – входное значение.

Отличие тангенсоиды от синусоиды в том, что синусоида более сглаженная. Из чего следует, что она дает больше возможностей для предварительной подгонки весов. В свою очередь тангенсоида необходима для распознавания сложных зависимостей в данных.

Следующий слой является полносвязным, определяемым при помощи функции *Dense*. Она содержит двадцать нейронов, а функцией активации является выпрямленная единица (ReLU), которая подает на выход либо 0, либо преобразованное внутри нейрона значение. Это имеет свои недостатки. В процессе обучения многие нейроны могут получить отрицательное значение, отключиться и в дальнейшем не использоваться на протяжении обучения. Поэтому данная функция активации используется на промежуточном слое, по сути, для отсеивания явно некорректных данных. Все функции активации были выбраны в результате экспериментов.

Последний слой является копией предыдущего, за исключением того, что в нем только один нейрон. Это необходимо для того, чтобы сеть давала на выход только одно значение.

Полученная архитектура сети представлена на рисунке.



Архитектура сети

Следующий шаг – это сборка сети. Она производится при помощи метода *compile*, в который передаются параметры о функции, подсчитывающей потери, оценщике и методе оптимизации. В качестве метода оптимизации был выбран алгоритм Адам со значением обновления весов 0.001 [15]. Данный метод взят в основном из-за того, что он дает наиболее существенный прирост производительности при незначительной потере точности. Функция потерь используется при корректировке весов модели на каждой итерации обучения. В данной сети используется среднеквадратическая ошибка (MSE – Mean

Squared Error), рассчитываемая по следующей формуле:

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y})^2, \quad (4)$$

где  $n$  – общее количество предсказанных значений;  $y_i$  –  $i$ -е возвращаемое значение;  $\hat{y}$  – среднее возвращаемых значений. В свою очередь, оценщик не влияет на обучение, а служит исключительно показателем того, насколько точные значения сеть предсказывает. В качестве оценщика взята функция средней абсолютной ошибки (MAE – Mean Absolute Error), рассчитываемая по следующей формуле:

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - x_i|, \quad (5)$$

где  $n$  – общее количество предсказанных значений;  $y_i$  – возвращаемое значение;  $x_i$  – тестовое значение.

Затем следует обучить модель, для чего вызывается метод *fit*, в который передаются в качестве параметров данные для обучения и сравнения и количество эпох обучения. Каждая эпоха представляет собой полный цикл обучения на всех тестовых данных. Главное, что следует помнить при установке данного параметра, это то, что в какой-то момент сеть достигает оптимальной точности, а в дальнейшем при прохождении каждой эпохи точность начинает изменяться как вниз, так и вверх. Соответственно, необходимо обнаружить, при каком значении это происходит, и указать его. Можно указать и большее значение, однако дополнительные циклы обучения уже не дадут существенного результата. В данной сети повышение точности прогноза перестает происходить приблизительно на 180-й эпохе, однако для надежности параметр установлен на значении 200.

После окончания обучения происходит тестирование разработанной сети. Для этого применяется ранее выделенная тестовая выборка. Используя метод *predict* с параметром в виде тестовых входных данных, получаем на выходе предсказанные данные, которые, в свою очередь, сравниваются с тестовым результатом.

Для того чтобы оценить эффективность полученной сети, было проведено ее сравнение с более классической реализацией, состоящей из одного LSTM-слоя с 60 нейронами и слоя из одного нейрона для выходящего значения, а также реализацией алгоритма случайного леса из библиотеки *SkittLearn*. Оценка проводилась по значению средней абсолютной ошибки десяти циклов обучения на случайно перемешанных данных. Значения средней абсолютной ошибки для каждой реализации представлены в таблице.

### Сравнение значений средней абсолютной ошибки

№	Реализованная сеть	LSTM с одним слоем	Алгоритм случайного леса
1	2,5813	3,9163	2,922
2	2,6718	3,5941	2,6938
3	2,669	3,8631	2,7279
4	2,6964	3,781	2,7665
5	2,5597	4,0208	2,4035
6	2,6508	3,8405	3,2644
7	2,6978	3,8022	2,7965
8	2,7274	3,9179	3,2066
9	2,695	3,7753	2,7722
10	2,6793	4,0544	2,9457

Среднее значение MAE для тестовых данных реализованной сети составило 2,6629. В свою очередь для однослойной LSTM и алгоритма случайного леса этот показатель составил 3,8566 и 2,8499 соответственно. Следовательно, реализованная сеть значительно лучше предсказывает результат, чем более классическая, и имеет небольшое преимущество в точности по сравнению с методом случайного леса. Однако стоит отметить, что реализованная сеть обучается дольше, чем аналоги.

### Список литературы

1. Tufail Sh., Riggs H., Tariq M., Sarwat A. I. Advancements and Challenges in Machine Learning: A Comprehensive Review of Models, Libraries, Applications, and Algorithms // *Electronics*. 2023. Vol. 12, no. 8. P. 1789. DOI: 10.3390/electronics12081789.
2. Распознавание подстилающей поверхности Земли с помощью сверточной нейронной сети на одноплатном микрокомпьютере / Д. А. Павленко [и др.] // *Информатика*. 2020. Т. 17, № 3. С. 36–43. DOI: 10.37661/1816-0301-2020-17-3-36-43.
3. Сорокина В. В., Абламейко С. В. Выделение отдельных участков тела человека на изображении с использованием нейронных сетей и модели внимания // *Журнал Белорусского государственного университета. Математика. Информатика*. 2022. Т. 2. С. 94–106. DOI: 10.33581/2520-6508-2022-2-94-106.
4. Portugal I., Alencar P., Cowan D. The use of machine learning algorithms in recommender systems: A systematic review // *Expert Systems with Applications*. 2018. Vol. 97. P. 205–227. DOI: 10.1016/j.eswa.2017.12.020.
5. О возможностях применения машинного обучения в системах управления освещением / С. В. Рослякова [и др.] // *Научный результат. Сер.: Информационные технологии*. 2021. Т. 6, № 4. С. 48–63. DOI: 10.18413/2518-1092-2021-6-4-0-7.
6. Regression Analysis for COVID-19 Infections and Deaths Based on Food Access and Health Issues / A. Almalki [et al.] // *Healthcare*. 2022. Vol. 10, no. 2. P. 324. DOI: 10.3390/healthcare10020324.
7. Life Expectancy: Prediction & Analysis using ML / V. Bali [et al.] // *ICRITO: 9th International Conference on Reliability, Infocom Technologies and Optimization (Trends and Future Directions)*. 2021. P. 1–8. DOI: 10.1109/ICRITO51393.2021.9596123.
8. Rajendran S., Chamundeswari S., Sinha A. Predicting the academic performance of middle-and high-school students using machine learning algorithms // *Social Sciences & Humanities Open*. 2022. Vol. 6, no. 1. P. 100357. DOI: 10.1016/j.ssaho.2022.100357.
9. Predicting the Income Groups and Number of Immigrants by Using Machine Learning (ML) / B. Aydemir [et al.] // *International Journal of Multidisciplinary Studies and Innovative Technologies*. 2022. Vol. 6, no. 2. P. 162–168. DOI: 10.36287/ijmsit.6.2.162.
10. Shah N., Bhagat N., Shah M. Crime forecasting: a machine learning and computer vision approach to crime prediction and prevention // *Visual Computing for Industry, Biomedicine, and Art*. 2021. Vol. 4. P. 1–14. DOI: 10.1186/s42492-021-00075-z.
11. Sarker I. Machine learning: Algorithms, real-world applications and research directions // *SN computer science*. 2021. Vol. 2, no. 3. P. 160. DOI: 10.1007/s42979-021-00592-x.

После оценки модели могут быть приняты дальнейшие шаги для улучшения ее эффективности. Это включает в себя расширение набора данных, изменение архитектуры сети, подбор оптимальных параметров или использование различных методик оптимизации.

**Заключение.** В данной статье описан весь процесс создания и реализации архитектуры прогнозирующей нейронной сети. Рассмотрены методы, используемые для нормализации входных данных, функции активации и формулы подсчета потерь. Представлена архитектура нейронной сети для решения задачи прогнозирования количества происшествий по социально-экономическим показателям стран.

Предложенная архитектура способна предсказывать значения с достаточно высокой точностью. В сравнении с известными архитектурами реализованная имеет меньшее значение средней абсолютной ошибки, но при этом тратит вдвое больше времени на обучение.

Разработанная модель может использоваться как по прямому назначению, так и как вспомогательный инструмент при развитии программ и мер по предотвращению происшествий.

12. Шолле Ф. Глубокое обучение на Python. СПб.: Питер, 2018. 400 с.
13. McKinney W. In Python for data analysis // O'Reilly Media. 2013. Issue 2. P. 207–209.
14. Орельен Ж. Прикладное машинное обучение с помощью Scikit-Learn и TensorFlow. СПб.: Альфа-книга, 2018. 684 с.
15. Goodfellow I., Bengio Y., Courville A. Deep Learning. Massachusetts: Massachusetts Institute of Technology, 2017. 804 с.

### References

1. Tufail Sh., Riggs H., Tariq M., Sarwat A. I. Advancements and Challenges in Machine Learning: A Comprehensive Review of Models, Libraries, Applications, and Algorithms *Electronics*, 2023, vol. 12, no. 8, p. 1789. DOI: 10.3390/electronics12081789.
2. Paulenka D. A., Kovalev V. A., Snezhko E. V., Liauchuk V. A., Pechkovsky E. I. Recognition of underlying surface using a convolutional neural network on a single-board computer. *Informatika* [Informatics], 2020, vol. 17, no. 3, pp. 36–43. DOI: 10.37661/1816-0301-2020-17-3-36-43 (In Russian).
3. Sorokina V. V., Ablameyko S. V. Detection of human body parts on the image using the neural networks and the attention model. *Zhurnal Belorusskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika. Informatika* [Journal of the Belarusian State University. Mathematics and Informatics], 2022, vol. 2, pp. 94–106. DOI: 10.33581/2520-6508-2022-2-94-106. (In Russian).
4. Portugal I., Alencar P., Cowan D. The use of machine learning algorithms in recommender systems: A systematic review. *Expert Systems with Application*, 2018, vol. 97, pp. 205–227. DOI: 10.1016/j.eswa.2017.12.020.
5. Roslyakova S., Bragina T., Zemlyanova E., Korotkova D., Merkulova P., Laushkina A., Filippov I. On the possibilities of applying machine learning in lighting control systems. *Nauchnyy rezul'tat. Ser.: Informatsionnyye tekhnologii* [Research result. Information technologies], 2021, vol. 6, no. 4, pp. 48–63 (In Russian). DOI: 10.18413/2518-1092-2021-6-4-0-7.
6. Almalki A., Gokaraju B., Acquaah Y., Turlapaty A. Regression Analysis for COVID-19 Infections and Deaths Based on Food Access and Health Issues. *Healthcare*, 2022, vol. 10, no. 2, p. 324. DOI: 10.3390/healthcare10020324
7. Bali V. [et al.]. Life Expectancy: Prediction & Analysis using ML. *ICRITO: 9th International Conference on Reliability, Infocom Technologies and Optimization (Trends and Future Directions)*, 2021. P. 1–8. DOI: 10.1109/ICRITO51393.2021.9596123.
8. Rajendran S., Chamundeswari S., Sinha A. Predicting the academic performance of middle-and high-school students using machine learning algorithms. *Social Sciences & Humanities Open*, 2022, vol. 6, no. 1, p. 100357. DOI: 10.1016/j.ssaho.2022.100357.
9. Aydemir B. [et al.]. Predicting the Income Groups and Number of Immigrants by Using Machine Learning (ML). *International Journal of Multidisciplinary Studies and Innovative Technologies*, 2022, vol. 6, no. 2, pp. 162–168. DOI: 10.36287/ijmsit.6.2.162.
10. Shah N., Bhagat N., Shah M. Crime forecasting: a machine learning and computer vision approach to crime prediction and prevention. *Visual Computing for Industry, Biomedicine, and Art*, 2021, vol. 4, pp. 1–14. DOI: 10.1186/s42492-021-00075-z.
11. Sarker I. Machine learning: Algorithms, real-world applications and research directions. *SN computer science*, 2021, vol. 2, no. 3, p. 160. DOI: 10.1007/s42979-021-00592-x.
12. Chollet F. *Glubokoye obucheniye na Python* [Deep Learning with Python]. St. Petersburg, Piter Publ., 2018. 400 p. (In Russian).
13. McKinney W. In Python for data analysis. *O'Reilly Media*, 2013, issue 2, pp. 207–209.
14. Aurelien J. *Prikladnoye mashinnoye obucheniye s pomoshch'yu Scikit-Learn i TensorFlow* [Applied machine learning with Scikit-Learn and TensorFlow]. St. Petersburg, Al'fa-kniga Publ., 2018. 684 p. (In Russian).
15. Goodfellow I., Bengio Y., Courville A. Deep Learning. Massachusetts, Massachusetts Institute of Technology Publ., 2017. 804 p.

### Информация об авторе

**Мушук Артур Николаевич** – магистрант кафедры программной инженерии. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: mushuk-artur@mail.ru

### Information about the author

**Mushchuk Artur Nikolaevich** – Master's degree student, the Department of Software Engineering. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: mushuk-artur@mail.ru

Поступила после доработки 09.02.2024



УДК 665.7:502.51:504.5

**А. В. Бурмакова**

Белорусский государственный технологический университет

**МОДЕЛЬ ЭКСПЕРТНОЙ СИСТЕМЫ ПОДДЕРЖКИ ПРИНЯТИЯ РЕШЕНИЯ  
О МЕТОДАХ РЕАБИЛИТАЦИИ ГЕОЛОГИЧЕСКОЙ СРЕДЫ,  
ЗАГРЯЗНЕННОЙ НЕФТЕПРОДУКТОМ**

В статье представлена формальная модель экспертной системы поддержки принятия решения о выборе методов реабилитации геологической среды, загрязненной нефтепродуктом в результате аварийного пролива. Основой экспертной системы является математическая модель распространения нефтепродукта в геологической среде. Формальная модель экспертной системы состоит из пяти блоков, которые поэтапно выполняет вычисление характеристик процесса распространения нефтепродукта и их индикаторов, классификацию состояния геологической среды и генерацию идентификаторов мероприятий, направленных на реабилитацию геологической среды. Формальная модель описывает экспертную систему, которая может быть использована для принятия оперативного решения о выборе средств и методов реабилитации геологической среды, а также для разработки упреждающих мероприятий.

**Ключевые слова:** формальная модель, экспертная система, системы поддержки решений, нефтепродукт, экология.

**Для цитирования:** Бурмакова А. В. Модель экспертной системы поддержки принятия решения о методах реабилитации геологической среды, загрязненной нефтепродуктом // Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика. 2024. № 1 (278). С. 64–69.

DOI: 10.52065/2520-6141-2024-278-10.

**A. V. Burmakova**

Belarusian State Technological University

**MODEL OF AN EXPERT SYSTEM TO SUPPORT DECISION MAKING  
OF REHABILITATION GEOLOGICAL ENVIRONMENT CONTAMINATED  
WITH PETROLEUM PRODUCT**

The article presents a formal model of an expert system for supporting decision-making on the choice of methods for rehabilitating the geological environment contaminated with oil products as a result of an emergency spill. The basis of the expert system is a mathematical model of the distribution of petroleum products in the geological environment. The formal model of the expert system consists of five blocks, which step by step calculate the characteristics of the oil product distribution process and their indicators, classify the state of the geological environment and generate identifiers of activities aimed at rehabilitating the geological environment. The formal model describes an expert system that can be used to make operational decisions on the choice of means and methods for rehabilitating the geological environment, as well as to develop proactive measures.

**Keywords:** formal model, expert system, decision support systems, petroleum product, ecology.

**For citation:** Burmakova A. V. Model of an expert system to support decision making of rehabilitation geological environment contaminated with petroleum product. *Proceedings of BSTU, issue 3, Physics and Mathematics. Informatics*, 2024, no. 1 (278), pp. 64–69 (In Russian).

DOI: 10.52065/2520-6141-2024-278-10.

**Введение.** В литературе [1, 2] описана математическая модель распространения нефтепродукта в геологической среде, позволяющая оценивать и прогнозировать ее состояние. Модель является комплексной и охватывает процессы растекания нефтепродукта по поверхности, испарения, вертикальное его проникновение в почву и грунт до уровня грунтовых вод, а также горизонтальное перемещение нефтепродукта вместе с грунтовыми водами. Математическая модель позволяет вычислить значения характеристик

процесса распространения нефтепродукта в геологической среде.

Оценки значений характеристик процесса распространения нефтепродукта в геологической среде могут быть применены при принятии оперативного решения о методах устранения последствий уже произошедшей аварии, а также для оценки последствий возможной аварии с целью подготовки упреждающего плана оперативных мероприятий по устранению последствий пролива нефтепродукта.

Формально модель распространения нефтепродукта в геологической среде описывается как четверка:

$$\Omega \equiv \langle \Pi, N, \Gamma, X \rangle, \quad (1)$$

где  $\Pi$  – параметры пролива;  $N$  – параметры нефтепродукта;  $\Gamma$  – параметры геологической среды;  $X$  – характеристики процесса распространения нефтепродукта в геологической среде.

Модель предусматривает 28 параметров и 24 вычисляемые характеристики процесса распространения нефтепродукта в геологической среде. Критически важными для принятия решения о выборе методов и средств реабилитации геологической среды являются: глубина проникновения нефтепродукта в почву и грунт, срок достижения нефтепродуктом уровня грунтовых вод, а также срок достижения фронтом нефтепродукта, перемещающегося с грунтовыми водами заданных точек.

Модель распространения нефтепродукта в геологической среде послужила основой экспертной системы поддержки принятия решения о выборе методов реабилитации геологической среды, загрязненной нефтепродуктом в результате аварийного пролива [3]. Опыт разработки экспертной системы позволил сформулировать общие принципы устройства таких систем, которые удобно описать в виде модели.

В статье рассматривается модель, формально описывающая структуру класса экспертных систем, предназначенных для выбора экологически эффективных методов реабилитации геологической среды, загрязненной в результате аварийного пролива нефтепродукта.

**Основная часть.** Формальная модель экспертной системы поддержки принятия решения о выборе методов реабилитации геологической среды может быть представлена в виде пятерки:

$$\Sigma \equiv \langle \Omega, \Lambda, I, K, \Phi \rangle, \quad (2)$$

где  $\Omega$  – модель процесса распространения нефтепродукта в геологической среде,  $\Lambda$  – система контролируемых значений характеристик процесса распространения нефтепродукта в геологической среде;  $I$  – система индикаторов характеристик процесса распространения нефтепродукта в геологической среде;  $K$  – система классификации состояния геологической среды;  $\Phi$  – механизм формирования перечня мероприятий для реабилитации геологической среды, загрязненной нефтепродуктом.

Контролируемые значения  $\Lambda$  характеристик процесса описываются двойкой:

$$\Lambda \equiv \langle X', \{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n\} \rangle, \quad (3)$$

где  $X' = \{\chi'_1, \chi'_2, \chi'_n\}$ ,  $X' \subseteq X$  – подмножество  $n = |X'|$  характеристик процесса;  $\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n\}$  –

множество контролируемых экспертной системой значений характеристик  $X'$  процесса распространения нефтепродукта в геологической среде, при этом величина  $\lambda_i = (l_i^1, l_i^2, \dots, l_i^{m_i})$  является вектором размерности  $m_i \geq 1$ , представляющим собой набор контролируемых числовых значений характеристики  $\chi'_i \in X', i = \overline{1, n}$ .

Система индикаторов  $I$  характеристик процесса распространения нефтепродукта в геологической среде описывается множеством функций:

$$I \equiv \{i_1(\chi'_1, \lambda_1), i_2(\chi'_2, \lambda_2), \dots, i_n(\chi'_n, \lambda_n)\}, \quad (4)$$

где  $\{i_1(\chi'_1, \lambda_1), i_2(\chi'_2, \lambda_2), \dots, i_n(\chi'_n, \lambda_n)\}$  – множество функций  $i_i(\chi'_i, \lambda_i), i = \overline{1, n}$  двух аргументов:  $\chi'_i \in X'$  – значение контролируемой характеристики процесса;  $\lambda_i$  – вектор контролируемых значений этой характеристики (формула (3)), при этом значение функции  $i_i(\chi'_i, \lambda_i)$  будем называть индикатором значения контролируемой характеристики  $\chi'_i \in X'$  процесса распространения нефтепродукта в геологической среде.

Система  $K$  классификации представлена в виде отображения:

$$K : (i_1, i_2, \dots, i_n) \rightarrow (k_1, k_2, \dots, k_m), \quad (5)$$

где в соответствие вектору  $(i_1, i_2, \dots, i_n)$ ,  $n = \overline{1, |X'|}$  значений индикаторов контролируемых характеристик  $X' = \{\chi'_1, \chi'_2, \chi'_n\}$  ставится вектор  $(k_1, k_2, \dots, k_m)$ ,  $1 \leq m \leq n$ , который будем называть классом состояния геологической среды.

Механизм  $\Phi$  формирования перечня мероприятий для реабилитации геологической среды, загрязненной пролитым нефтепродуктом, представлен в виде отображения

$$\Phi : (k_1, k_2, \dots, k_m) \rightarrow (\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_r), \quad (6)$$

ставящего в соответствие классу  $(k_1, k_2, \dots, k_m)$  состояния процесса вектор  $(\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_r)$ , представляющий собой упорядоченный перечень  $r$  идентификаторов мероприятий для реабилитации геологической среды, загрязненной пролитым нефтепродуктом.

На рисунке представлена схема вычислений в экспертной системе  $\Sigma$ . На схеме отображены четыре блока:  $\Omega$  – блок вычисления характеристик процесса распространения нефтепродукта в геологической среде;  $I$  – блок вычисления индикаторов характеристик процесса,  $K$  – блок классификации состояния геологической среды и  $\Phi$  – блок генерации последовательности идентификаторов мероприятий для реабилитации геологической среды, загрязненной нефтепродуктом. Входными данными системы  $\Sigma$  являются параметры математической модели  $\Omega$  распространения нефтепродукта в геологической среде ( $\Pi$  – параметры пролива,  $N$  – параметры нефтепродукта,  $\Gamma$  – параметры геологической среды) и  $\Lambda$  – контролируемые значения характеристик процесса.

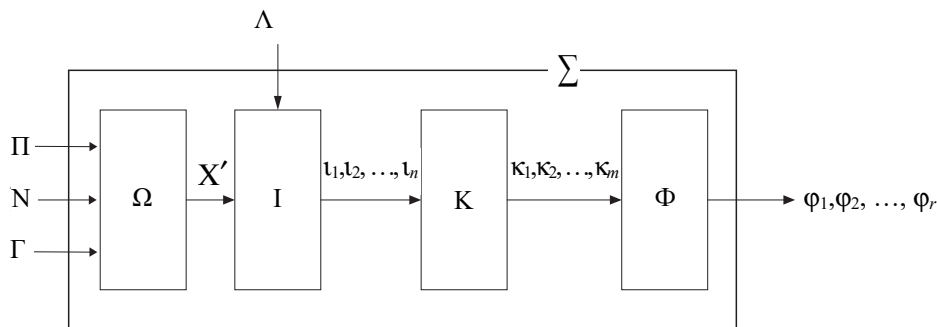


Схема вычислений в экспертной системе поддержки принятия решения о выборе методов реабилитации загрязненной нефтепродуктом геологической среды

Результатом работы экспертной системы является вектор  $(\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_r)$  идентификаторов мероприятий для реабилитации геологической среды, загрязненной нефтепродуктом.

Значения параметров модели поступают на вход блока  $\Omega$ , предназначенного для вычисления характеристик  $X'$  процесса распространения нефтепродукта в геологической среде. Подмножество  $X' \subseteq X$  вычисленных в блоке  $\Omega$  контролируемых характеристик процесса поступают в блок I, в котором на основе значений характеристик  $X'$  и контролируемых значений  $\Lambda$  вычисляются индикаторы  $(\iota_1, \iota_2, \dots, \iota_n)$  этих характеристик. Блок K предназначен для классификации состояния геологической среды. Классификация осуществляется на основе поступивших на вход блока индикаторов характеристик процесса распространения нефтепродукта. Результатом вычислений в блоке K является вектор  $(\kappa_1, \kappa_2, \dots, \kappa_m)$ , определяющий класс состояния геологической среды. Вектор  $(\kappa_1, \kappa_2, \dots, \kappa_m)$  поступает на вход блока  $\Phi$ , осуществляющего генерацию последовательности  $(\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_r)$  идентификаторов мероприятий для реабилитации геологической среды загрязненной нефтепродуктом.

Описание реализации экспертной системы [3] в соответствии с моделью экспертной системы  $\Sigma \equiv \langle \Omega, \Lambda, I, K, \Phi \rangle$  может быть представлена как пятерка:

$$\Sigma' \equiv \langle \Omega', \Lambda', I', K', \Phi' \rangle, \quad (7)$$

где  $\Sigma'$  – реализация модели  $\Sigma$  (формула (2)), а  $\Omega', \Lambda', I', K', \Phi'$  – реализации соответствующих компонентов  $\Omega, \Lambda, I, K, \Phi$  модели (3)–(6).

Реализация  $\Omega'$  модели  $\Omega$  может быть представлена в форме четверки:

$$\Omega' \equiv \langle P', N, \Gamma', X' \rangle, \quad (8)$$

где  $P' \subset P$  – подмножество параметров  $P$  пролива;  $N$  – параметры нефтепродукта;  $\Gamma' \subset \Gamma$  – подмножество параметров  $\Gamma$  геологической среды;  $X' \subset X$  – подмножество характеристик  $X$  процесса распространения нефтепродукта в геологической среде.

Параметры пролива  $P'$  в экспертной системе описываются четверкой:

$$P' \equiv \langle \Delta t, V_0, T_0^S, (x_0, y_0, z_0) \rangle, \quad (9)$$

где  $\Delta t$  – промежуток времени с момента пролива;  $T_0^S$  – средняя температура земной поверхности за промежуток времени  $\Delta t$ ;  $(x_0, y_0, z_0)$  – координаты центра пролива.

Параметры геологической среды  $\Gamma'$  в экспертной системе описываются четверкой:

$$\Gamma' \equiv \langle \Gamma'_1, \Gamma'_2, \Gamma'_3, \Gamma'_4 \rangle, \quad (10)$$

где  $\Gamma'_1 \equiv \langle d_1, \gamma_1 \rangle$  – параметры поверхности пролива ( $d_1$  – коэффициент растекания нефтепродукта по поверхности [4];  $\gamma_1$  – координаты точек окрестности пролива);  $\Gamma'_2 \equiv \langle \hat{T}_2, h_2, u_2 \rangle$  – параметры почвенного слоя ( $\hat{T}_2$  – нижняя граница среднего значения температуры поверхности пролива  $T_0^S$  за промежуток времени  $\Delta t$ , при котором осуществляется проникновение нефтепродукта в почву;  $h_2$  – высота почвенного слоя;  $u_2$  – нефтеемкость почвы [5]);  $\Gamma'_3 \equiv \langle h_3, \rho_3, m_3, w_3, k_{b,3}, r_3 \rangle$  – параметры грунтового слоя ( $h_3$  – высота грунтового слоя,  $\rho_3$  – средняя плотность грунта [6],  $m_3$  – пористость грунта,  $w_3$  – капиллярная влагоемкость грунта,  $k_{b,3}$  – коэффициент фильтрации воды в грунте [7],  $r_3$  – коэффициент задержки нефтепродукта в грунте) [8];  $\Gamma'_4 \equiv \langle h_4, \rho_4, m_4, w_4, k_{b,4}, r_4, \gamma_4 \rangle$  – параметры слоя грунтовых вод ( $h_4$  – высота слоя грунтовых вод,  $\rho_4$  – средняя плотность грунта,  $m_4$  – пористость грунта,  $w_4$  – капиллярная влагоемкость грунта,  $k_{b,4}$  – коэффициент фильтрации в слое грунтовых вод,  $r_4$  – коэффициент задержки нефтепродукта в слое грунтовых вод,  $\gamma_4$  – координаты точек на верхней границе слоя грунтовых вод).

Характеристики  $X'$  процесса распространения нефтепродукта в геологической среде, вычисляемые экспертной системой, описываются четверкой:

$$X' \equiv \langle X'_0, X'_1, X'_3, X'_4 \rangle, \quad (11)$$

где  $X'_0 \equiv \langle M_0 \rangle$  – исходные характеристики процесса ( $M_0$  – масса пролитого нефтепродукта);

$X'_1 \equiv \langle S_1, H_1, B_1 \rangle$  – характеристики поверхностного слоя ( $S_1$  – площадь поверхностного пятна пролива,  $H_1$  – толщина поверхностного пятна,  $B_1$  – координаты границ наземного пятна пролива);  $X_3 \equiv \langle M_3, \bar{C}_3, H_3, v_3 \rangle$  – характеристики грунтового слоя ( $M_3$  – масса нефтепродукта адсорбированного в грунте,  $\bar{M}_3$  – максимальная масса нефтепродукта, которая может быть задержана в грунте,  $C_3$  – концентрация нефтепродукта в почве,  $\bar{C}_3$  – максимальная концентрация нефтепродукта в грунте,  $H_3$  – максимальная глубина проникновения нефтепродукта в грунте,  $v_3$  – скорость вертикального проникновения нефтепродукта в грунте);  $X'_4 \equiv \langle C_4, \bar{M}_4, v_4, L_4 \rangle$  – характеристики слоя грунтовых вод ( $C_4$  – концентрация нефтепродукта в грунтовых водах,  $\bar{M}_4$  – максимальное значение массы нефтепродукта, которое может проникнуть в слой грунтовых вод,  $v_4$  – скорость горизонтального проникновения нефтепродукта в слое грунтовых вод,  $L_4$  – максимальное расстояние от края поверхностного пятна пролитого нефтепродукта до границы его распространения с грунтовыми водами).

Контролируемые значения  $\Lambda'$  характеристик процесса распространения нефтепродукта в геологической среде, применяемые в экспертной системе поддержки принятия решения о выборе методов реабилитации геологической среды, загрязненной нефтепродуктом в результате аварийного пролива, описываются двойкой:

$$\Lambda' \equiv \langle \{B_1, C_3, \bar{C}_3, H_3, C_4, L_4\}, \{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4, \lambda_5, \lambda_6\} \rangle \quad (12)$$

где  $\{B_1, C_3, \bar{C}_3, H_3, C_4, L_4\} \subset X$  – подмножество контролируемых характеристик процесса распространения нефтепродукта в геологической среде;  $\lambda_i, i = \bar{1}, \bar{6}$  – контрольные значения соответствующих характеристик:  $\lambda_1 = (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_k)$  – вектор контрольных значений для характеристики  $B_1$  (координаты границ наземного пятна пролива), где  $\theta_i(x_i, y_i)$  координаты  $k$  близлежащих природоохранных и водоохранных объектов, расположенных в радиусе  $3S_1 / 2\pi$  от центра пролива;  $\lambda_2 = \hat{C}_3$  – контрольное значение для характеристики  $C_3$  (концентрация нефтепродукта в грунтовом слое), где  $\hat{C}_3$  – предельно допустимая концентрация нефтепродукта в грунте;  $\lambda_3 = \hat{C}_3$  – контрольное значение для характеристики  $\bar{C}_3$  (максимально возможная концентрация нефтепродукта в грунтовом слое);  $\lambda_4 = h_3$  – контрольное значение для характеристики  $H_3$  (глубина проникновения нефтепродукта в грунт), где  $h_3$  – высота грунтового слоя;  $\lambda_5 = \hat{C}_4$  – контрольное значение для характеристики  $C_4$  (концентрация нефтепродукта на уровне грунтовых вод, где  $\hat{C}_4$  – предельно допустимая концентрация нефтепродукта на уровне грунтовых вод);

$\lambda_6 = (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_p)$  – вектор контрольных значений для характеристики  $L_4$  (максимальное возможное расстояние горизонтального распространения фронта нефтепродукта от границы наземного пятна), где  $\theta_i(x_i, y_i)$  координаты  $p$  близлежащих водоохранных объектов, расположенных в радиусе  $10S_1 / 2\pi$  от центра пролива.

Система индикаторов  $I'$  характеристик процесса распространения нефтепродукта в геологической среде описывается следующим множеством функций:  $v_1(B_1, (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_k))$  – функция для вычисления индикатора характеристики  $B_1$  (координаты границ наземного пятна пролива), функция зависит от двух аргументов:  $B_1$  – координаты границ наземного пятна пролива и координаты  $k$  близлежащих природоохранных и водоохранных объектов, расположенных в радиусе  $3S_1 / 2\pi$  от центра пролива; значением функции является целочисленное значение в пределах от 0 до  $k$ , равное количеству координат  $\theta_i(x_i, y_i)$ , расположенных в границах области ограниченной замкнутой ломаной  $B_1$ ;  $v_2(C_3, \hat{C}_3)$  – функция для вычисления индикатора характеристики  $C_3$  (концентрация нефтепродукта в грунтовом слое), функция принимает два аргумента:  $C_3$  – концентрация нефтепродукта в грунтовом слое,  $\hat{C}_3$  – предельно допустимая концентрация нефтепродукта в грунте; результатом функции является значение  $v_2 = C_3 / \hat{C}_3$ ;  $v_3(\bar{C}_3, \hat{C}_3)$  – функция для вычисления индикатора характеристики  $\bar{C}_3$  (максимально возможная концентрация нефтепродукта в грунтовом слое), функция принимает два аргумента:  $\bar{C}_3$  – максимально возможная концентрация нефтепродукта в грунтовом слое,  $\hat{C}_3$  – предельно допустимая концентрация нефтепродукта в грунте; результатом функции является значение  $v_3 = \bar{C}_3 / \hat{C}_3$ ;  $v_4(H_3, h_3)$  – функция для вычисления индикатора характеристики  $H_3$  (глубина проникновения нефтепродукта в грунтовом слое), функция зависит от двух аргументов:  $H_3$  – значение глубины проникновения нефтепродукта в грунтовый слой,  $h_3$  – высота грунтового слоя; результатом функции является значение

$$v_4 = \begin{cases} 0, & H_3 < h_3, \\ 1, & H_3 = h_3; \end{cases}$$

$v_5(C_4, \hat{C}_4)$  – функция для вычисления индикатора характеристики  $C_4$  (концентрация нефтепродукта на уровне грунтовых вод), функция принимает два значения:  $C_4$  – значение концентрации нефтепродукта на уровне грунтовых вод,  $\hat{C}_4$  – предельно допустимая концентрация

нефтепродукта на уровне грунтовых вод; результатом функции является значение  $v_5 = C_4 / C_4$ ;  $v_6(L_4, (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_p))$  – функция для вычисления индикатора характеристики  $L_4$  (максимальное возможное расстояние горизонтального распространения фронта нефтепродукта от границы наземного пятна), функция зависит от двух значений:  $L_4$  – значение максимально возможного расстояния горизонтального распространения фронта нефтепродукта от границы наземного пятна, координаты  $p$  близлежащих водоохраных объектов, расположенных в радиусе  $10S_1 / 2\pi$  от центра пролива; результатом функции является целочисленное значение в пределах от 0 до  $p$ , равное количеству координат  $\theta_i(x_i, y_i)$ , расположенных в радиусе  $L_4 + S_1 / 2\pi$  от центра пролива.

Система  $K'$  классификации в экспертной системе реализована в виде отображения:

$$K' : (v_1, v_2, v_3, v_4, v_5, v_6) \rightarrow (k_1, k_2, k_3, k_4, k_5, k_6), \quad k_i = v_i, \quad i = \overline{1, 6}. \quad (13)$$

Механизм  $\Phi'$  ( $k_1, k_2, k_3, k_4, k_5, k_6$ )  $\rightarrow$  ( $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_k$ ) формирования перечня  $k$  мероприятий для реабилитации геологической среды, отображающий класс состояния ( $k_1, k_2, k_3, k_4, k_5, k_6$ ) геологической среды на множество идентификаторов мероприятий ( $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_k$ ) основывается на алгоритме обхода ориентированного дерева [9]  $G = \langle V, E \rangle$  с множеством вер-

шин  $V = \{v_0, v_1, \dots, v_n\}$  и множеством дуг  $E = \{e_{i,j}\}$ ,  $i, j = \overline{1, n}$ , соединяющих вершины  $v_i$  и  $v_j$ .

**Заключение.** Главной особенностью представленной в статье формальной модели экспертной системы (2) является то, что результатом работы экспертных систем, реализующих эту модель, является не только оценка состояния загрязненной геологической среды, но и линейный алгоритм (результат работы блока  $\Phi$  на рисунке), описывающий технологию ее реабилитации.

Структурно предлагаемая модель экспертной системы состоит из пяти независимых компонент. При разработке экспертной системы в соответствии с предложенной моделью каждый компонент может быть реализован независимо друг от друга, так как функционирование любого компонента зависит только от входных параметров.

Последовательное выполнение первых трех блоков схемы (вычисление характеристик и индикаторов, классификации), изображенной на рисунке, направлены на последовательную структуризацию данных о состоянии геологической среды.

Следует также обратить внимание: при реализации экспертной системы на основе формальной модели значения векторов индикаторов совпадают с классами состояния геологической среды (13). Такой подход оправдан при низкой вариации значений вектора индикаторов.

### Список литературы

1. Бурмакова А. В., Смелов В. В., Захаров А. А. Реализация комплексной математической модели прогнозирования последствий аварийного пролива нефтепродуктов // Труды БГТУ. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика. 2018. № 1 (206). С. 82–87.
2. Бурмакова А. В., Ибрагим Ж. М., Смелов В. В. Применение экспертных оценок в комплексной математической модели прогнозирования последствий аварийного пролива нефтепродуктов // Труды БГТУ. Сер. 3, Физ.-мат. науки и информатика. 2018. № 2 (212). С. 96–100.
3. Смелов В. В., Оношко М. П., Захаров А. А. Экспертная система прогнозирования последствий пролива нефтепродуктов // Природопользование и экологические риски: материалы науч.-практ. конф., Минск, 5 июня 2019 г. Минск, 2019. С. 295–297.
4. Методика расчета минимальной оснащённости аварийно-спасательных служб (формирований) предназначенных для локализации и ликвидации разливов нефти и нефтепродуктов на территории Российской Федерации, на континентальном шельфе и в исключительной экономической зоне Российской Федерации: приложение № 1 к приказу № 613, от 21 августа 2000 г., МЧС Российской Федерации. С. 4–5, 39.
5. Белькова С. В. Определение ущерба окружающей среде при авариях на магистральных нефтепроводах. Омск: ОмГТУ, 2010. С. 14–18.
6. Гольдберг В. М., Газда С. Гидрогеологические основы охраны подземных вод от загрязнения. М.: Недра, 1984. 262 с.
7. Огнянник Н. С. Основы изучения загрязнения геологической среды легкими нефтепродуктами. Киев: А.П.Н., 2006. С. 278.
8. Михалева Т. А. Отчет о комплексной геолого-гидрогеологической и инженерно-геологической съемке масштаба 1:50 000 для целей мелиорации в водосборах рек Илии и Гайны (Плещеницкий участок). Минск: Ин-т геолог. наук, 1978–1980. Отчет 921.
9. Гладков Л. А., Курейчик В. В., Курейчик В. М. Дискретная математика / под ред. В. М. Курейчика. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2014. 496 с.

### References

1. Burmakova A. V., Smelov V. V., Zakharov A. A. Rehabilitation of the complex mathematical model of predicting the consequences of an emergency spill of oil products. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], issue 3, Physics and Mathematics. Informatics, 2018, no. 1 (206), pp. 82–87 (In Russian).
2. Burmakova A. V., Ibragim Zh. M., Smelov V. V. Defenition: Application of expert assessments in a complex mathematical model for predicting the consequences of an emergency spill of oil products. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], issue 3, Physics and Mathematics. Informatics, 2018, no. 2 (212), pp. 96–100 (In Russian).
3. Smelov V. V., Onoshko M. P., Zaharov A. A. Expert system for predicting the consequences of an oil spill. *Prirodopol'zovaniye i ekologicheskiye riski: materialy nauchno-prakticheskoy konferentsii* [Environmental management and environmental risks: materials of the scientific and practical conference]. Minsk, 2019, pp. 295–297 (In Russian).
4. Methodology for calculating the minimum equipment of rescue services (formations) intended for localization and liquidation of oil and oil products spills in the territory of the Russian Federation, on the continental shelf and in the exclusive economic zone of the Russian Federation: Appendix 1 to the Draft Order of the Ministry of Emergency Situations of the Russian Federation. 39 p. (In Russian).
5. Bel'kova S. V. *Opredeleniye ushcherba okruzhayushchey srede pri avariyaх na magistral'nykh nefteprovodakh* [Defenition: Determination of damage to the environment during accidents on main oil pipelines]. Omsk, OmGTU Publ., 2010, pp. 14–18 (In Russian).
6. Gol'dberg V. M., Gazda S. *Gidrogeologicheskiye osnovy okhrany podzemnykh vod ot zagryazneniya* [Defenition: Hydrogeological basis of protection of groundwater from pollution]. Moscow, Nedra Publ., 1984. P. 262 (In Russian).
7. Ognyanik N. S., Paramonova N. K., Briks A. L., Konnov P. V., Pashkovskiy I. S. *Osnovy izucheniya zagryazneniya geologicheskoy sredy legkimi nefteproduktami* [Fundamentals of studying the pollution of the geological environment with light oil products]. Kyiv, A.P.N. Publ., 2006. 278 p. (In Russian).
8. Mikhaleva T. A., Deruto G. V., Andrusenko N. Yu. *Otchet o kompleksnoy geologo-gidrogeologicheskoy i inzhenerno-geologicheskoy s"yemke masshtaba 1:50 000 dlya tseley melioratsii v vodosborakh rek Ilii i Gayny (Pleshchenitskiy uchastok)* [Report on a comprehensive geological and hydrogeological survey of a scale of 1:50 000 for the purposes of land reclamation in the watersheds of the rivers Iliya and Gayna (Pleshchenitskiy site)]. Minsk, In-t geolog. nauk Publ., 1978–1980. Report 921. RD RB 0212.1-98 (In Russian).
9. Gladkov L. A., Kureichik V. V., Kureichik V. M. *Diskretnaya matematika* [Discrete mathematics]. Ed. by V. M. Kureichik. Moscow, FIZMATLIT Publ., 2014. 496 p. (In Russian).

### Информация об авторе

**Бурмакова Анастасия Владимировна** – старший преподаватель кафедры информационных систем и технологий. Белорусский государственный технологический университет (220006, г. Минск, ул. Свердлова, 13а, Республика Беларусь). E-mail: burmakova@belstu.by

### Information about the author

**Burmakova Anastasyia Vladimirovna** – Senior Lecturer, the Department of Information Systems and Technologies. Belarusian State Technological University (13a, Sverdlova str., 220006, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: burmakova@belstu.by

Поступила после доработки 26.01.2024

# АЛГОРИТМИЗАЦИЯ И ПРОГРАММИРОВАНИЕ

## ALGORITHMIC AND PROGRAMMING

---

УДК 004.4–004.9

A. A. Prihozhy

Belarusian National Technical University

### DYNAMIC REDUCTION OF TIME COSTS ON IT-PROJECT BY FORMING TEAMS OF COMPATIBLE PROGRAMMERS

The combinatorial problem of forming programming teams has been studied in several works. The proposed techniques and algorithms for solving the problem account for various aspects and parameters of the software development process and programming teams' operation. The problem is NP-hard in general case. Accounting for compatibility of programmers leads to forming teams with increased efficiency of operation which reduces IT-project time costs. Our previous work researched how the compatibility of programmers influences the overall runtime of teams. This paper proposes a more accurate dynamic model of calculating the programmers' time costs changes during forming teams. At each adding of a programmer to a team, the model recalculates the time costs of the programmers and teams accounting for their compatibility. The advanced dynamic optimization algorithm of stepwise pairwise merging of teams developed in the paper aims to reduce the time costs of the project the programmers are working on. The created software and conducted computational experiments have shown the reduction in project time costs by tens of percent for large sets of programmers.

**Keywords:** programmer, project, time costs, compatibility of programmers, forming teams, optimization.

**For citation:** Prihozhy A. A. Dynamic reduction of time costs on IT-project by forming teams of compatible programmers. *Proceedings of BSTU, issue 3, Physics and Mathematics. Informatics*, 2024, no. 1 (278), pp. 70–76.

DOI: 10.52065/2520-6141-2024-278-11.

А. А. Прихожий

Белорусский национальный технический университет

### ДИНАМИЧЕСКОЕ СОКРАЩЕНИЕ ЗАТРАТ ВРЕМЕНИ НА ИТ-ПРОЕКТ ПУТЕМ ФОРМИРОВАНИЯ КОМАНД СОВМЕСТИМЫХ ПРОГРАММИСТОВ

Комбинаторная задача формирования команд программистов изучалась в ряде работ. Предложенные методы и алгоритмы решения задачи учитывают различные аспекты и параметры процесса разработки программного обеспечения и работы команд программистов. В общем случае задача является NP-трудной. Учет совместимости программистов приводит к формированию команд с повышенной эффективностью работы, что значительно сокращает временные затраты на ИТ-проект. Наши предыдущие работы исследовали, как совместимость программистов влияет на общее время работы команд. В данной работе предлагается более точная динамическая модель расчета изменения временных затрат программистов в процессе формирования команд. При каждом добавлении программиста в команду модель пересчитывает временные затраты программистов и команд с учетом их совместимости. Разработанный в статье алгоритм динамической оптимизации путем пошагового попарного слияния команд направлен на снижение временных затрат на проект, над которым работают программисты. Созданное программное обеспечение и проведенные вычислительные эксперименты показали снижение временных затрат на проект на десятки процентов при большом количестве участников проекта.

**Ключевые слова:** программист, проект, временные затраты, совместимость программистов, формирование команд, оптимизация.

**Для цитирования:** Прихожий А. А. Динамическое сокращение затрат времени на ИТ-проект путем формирования команд совместимых программистов // Труды БГТУ. Сер. 3. Физико-математические науки и информатика. 2024. № 1 (278). С. 70–76 (In English).

DOI: 10.52065/2520-6141-2024-278-11.

**Introduction.** The problem of forming programming teams and managing projects has been studied in works [1–10]. The problem is combinatorial and NP-hard in general case. Therefore, exact and heuristic algorithms have been developed for solving it for various objective functions and constraints. Work [11] has considered how the compatibility of programmers influences the overall runtime of teams and how the influence of programmers on each other can be used for reducing the project time costs. A matrix of compatibility of programmers has been proposed and a greedy algorithm of stepwise pairwise merge of teams has been developed at the aim of solving the problem of forming teams. The algorithm analyses and exploits programmers' compatibility to find the number, size and staff of the teams reducing the overall runtime.

In this paper, we propose a more accurate dynamic model of calculating changes in the time costs of programmers during forming teams, propose and implement an advanced optimization dynamic algorithm of stepwise pairwise merge of programming teams.

**Main part.** Let  $P = \{p_1, \dots, p_n\}$  be a set of  $n$  programmers working on an IT project. Vector  $t = (t_1, \dots, t_i, \dots, t_n)$  describes the programmers' basic time costs, which do not include interaction costs within team.

Let  $G = \{g_1 \dots g_k\}$  be a set of teams the programmers are allocated to. If programmers are in a same team, their time costs must be corrected depending on the compatibility of programmers. Matrix  $dP$  represents corrections (%) of the programmers' costs. In matrix principal diagonal,  $dP_{i,i} = t_i$ . For programmers  $i$  and  $j$ ,  $dP_{i,j}$  ( $dP_{j,i}$ ) shows how programmer  $i$  ( $j$ ) influences on  $t_j$  ( $t_i$ ). Values  $dP_{i,j}$  and  $dP_{j,i}$  can be negative and positive. Four combinations are possible: 1)  $dP_{i,j} < 0$  and  $dP_{j,i} < 0$ ; 2)  $dP_{i,j} \geq 0$  and  $dP_{j,i} \geq 0$ ; 3)  $dP_{i,j} < 0$  and  $dP_{j,i} \geq 0$ ; 4)  $dP_{i,j} \geq 0$  and  $dP_{j,i} < 0$ . The first combination is the most preferable since the time costs of both programmers are reduced.

In work [11], the changes in the programmers' time costs are calculated with  $dT_{i,j} = t_j \cdot dP_{i,j} / 100$  before allocating the programmers to a team and then are summed. A drawback of the approach is that for significant changes of programmers' time costs the overall costs can become negative. In this paper, we develop more accurate model for estimating the time costs changes. Every adding of a programmer to a team causes the recalculation of the costs using matrix  $TP$ .

$$TP = \begin{bmatrix} T_1 & d_{1,2} & \dots & d_{1,n} \\ d_{2,1} & T_2 & \dots & d_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ d_{n,1} & d_{n,2} & \dots & T_n \end{bmatrix}.$$

Initially,  $T_i = t_i$ ,  $i = 1 \dots n$ . The non-diagonal element  $d_{i,j} = 100 \cdot dP_{j,i}$  is a positive or negative share of  $T_j$  that is added to  $T_j$  if programmers  $i$  and  $j$  are

included in a same team:  $T_j = T_j + T_j \cdot d_{i,j}$ . According to the model, adding a new programmer to a team immediately changes the time costs of all programmers belonging to the team. The positive value of  $d_{i,j}$  makes larger the  $T_j$  costs, and the negative value makes them smaller. To reduce the time costs of team  $g$ , programmers with negative  $d_{i,j}$  should be included in the team first.

**Theorem 1.** Let  $u = u_1 \dots u_{|g|}$  be an order of including programmers in team  $g$ . The overall time costs  $T(g)$  of the programmers of team  $g$  is determined by (1).

$$T(g) = \sum_{p=u_1 \dots u_{|g|}} \left( T_p \cdot \prod_{\substack{j=u_1 \dots u_{|g|} \\ j \neq p}} (1 + d_{j,p}) \right). \quad (1)$$

**Proof.** Let's prove by induction that the time costs of programmer  $p$  from team  $h^k = \{u_1 \dots u_k\}$ ,  $k \leq |g|$  are determined by equation

$$T(p, h^k) = T_p \cdot \prod_{\substack{j=u_1 \dots u_k \\ j \neq p}} (1 + d_{j,p}). \quad (2)$$

*Base case.* Let a team of two programmers (shown in Fig. 1 by dark cells of matrix  $TP^{k-1}$ ) be  $h^2 = \{u_1, u_2\}$ . Then programmer  $u_2$  influences on the time costs of programmer  $u_1$  and, therefore,

$$T(u_1, h^2) = T_{u_1} \cdot (1 + d_{u_2, u_1}).$$

Similarly,

$$T(u_2, h^2) = T_{u_2} \cdot (1 + d_{u_1, u_2}).$$

The time costs of programmer  $j = u_3 \dots u_k$  who establishes a separate team are  $T_j$ .

*Induction step.* Suppose (2) holds for  $h^{k-1} = \{u_1 \dots u_{k-1}\}$  as shown by dark cells of dimension  $(k-1) \times (k-1)$  in Fig. 2 describing matrix  $TP^2$  for two teams. The costs of programmer  $u_k$  who is not in team  $h^{k-1}$  are  $T_{u_k}$ . If  $u_k$  is added to  $h^{k-1}$ , a team  $h^k$  is established (filled block of dimension  $k \times k$  in Fig. 3). Programmer  $u_k$  gets influence on the time costs of each of programmers  $u_1 \dots u_{k-1}$ . Therefore, their time costs are multiplied by factors  $(1 + d_{u_k, u_1}), \dots, (1 + d_{u_k, u_{k-1}})$  respectively, which is compliant with (2). In their turn, all the programmers get influence on the time costs of programmer  $u_k$  with factor  $(1 + d_{u_1, u_k}) \cdot \dots \cdot (1 + d_{u_{k-1}, u_k})$ . As a result, the time costs of programmer  $u_k$  are determined by (2).

The elements of principal diagonal of matrix  $TP^1$  shown in Fig. 3 prove that the time costs of all programmers included in a team are calculated with (2), and at  $k = |g|$  and  $h^k = g$ , the overall sum of the programmers' time costs is equal to  $T(g)$  defined by (1). The theorem is proved.

**Corollary 1.** The value of  $T(g)$  defined by (1) does not depend on the order of including programmers in team  $g$ .



$$TP^{k-1} = \begin{bmatrix} T_{u_1} \cdot (1 + d_{u_2, u_1}) & d_{u_1, u_2} & \cdots & d_{u_1, u_k} \\ d_{u_2, u_1} & T_{u_2} \cdot (1 + d_{u_1, u_2}) & \cdots & d_{u_2, u_k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ d_{u_k, u_1} & d_{u_k, u_2} & \cdots & T_{u_k} \end{bmatrix}$$

Fig. 1. Matrix  $TP^{k-2}$  of time costs of  $k$  programmers included in  $k - 1$  teams (two programmers are in the first team)

$$TP^2 = \begin{bmatrix} T_{u_1} \cdot \prod_{j=u_2 \dots u_{k-1}} (1 + d_{j, u_1}) & \cdots & d_{u_1, u_{k-1}} & d_{u_1, u_k} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ d_{u_{k-1}, u_1} & \cdots & T_{u_{k-1}} \cdot \prod_{j=u_1 \dots u_{k-2}} (1 + d_{j, u_{k-1}}) & d_{u_{k-1}, u_k} \\ d_{u_k, u_1} & \cdots & d_{u_k, u_{k-1}} & T_{u_k} \end{bmatrix}$$

Fig. 2. Matrix  $TP^2$  of time costs of  $k$  programmers included in 2 teams ( $k - 1$  programmer are in the first team)

$$TP^1 = \begin{bmatrix} T_{u_1} \cdot \prod_{j=u_2 \dots u_k} (1 + d_{j, u_1}) & \cdots & d_{u_1, u_{k-1}} & d_{u_1, u_k} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ d_{u_{k-1}, u_1} & \cdots & T_{u_{k-1}} \cdot \prod_{j=u_1 \dots u_k, j \neq u_{k-1}} (1 + d_{j, u_{k-1}}) & d_{u_{k-1}, u_k} \\ d_{u_k, u_1} & \cdots & d_{u_k, u_{k-1}} & T_{u_k} \cdot \prod_{j=u_2 \dots u_{k-1}} (1 + d_{j, u_k}) \end{bmatrix}$$

Fig. 3. Matrix  $TP^1$  of time costs of  $k$  programmers included in single team

**Proof.** Let  $u$  be a permutation that determines the order of including the programmers in team  $g$ . Let's reorder the programmers listed in  $u$  to obtain a permutation  $v$  such that  $v_j = j, j = 1 \dots |g|$ . To do this, we find element  $u_k = j$  and exchange it with element  $u_j$  for  $j = 1 \dots |g|$ . According to (2), the exchange does not change the value of  $T(p, g)$  for the elements of matrix  $TP^1$ 's principal diagonal (Fig. 3) since the multiplication operation used in expression  $(1 + d_{u_1, p}) \cdot \dots \cdot (1 + d_{u_k, p})$  is commutative and associative. Any permutation of the programmers can be replaced with  $v$ , therefore all of them yield the same value of  $T(p, g)$ . The corollary is proved.

Corollary 1 allows to rewrite (1) as

$$T(g) = \sum_{p \in g} \left( T_p \cdot \prod_{\substack{j \in g \\ j \neq p}} (1 + d_{j, p}) \right). \quad (3)$$

If  $d_{j, p}$  is negative, then  $(1 + d_{j, p}) < 1$ , therefore,  $T(p, g)$  is decreased. If  $d_{j, p}$  is positive, then  $(1 + d_{j, p}) > 1$ , therefore,  $T(p, g)$  is increased. The value of  $T(p, g)$  is smaller if the larger number of negative elements  $d_{j, p}$  are in the matrix.

The overall time costs of teams of set  $G$  are

$$T^G = \sum_{g \in G} T(g). \quad (4)$$

If  $\Omega$  is a set of all possible partitioning of set  $P$  of programmers into a set  $G$  of teams, the combinatorial optimization problem we solve is

$$\min_{G \in \Omega} T^G. \quad (5)$$

In the paper, we propose a dynamic greedy algorithm to solve (5) heuristically for large sets of programmers. Unlikely to [11], the algorithm recalculates time costs of programmers at every step of pairwise merge of teams.

The dynamic greedy algorithm of stepwise pairwise merge of teams (DGAMT) is described by Algorithm 1. The set  $P$  of programmers, vector  $t$  of programmers' basic time costs and matrix  $TP$  of pairwise changes of programmers' time costs are its inputs. The set  $G$  of teams and the overall time costs  $T^G$  are its outputs. DGAMT is derived from Theorem 1 and Corollary 1.

Performing initialization, the algorithm allocates each programmer  $p_i$  to team  $\{p_i\}$ . The teams' overall time costs  $T^G$  are the sum of  $t_i, i = 1 \dots n$ . Each element of two-dimensional array  $\Delta T$  is initialized by calculating a difference between  $T(g' \cup g'')$  and  $T(g') + T(g'')$  where  $g'$  and  $g''$  are teams-candidates for merging.

---

**Algorithm 1:** Dynamic greedy algorithm of stepwise pairwise merge of teams (*DGAMT*)

---

**Input:** A set  $P = \{p_1, \dots, p_n\}$  of programmers  
**Input:** A vector  $t = (t_1 \dots t_n)$  of programmers' basic time costs  
**Input:** A matrix  $TP[n \times n]$  of programmers' pairwise time costs changes  
**Output:** A set  $G$  of programming teams  
**Output:** A runtime  $Time(G)$  of programming teams  
 $G \leftarrow \emptyset$   $T^G \leftarrow 0$   $go \leftarrow true$   
**for**  $i \leftarrow 1$  **to**  $n$  **do**  
      $g_i \leftarrow \{p_i\}$   $T(g_i) \leftarrow t(p_i) \leftarrow t_i$   
      $G \leftarrow G \cup \{g_i\}$   $T^G \leftarrow T^G + t_i$   
**for**  $g' \in G$  **do**  
      $BestC(g').team \leftarrow undefined$   
      $BestC(g').\Delta T \leftarrow \infty$   
     **for**  $g'' \in G$  **do**  
          $T(g' \cup g'') \leftarrow TeamRuntime(P, t(p), TP, g', g'')$   
          $\Delta T(g', g'') \leftarrow T(g' \cup g'') - T(g') - T(g'')$   
          $\Delta T(g'', g') \leftarrow \Delta T(g', g'')$   
         **if**  $BestC(g').\Delta T > \Delta T(g', g'')$  **then**  
              $BestC(g').\Delta T \leftarrow \Delta T(g', g'')$   
              $BestC(g').team \leftarrow g''$   
**while** ( $go$ ) **do**  
      $go \leftarrow false$   
      $g' \leftarrow SelectBestPairOfTeams(G, BestC)$   
     **if**  $BestC(g').\Delta T < 0$  **then**  
          $go \leftarrow true$   
          $g'' \leftarrow BestC(g').team$   
          $g \leftarrow g' \cup g''$   
          $t \leftarrow UpdateProgrammerCosts(P, t, TP, g', g'')$   
          $T(g) \leftarrow T(g') + T(g'') + BestC(g').\Delta T$   
          $G \leftarrow (G \setminus \{g', g''\}) \cup \{g\}$   
          $T^G \leftarrow T^G + BestC(g').\Delta T$   
          $BestC(g).team \leftarrow undefined$   
          $BestC(g).\Delta T \leftarrow \infty$   
         **for**  $g^\# \in G \setminus \{g\}$  **do**  
              $T(g \cup g^\#) \leftarrow TeamRuntime(P, t(p), TP, g, g^\#)$   
              $\Delta T(g, g^\#) \leftarrow T(g \cup g^\#) - T(g) - T(g^\#)$   
              $\Delta T(g^\#, g) \leftarrow \Delta T(g, g^\#)$   
             **if**  $BestC(g).\Delta T > \Delta T(g, g^\#)$  **then**  
                  $BestC(g).\Delta T \leftarrow \Delta T(g, g^\#)$   
                  $BestC(g).team \leftarrow g^\#$   
             **if**  $BestC(g^\#).\Delta T > \Delta T(g^\#, g)$  **then**  
                  $BestC(g^\#).\Delta T \leftarrow \Delta T(g^\#, g)$   
                  $BestC(g^\#).team \leftarrow g$   
**return**  $G, Time(G)$

---

**Algorithm 2:** Calculating time costs of team formed by merging a pair of selected teams (*TeamRuntime*)

---

**Input:** A set  $P = \{p_1, \dots, p_n\}$  of programmers  
**Input:** A vector  $t(p) = (t(p_1) \dots t(p_n))$  of programmers' time costs in IT project  
**Input:** A matrix  $TP[n \times n]$  of pairwise changes of programmers' time costs

**Input:** Teams  $g'$  and  $g''$  selected for merging  
**Output:** Time costs  $T(g' \cup g'')$  of union of two teams  
 $T(g' \cup g'') \leftarrow 0$   
**for**  $v \in g'$  **do**  
      $t^*(v) \leftarrow t(v)$   
     **for**  $u \in g''$  **do**  
          $t^*(v) \leftarrow t^*(v) \cdot (1 + TP(u, v))$   
      $T(g' \cup g'') = T(g' \cup g'') + t^*(v)$   
**for**  $v \in g''$  **do**  
      $t^*(v) \leftarrow t(v)$   
     **for**  $u \in g'$  **do**  
          $t^*(v) \leftarrow t^*(v) \cdot (1 + TP(u, v))$   
      $T(g' \cup g'') = T(g' \cup g'') + t^*(v)$   
**return**  $T(g' \cup g'')$

---

Each element  $BestC(g')$  of vector  $BestC$  is initialized with  $BestC(g').team$  which is paired with  $g'$  and has maximal reduction  $BestC(g').\Delta T$  of time costs. Function *TeamRuntime* (Algorithm 2) calculates the time costs  $T(g)$  of team that is a result of merging  $g = g' \cup g''$ . At every iteration of the *while* loop, *DGAMT* calls function *SelectBestPairOfTeams* to choose a pair of teams  $g'$  and  $g''$  whose element in  $\Delta T$  is minimal. If all elements of  $\Delta T$  are not negative, the process of merging is over. Otherwise, the set  $G$  of teams is reconstructed: teams  $g'$  and  $g''$  are removed from  $G$  and team  $g = g' \cup g''$  is added to  $G$ . The time costs for each  $p$ ,  $g$  and  $G$  are calculated using (2), (3) and (4).

---

**Algorithm 3:** Calculating time costs of programmers of two teams to be merged (*UpdateProgrammerCosts*)

---

**Input:** A set  $P = \{p_1, \dots, p_n\}$  of programmers  
**Input:** A vector  $t(p) = (t(p_1) \dots t(p_n))$  of time costs  
**Input:** A matrix  $TP[n \times n]$  of pairwise changes of programmers' time costs  
**Input:** Teams  $g'$  and  $g''$  of programmers to be merged  
**Output:** An updated vector  $t(p)$  of time costs  
**for**  $v \in g'$  **do**  
     **for**  $u \in g''$  **do**  
          $t(v) \leftarrow t(v) \cdot (1 + TP(u, v))$   
**for**  $v \in g''$  **do**  
     **for**  $u \in g'$  **do**  
          $t(v) \leftarrow t(v) \cdot (1 + TP(u, v))$   
**return**  $t(p)$

---

For new team  $g$  and for each another team  $g^\# \in G$ , the value of  $\Delta T(g, g^\#)$  is calculated. This may cause updating elements of vector  $BestC$ . Function *UpdateProgrammerCosts* (Algorithm 3) updates using (2) the time costs of programmers from teams  $g'$  and  $g''$  that are intended to be merged.

*Example.* Let  $P = \{p_1 \dots p_8\}$  be a set of eight programmers. Vector  $t = (93, 15, 47, 45, 79, 92,$

67, 64) describes basic time costs of the programmers in a project. Fig. 4 gives matrix  $dP$  of programmers' pairwise time costs changes (%). The overall time costs of eight teams (one programmer per team) are 502.0. The overall time costs of the single team (it contains eight programmers) are 469.1 (6.6% less). Fig. 5 describes step 1 of  $DGAMT$ 's operation.

The rows and columns of matrix  $\Delta T$  correspond to eight teams of set  $G = \{\{p_1\}, \{p_2\}, \{p_3\}, \{p_4\}, \{p_5\}, \{p_6\}, \{p_7\}, \{p_8\}\}$ . Element  $\Delta T_{ij} = T(\{p_i, p_j\}) - T(\{p_i\}) - T(\{p_j\})$ ,  $i, j = 1 \dots 8$ ,  $i \neq j$ , is calculated using (3). Elements of vector  $t$  are in principal diagonal of  $\Delta T$ . The  $\Delta$  and  $team$  elements of components

of vector  $BestC$ 's are in the right column (Fig. 5). Since  $BestC(1)\Delta$  and  $BestC(8)\Delta$  have a minimum value of  $-13.22$ , teams  $\{p_1\}$  and  $\{p_8\}$  are selected for merging at step 2. Fig. 6 describes step 2 of  $DGAMT$ . Teams  $\{p_1\}$  and  $\{p_8\}$  are merged to  $\{p_1, p_8\}$ . The overall number of teams is reduced to seven.  $DGAMT$  removes two rows and two columns from matrix  $\Delta T$  corresponding to teams  $\{p_1\}$  and  $\{p_8\}$  and adds one row and one column for the new team  $\{p_1, p_8\}$ . Observing column  $BestC$ , we see that teams  $\{p_7\}$  and  $\{p_1, p_8\}$  give a maximum reduction  $-14.99$  of the time costs. They are selected for merging at step 3.

$$dP = \begin{bmatrix} 93 & 9.83 & 0 & -1.87 & 4.66 & 6.88 & -3.57 & -8.36 \\ 1.32 & 15 & 1.19 & 3.61 & -2.68 & -9.36 & 1.49 & -3.67 \\ -7.33 & -7.38 & 47 & -9.15 & -3.4 & 4.68 & -5.19 & 9.18 \\ -7.64 & 6.07 & 5.76 & 45 & -7.45 & 1.41 & 7.13 & -3.38 \\ -4.14 & -1.23 & 9.41 & -8.06 & 79 & 3.51 & -2.65 & 8.24 \\ 6.2 & 9.86 & 4.03 & -6.81 & 7.51 & 92 & 9.72 & -6.59 \\ -6.52 & 8.18 & 0 & 0 & -3.6 & 0 & 67 & -4.64 \\ -8.46 & -1.96 & -7.43 & -1.65 & -2.35 & -2.26 & -6.69 & 64 \end{bmatrix}$$

Fig. 4. Example matrix  $dP$  of programmers' pairwise time costs changes (%) after including in a same team

		Teams								Programmers	BestC	
		1	2	3	4	5	6	7	8		$\Delta$	team
$\Delta T =$	1	93	2.70	-6.82	-7.95	-0.17	12.09	-8.45	-13.22	{1}	-13.22	8
	2	2.70	15	-0.55	2.54	-2.30	-7.13	2.23	-2.64	{2}	-7.13	6
	3	-6.82	-0.55	47	-1.41	1.73	6.20	-3.48	2.39	{3}	-6.82	1
	4	-7.95	2.54	-1.41	45	-9.51	-1.77	4.78	-2.91	{4}	-9.51	5
	5	-0.17	-2.30	1.73	-9.51	79	9.17	-4.62	3.42	{5}	-9.51	4
	6	12.09	-7.13	6.20	-1.77	9.17	92	6.52	-6.30	{6}	-7.13	2
	7	-8.45	2.23	-3.48	4.78	-4.62	6.52	67	-7	{7}	-8.45	1
	8	-13.22	-2.64	2.39	-2.91	3.42	-6.30	-7.46	64	{8}	-13.22	1

Fig. 5. Step 1 of merging a pair of teams from  $G = \{\{1\}, \{2\}, \{3\}, \{4\}, \{5\}, \{6\}, \{7\}, \{8\}\}$  by  $DGAMT$

		Teams							Programmers	BestC	
		1	2	3	4	5	6	7		$\Delta$	team
$\Delta T =$	1	15.0	-0.55	2.54	-2.30	-7.13	2.23	0.12	{2}	-7.13	5
	2	-0.55	47.0	-1.41	1.73	6.20	-3.48	-4.35	{3}	-4.35	7
	3	2.54	-1.41	45.0	-9.51	-1.77	4.78	-10.06	{4}	-10.06	7
	4	-2.30	1.73	-9.51	79.0	9.17	-4.62	3.05	{5}	-9.51	3
	5	-7.13	6.20	-1.77	9.17	92.0	6.52	5.52	{6}	-7.13	1
	6	2.23	-3.48	4.78	-4.62	6.52	67.0	-14.99	{7}	-14.99	7
	7	0.12	-4.35	-10.06	3.05	5.52	-14.99	143.8	{1, 8}	-14.99	6

Fig. 6. Step 2 of merging a pair of teams from  $G = \{\{2\}, \{3\}, \{4\}, \{5\}, \{6\}, \{7\}, \{1, 8\}\}$  by  $DGAMT$

Stepwise merge of teams by *DGAMT* at seven steps

Step	Team count	Teams	Overall time costs	Pair of teams merged	Time costs reduction
1	8	{1}, {2}, {3}, {4}, {5}, {6}, {7}, {8}	502.0	{1} and {8}	-13.22
2	7	{2}, {3}, {4}, {5}, {6}, {7}, {1, 8}	488.8	{7} and {1, 8}	-14.99
3	6	{2}, {3}, {4}, {5}, {6}, {1, 7, 8}	473.8	{4} and {5}	-9.51
4	5	{2}, {3}, {4, 5}, {6}, {1, 7, 8}	464.3	{3} and {1, 7, 8}	-7.32
5	4	{2}, {4, 5}, {6}, {1, 3, 7, 8}	457.0	{2} and {6}	-7.13
6	3	{4, 5}, {2, 6}, {1, 3, 7, 8}	449.8	{4, 5} and {1, 3, 7, 8}	-5.00
7	2	{2, 6}, {1, 3, 4, 5, 7, 8}	444.8	-	24.45

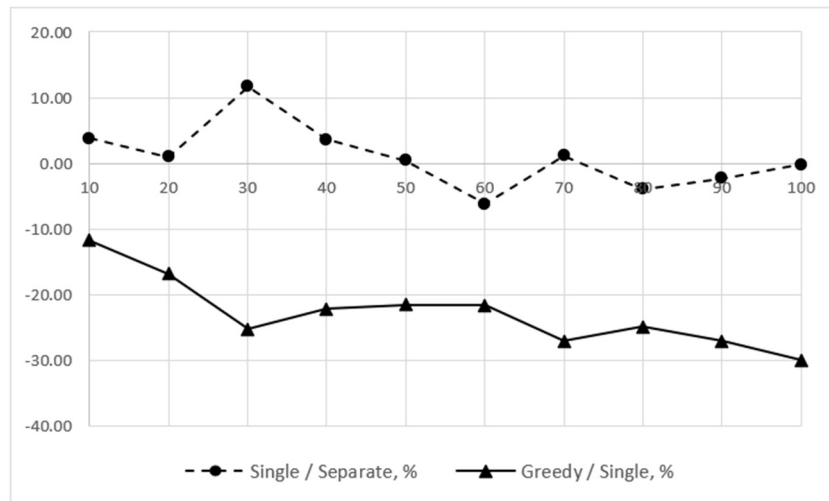


Fig. 7. Comparison of time costs (%) of single team with costs of one-programmer teams (triangles) and comparison of time costs (%) of dynamic greedy teams with costs of single team (diamonds) vs. programmer count

Table briefly describes 7 steps of *DGAMT*'s operation. The time costs have been monotonically reduced. At step 7, the minimum time costs reduction became positive, therefore, the merge is over. Finally, *DGAMT* has obtained two teams having the overall time costs of 444.8 (that is 11.4% less than the costs of eight initial teams).

**Results.** We have implemented *DGAMT* in the C++ language using Visual Studio 2022 under OS Windows 10. Experiments have been conducted on Intel Core i7-10700 CPU processor using various  $P$ ,  $t$  and  $dP$ . Fig. 7 compares the overall time costs of *one-programmer* teams, *single* teams and *dynamic greedy* teams obtained by *DGAMT* for sets of 10 to 100 programmers. Vector  $t$  and matrix  $dP$  (average value of element is 5%) were unique for each set of programmers. The time costs of single team differed

from those of one-programmer teams by  $-6.17\%$  to  $12.65\%$  depending on the compatibility of programmers. *DGAMT* have yielded greedy teams having time costs  $-11.75\%$  to  $-29.88\%$  lower against *single* teams.

**Conclusion.** In the paper, we have proposed an accurate model of calculating the IT project time costs which accounts for compatibility of programmers and updates the programmers' time costs at each adding of a programmer to a team. We have used the model for reducing the overall time costs by means of finding an appropriate number of teams, size, and staff of each team. The dynamic greedy algorithm of stepwise pairwise merge of teams realizes the model and shows high accuracy and efficiency while forming programming teams for working on an IT project.

## References

1. Rachlin, J. N., Goodwin, R. T., Murthy, S., Akkiraju, R., Wu, F., Kumaran, S., Das, R. A-Teams: An Agent Architecture for Optimization and Decision-Support. In: Müller, J. P., Rao, A. S., Singh, M. P. (eds). *Intelligent Agents V: Agents Theories, Architectures, and Languages. ATAL, 1998. Lecture Notes in Computer Science*. Berlin; Heidelberg, Springer, 1999, vol. 1555, pp. 1–15.
2. Britto R., Neto P. S., Rabelo R., Ayala W. and Soares T. A hybrid approach to solve the agile team allocation problem. *2012 IEEE Congress on Evolutionary Computation*, 2012, pp. 1–8.
3. Prihozhy A. A., Zhdanouski A. M. Genetic algorithm of allocating programmers to groups. *Nauka – obratovaniyu, proizvodstvu, ekonomike: materialy 13-y Mezhdunarodnoy nauchno-prakticheskoy konferentsii*

[Science to education, industry and economics: Proceedings of 13<sup>th</sup> international conference. Vol. 1]. Minsk, 2015, pp. 286–287 (In Russian).

4. Gutierrez J. H., Astudillo C. A., Ballesteros-Perez P., Mora-Melia D. and Candia-Vejar A. The multiple team formation problem using sociometry. *Computers and Operations Research*, 2016, vol. 75, pp. 150–162.
5. Masood Z., Hoda R., Blincoe K. Exploring Workflow Mechanisms and Task Allocation Strategies in Agile Software Teams. In: Baumeister H., Lichter H., Riebisch M. (eds). *Agile Processes in Software Engineering and Extreme Programming. XP 2017. Lecture Notes in Business Information Processing*. Springer, 2017, vol. 283, pp. 267–273.
6. Prihozhy A. A., Zhdanouski A. M. Method of qualification estimation and optimization of professional teams of programmers. *System analysis and applied information science*, 2018, no. 2, pp. 4–11 (In Russian).
7. Prihozhy A. A. Exact and greedy algorithms of allocating experts to maximum set of programmer teams. *System analysis and applied information science*, 2022, no. 1, pp. 40–46.
8. Prihozhy A., Zhdanouski A. Genetic algorithm of optimizing the size, staff and number of professional teams of programmers. *Open Semantic Technologies for Intelligent Systems*, Minsk, BSUIR Publ., 2019, pp. 305–310.
9. Prihozhy A. A., Zhdanouski A. M. Genetic algorithm of optimizing the qualification of programmer teams. *System analysis and applied information science*, 2020, no. 4, pp. 31–38.
10. Prihozhy A. A. Optimization of data allocation in hierarchical memory for blocked shortest paths algorithms. *System analysis and applied information science*, 2021, no. 3, pp. 40–50.
11. Prihozhy A. A. Optimization of programming teams on compatibility of programmers. *Trudy BGTU* [Proceedings of BSTU], issue 3, Physics and Mathematics. Informatics, 2023, no 2 (272), pp. 104–110.

#### Список литературы

1. A-Teams: An Agent Architecture for Optimization and Decision-Support / J. N. Rachlin [et al.] // *Intelligent Agents V: Agents Theories, Architectures, and Languages, ATAL 1998: Lecture Notes in Computer Science* / J. P. Müller, A. S. Rao, M. P. Singh (eds). Berlin; Heidelberg: Springer. 1999. Vol. 1555. P. 1–15.
2. A hybrid approach to solve the agile team allocation problem / R. Britto [et al.] // 2012 IEEE Congress on Evolutionary Computation. 2012. P. 1–8.
3. Прихожий А. А., Ждановский А. М. Генетический алгоритм разбиения коллектива программистов на группы // Наука – образованию, производству, экономике: материалы 13-й Междунар. науч.-практ. конф. Минск, 2015. Т. 1. С. 286–287.
4. The multiple team formation problem using sociometry / J. H. Gutierrez [et al.] // *Computers and Operations Research*. 2016. Vol. 75. P. 150–162.
5. Masood Z., Hoda R., Blincoe K. Exploring Workflow Mechanisms and Task Allocation Strategies in Agile Software Teams // *Agile Processes in Software Engineering and Extreme Programming. XP 2017: Lecture Notes in Business Information Processing* / H. Baumeister, H. Lichter, M. Riebisch (eds). Springer, 2017. Vol. 283. P. 267–273.
6. Прихожий А. А., Ждановский А. М. Метод оценки квалификации и оптимизация состава профессиональных групп программистов // *Системный анализ и прикладная информатика*. 2018. № 2. С. 4–11.
7. Prihozhy A. A. Exact and greedy algorithms of allocating experts to maximum set of programmer teams // *System analysis and applied information science*. 2022. No. 1. P. 40–46.
8. Prihozhy A., Zhdanouski A. Genetic algorithm of optimizing the size, staff and number of professional teams of programmers // *Open Semantic Technologies for Intelligent Systems*. Minsk, BSUIR, 2019. P. 305–310.
9. Prihozhy A. A., Zhdanouski A. M. Genetic algorithm of optimizing the qualification of programmer teams // *System analysis and applied information science*. 2020. No. 4. P. 31–38.
10. Prihozhy A. A. Optimization of data allocation in hierarchical memory for blocked shortest paths algorithms // *System analysis and applied information science*. 2021. No. 3. P. 40–50.
11. Prihozhy A. A. Optimization of programming teams on compatibility of programmers // *Труды БГТУ*. Сер. 3, Физико-математические науки и информатика. 2023. № 2 (272). С. 104–110.

#### Information about the author

**Prihozhy Anatoly Alexievich** – DSc (Engineering), Professor, Professor, the Department of Computer and System Software. Belarusian National Technical University (65, Nezalezhnasti Ave., 220013, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: prihozhy@yahoo.com

#### Информация об авторе

**Прихожий Анатолий Алексеевич** – доктор технических наук, профессор, профессор кафедры программного обеспечения информационных систем и технологий. Белорусский национальный технический университет (220013, г. Минск, пр. Независимости 65, Республика Беларусь). E-mail: prihozhy@yahoo.com

Received 07.12.2023

# СОДЕРЖАНИЕ

<b>ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ</b> .....	5
<b>МАТЕМАТИКА</b> .....	5
<b>Можей Н. П.</b> Нередуктивные однородные пространства неразрешимых групп Ли, не допускающие эквивалентных связностей .....	5
<b>Котов Д. С., Новиков Е. В., Котов С. Г.</b> Динамическое моделирование по гауссовой модели заражения первичным облаком в изменяющихся метеоусловиях .....	11
<b>МЕХАНИКА</b> .....	18
<b>Волк А. М., Вилькоцкий А. И., Янович С. В.</b> Газоцентрическое разделение крупнодисперсных суспензий .....	18
<b>ФИЗИКА</b> .....	26
<b>Шакель А. Ю., Мельник А. Д., Крук Н. Н.</b> Спектрально-люминесцентные свойства монодепротонированных форм гидрофильных катионных порфиринов и изучение возможности формирования их J-агрегатов .....	26
<b>Андрианов В. М., Королевич М. В., Шевченко А. А.</b> Полный расчет колебательного спектра молекулы 28-гомокастестерона (RR-конфигурация) в возможных конформациях .....	32
<b>Гладков Л. Л., Гладкова Г. А.</b> Расчет колебательных состояний Zn-хлорина методом функционала плотности .....	39
<b>ИНФОРМАТИКА И ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ</b> .....	43
<b>МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ И УПРАВЛЕНИЕ В ТЕХНИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ</b> .....	43
<b>Гринюк Д. А., Карпович Д. С., Олиферович Н. М., Сухорукова И. Г., Оробей И. О., Чепурко М. В.</b> Схема замещения электрокинетического преобразователя на сдвиговом потоке с переменным измерительным сигналом .....	43
<b>Барковский Е. В., Урбанович П. П.</b> Моделирование информационной системы полиграфического производства в условиях износа поверхности материалов печатного контакта .....	52
<b>Муцук А. Н.</b> Прогнозирование количества происшествий с использованием нейронной сети на основе фреймворка Keras .....	58
<b>Бурмакова А. В.</b> Модель экспертной системы поддержки принятия решения о методах реабилитации геологической среды, загрязненной нефтепродуктом .....	64
<b>АЛГОРИТМИЗАЦИЯ И ПРОГРАММИРОВАНИЕ</b> .....	70
<b>Prihozhy A. A.</b> Dynamic reduction of time costs on IT-project by forming teams of compatible programmers .....	70

# CONTENTS

<b>PHYSICAL AND MATHEMATICAL SCIENCES</b> .....	5
<b>MATHEMATICS</b> .....	5
<b>Mozhey N. P.</b> Non-reductive homogeneous spaces of unsolvable lie groups that do not admit equiaffine connections .....	5
<b>Kotov D. S., Novikov E. V., Kotov S. G.</b> Dynamic simulation using a gaussian infection model primary cloud in changing weather conditions .....	11
<b>MECHANICS</b> .....	18
<b>Volk A. M.</b> Gas-centrifugal separation of large-disperse suspensions.....	18
<b>PHYSICS</b> .....	26
<b>Shakel A. Yu., Melnik A. D., Kruk M. M.</b> Spectral-luminescent properties of monodeprotonated forms of hydrophylic cationic porphyrins and study of the possibility to form their J-aggregates .....	26
<b>Andrianov V. M., Korolevich M. V., Shevchenok A. A.</b> Complete calculation of the vibrational spectrum of the 28-homocastasterone molecule (RR-configuration) in possible conformations .....	32
<b>Gladkov L. L., Gladkova G. A.</b> DFT calculation of Zn-chlorine vibrational states.....	39
<b>COMPUTER SCIENCE AND ENGINEERING SCIENCES</b> .....	43
<b>MODELLING OF PROCESSES AND MANAGEMENT IN TECHNICAL SYSTEMS</b> .....	43
<b>Hryniuk D. A., Karpovich D. S., Oliferovich N. M., Suhorukova I. G., Orobei I. O., Chepurko M. V.</b> Substitution circuit of electrokinetic converter on shear flow with an alternative measurement signal.....	43
<b>Barkovskiy E. I., Urbanovich P. P.</b> Modeling of the printing production information system under wear conditions surfaces of printed contact materials .....	52
<b>Mushcuk A. N.</b> Forecasting the number of incidents using a neural network based on the Keras framework.....	58
<b>Burmakova A. V.</b> Model of an expert system to support decision making of rehabilitation geological environment contaminated with petroleum product .....	64
<b>ALGORITHMIC AND PROGRAMMING</b> .....	70
<b>Prihozhy A. A.</b> Dynamic reduction of time costs on IT-project by forming teams of compatible programmers .....	70

Редактор *Р. М. Рябая*  
Компьютерная верстка *Е. В. Ильченко, В. А. Маркушевская*  
Корректор *Р. М. Рябая*

Подписано в печать 15.03.2024. Формат 60×84<sup>1</sup>/<sub>8</sub>.  
Бумага офсетная. Гарнитура Таймс. Печать ризографическая.  
Усл. печ. л. 9,2. Уч.-изд. л. 9,9.  
Тираж 36 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.  
ЛП № 3820000001984.  
Ул. Свердлова, 13а, 220006, г. Минск.