УДК 66.046.1 Дата подачи статьи: 13.05.22, после доработки: 22.06.22
DOI: 10.15827/0236-235X.139.502-508 2022. Т. 35. № 3. С. 502–508

Разработка информационной системы расчета, накопления информации и паспортизации теплофизических свойств фосфоритов

В.А. Орехов [1], *ассистент, fundukoff@mail.ru*
В.И. Бобков [1], *д.т.н., зав. кафедрой, vovabobkoff@mail.ru*
С.В. Панченко [1], *д.т.н., профессор, tan_pan@inbox.ru*

[1] *Филиал Национального исследовательского университета «МЭИ» в г. Смоленске, г. Смоленск, 214013, Россия*

В работе предлагается создавать паспорта свойств фосфоритов, позволяющие сохранять в электронном виде экспериментальные температурные зависимости коэффициента теплопроводности материала при первом его нагреве и в отожженном состоянии, удельной истинной теплоемкости при первом и втором нагревах, эффективной теплоемкости при первом нагреве, относительного линейного расширения, электрической проводимости и плотности фосфатного материала при нагреве.

Для реализации такого паспорта свойств разработана информационная система, позволяющая осуществлять ввод и хранение данных о химическом составе и теплофизических и технологических свойствах образцов в цифровом виде, их поиск и обработку. Для доступа к данным и их обработки система использует технологию клиент–сервер. Расчет теплофизических свойств фосфоритов по структурным моделям учитывает иерархические свойства компонентов, составляющих фосфорит, их объемные и массовые доли. Данными для определения долей компонент служит минералогический состав материала.

Информационная система содержит программу расчета коэффициента теплопроводности и удельной теплоемкости. Она отличается учетом массовых и объемных долей основных породообразующих минералов. Система использует интерполяцию табличных температурных значений коэффициентов теплопроводности и удельных теплоемкостей фосфорита, карбоната и кремнезема для определения теплофизических свойств компонент при любой температуре. Коэффициент теплопроводности материала рассчитывается на базе комбинированной модели теплопроводности, учитывающей эндотермическую реакцию диссоциации карбонатов, а удельная теплоемкость – по аддитивной модели.

Разработан алгоритм для программы расчета теплофизических свойств по химическому составу фосфоритов.

Ключевые слова: *информационная система, алгоритм, теплопроводность, теплоемкость, структура, химический состав.*

Для проведения опытно-конструкторских и технологических расчетов аппаратов при термической переработке фосфорного сырья необходим полный набор теплофизических и технологических свойств фосфоритов, фосфатно-кремнистых разностей и сопутствующих пород. Существующие модели для расчета теплофизических свойств не могут в полной мере применяться для широкого диапазона температур химико-энерготехнологических процессов обжига фосфоросодержащего сырья, их использование возможно лишь с учетом значений коэффициентов теплопроводности и удельных теплоемкостей компонентов, к которым относятся фосфатизированные кремни, кремнистые, высококачественные и мономинеральные фосфориты [1, 2].

В частности, в работе [3] представлены математическая и компьютерная модели сложного химико-технологического процесса обжига как взаимозависимой совокупности трех процессов – сушки, прокалки и спекания движущейся плотной многослойной массы фосфоритовых окатышей в конвейерной обжиговой машине. Процесс отличается учетом интенсивности внутреннего влагопереноса в окатыше и переувлажнения отдельных горизонтов в нагреваемом слое окатышей, что позволяет определять технологические параметры режима обжига. Проведена проверка адекватности разработанной математической модели по результатам сравнительного анализа рассчитанных значений влагосодержания и температуры окатышей, характеристик газа-теплоносителя, а также значений интенсивности влагопереноса в окатышах при сушке в движущемся плотном слое с результатами промышленных испытаний. Проведены многочисленные вы-

числительные эксперименты по определению относительной степени высушивания, влагосодержания, интенсивности сушки окатышей и влагосодержания газа-теплоносителя при различных характеристиках сырых окатышей и параметрах технологического режима работы обжиговой машины.

Статья [4] посвящена содержательной и математической постановкам задачи оптимизации химико-энерготехнологического процесса обжига движущейся плотной многослойной массы фосфоритовых окатышей в сложной химико-энерготехнологической системе конвейерной обжиговой машины как задачи дискретного динамического программирования, отличающейся учетом пространственно-временной многостадийности процессов обжига движущейся многослойной массы окатышей, интенсивности процесса внутреннего влагопереноса в окатыше, процессов переувлажнения отдельных слоев окатышей и переменных управляющего потока газа-теплоносителя, что позволяет повышать энергоэффективность посредством интенсификации тепло-массообменных процессов многослойной сушки, прокалки и спекания. Критерием эффективности служит минимум себестоимости электрической и тепловой энергии, затрачиваемой на обжиг. Полученные результаты использовались для расчета энергоэффективного обжига окатышей в обжиговой конвейерной машине. Установлено, что в оптимальном режиме многослойного обжига окатышей отсутствует зона переувлажнения, интенсифицируются процессы тепло-влагопереноса, снижается расход энергии и повышается качество готового продукта. Исследована проблема переувлажнения окатышей в отдельных горизонтах слоя в зоне сушки обжиговой машины. Решена актуальная научно-практическая задача энергоресурсосбережения при обжиге окомкованного рудного сырья в плотном слое. Представлены математическая модель тепломассообмена в слое окатышей и проверка ее адекватности. Решена задача оптимизации энергозатрат на основе интенсификации процессов обжига.

Таким образом, разработка информационной системы расчета, накопления информации и паспортизации теплофизических свойств фосфоритов при высокотемпературном нагреве весьма актуальна и требует дальнейшего развития как математических моделей, так и информационных структур вследствие изменения структуры реагирующего материала и иерархии компонент в результате реакции диссоциации доломита при нагреве [5, 6].

Методика и программа расчета теплофизических свойств по химическому составу фосфоритов

Для расчета теплофизических свойств фосфоритов по структурным моделям, кроме свойств составляющих, необходимо знать объемные и массовые доли компонент, входящих в материал [7, 8]. Для их определения необходимо исходить из минералогического состава или в худшем случае химического анализа материала [9, 10].

Обычно химический состав фосфоритов определяется по процентному содержанию простейших окислов, среди которых P_2O_5, MgO, CO_2, SiO_2, Al_2O_3, K_2O, Ma_2O, Fe_2O_3, FeO.

Учитывая, что основная масса фосфоритов представлена фосфатным веществом – фторкарбонатапатитом, карбонатным веществом – доломитом и кальцитом, кремнистым веществом – кварцем и халцедоном и различными примесями, используя реакции неполного разложения

– фторкарбонатапатита ($2Ca_{10}P_5CO_{23}F_3R_x \rightarrow 20CaO+5P_2O_5+2CO_2+6F+R_xO_2$);

– доломита ($CaMg(CO_3)_2 \rightarrow CaO+MgO+2CO_2$);

– кальцита ($CaCO_3 \rightarrow CaO+CO_2$)

и неизменность нерастворимого остатка SiO_2, можно рассчитать массовые доли основных минералов [11, 12].

Массовая доля определится для фосфорита $g_ф = 2.79c_{P_2O_5}$, доломита – $g_д = 4.6c_{MgO}$, кальцита – $g_к = 1.79\,(c_{CaO} - 1.58c_{P_2O_5} - c_{MgO})$, кремнезема – $g_{кр} = c\,SiO_2$, примесей – $g_{пр} = 1 - g_ф - g_д - g_к - g_{кр}$, где c_i – относительное содержание окислов, полученное из химического анализа фосфорита. С учетом определенных массовых долей и кажущихся плотностей основных компонент можно определить объемные доли составляющих: $m_i = g_i\rho_i$, где m_i – объемная доля компонента; g_i – массовая доля компонента; ρ_i – кажущаяся плотность компонента.

Для расчета коэффициента теплопроводности λ и удельной теплоемкости ρC_p была составлена программа, в которой рассчитываются массовые и объемные доли основных породообразующих минералов. Путем интерполяции табличных температурных зависимостей коэффициентов теплопроводности и удельных теплоемкостей фосфорита, карбоната и кремнезема определяются теплофизические свойства компонент при любой температуре [13].

Для расчета коэффициента теплопроводности материала с учетом реакции диссоциации карбонатов использовалась комбинированная модель теплопроводности, а для расчета удельной теплоемкости – аддитивная модель [14].

Разработан алгоритм программы расчета теплофизических свойств по химическому составу фосфоритов, включающий ввод химического состава, расчет минерального состава, расчет массовых и объемных долей, цикл по i для расчета теплоемкостей при заданной температуре T, обращение к подпрограмме ИНТЕРПОЛЯЦИЯ, расчет теплоемкости фосфорита, расчет теплопроводности составляющих при заданной температуре T, выбор модели по анализу структуры, подбор типа цемента, расчет теплопроводности материала (рис. 1).

Предлагаемая методика, использующая комбинированную модель теплопроводности, учитывающая реакции диссоциации карбонатов, и разработанный алгоритм встраиваются в информационную систему.

БД информационной системы

Хранение данных информационной системы на магнитных носителях и обеспечение доступа к ним осуществляются с использованием SQL-сервера БД Firebird. С его помощью реализована реляционная БД системы, хранящая всю необходимую информацию и процедуры обработки данных.

Применение этого подхода обеспечивает:

– возможность доступа к данным неограниченного числа пользователей;

– высокую производительность при поиске и обработке данных;

– отсутствие необходимости в сетевых каналах с высокой пропускной способностью;

– высокую надежность сохранности данных;

– возможность использования различных программно-аппаратных платформ для хранения данных;

– низкую стоимость системы по причине использования бесплатного сервера Firebird.

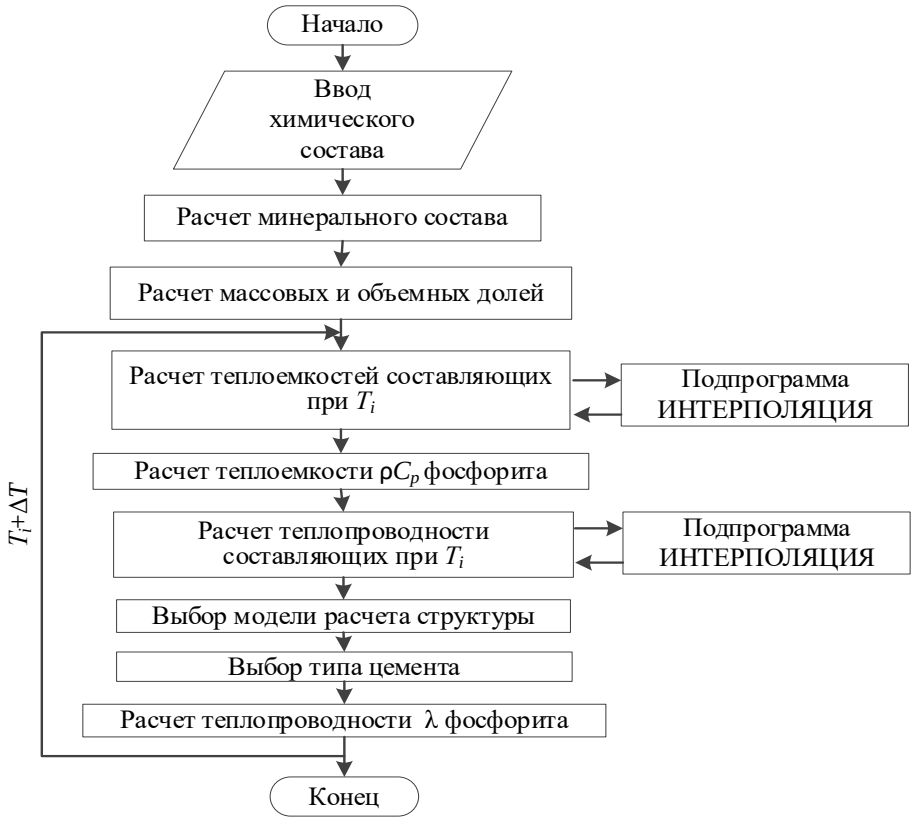

Рис. 1. Блок-схема алгоритма расчета теплофизических свойств по структурной модели

Fig. 1. A block diagram of the algorithm for calculating thermophysical properties according to a structural model

В БД системы хранится информация о химическом составе исследуемых образцов и их теплофизических и технологических свойствах:

– коэффициент теплопроводности материала при первом его нагреве и в отожженном состоянии;

– удельная истинная теплоемкость при первом и втором нагревах, эффективная теплоемкость при первом нагреве;

– относительное линейное расширение;

– электрическая проводимость в логарифмических координатах и плотность материала при нагреве.

Предусмотрена возможность группировки образцов по типам материалов.

Поиск и обработка данных осуществляются с помощью хранимых процедур, выполняемых на сервере БД.

Автоматизированное рабочее место

Для доступа к БД системы разработано автоматизированное рабочее место под управлением операционных систем Microsoft Windows.

Для взаимодействия с пользователем в нем реализован стандартный интерфейс управления с использованием системы меню и панелей кнопок быстрого доступа. Для выполнения операций над данными и обработки информации используются формы.

В информационной системе реализован многодокументальный интерфейс, позволяющий оперативно переключаться между различными режимами работы с данными с использованием меню «Окно» и панели кнопок управления окнами. Для реализации этих режимов используются формы.

Для ввода и редактирования информации об исследованных образцах используется форма, показанная на рисунке 2.

В левой части формы отображается древовидный список материалов, позволяющий группировать образцы по виду материала и ускоряющий поиск необходимых образцов, в правой – список образцов выбранного материала, обеспечивающий возможность их добавления, редактирования и удаления.

Выполнение операций добавления, редактирования и удаления информации об образцах и материалах реализовано с помощью команд меню «Образцы» и панели кнопок быстрого доступа.

Для ввода и редактирования информации об образцах используются соответствующие формы.

Форма содержит две вкладки: «Данные образца» и «Свойства». На вкладке «Данные образца» вводится и редактируется информация о химическом составе и исходной плотности. На вкладке «Свойства» отображается зависимость теплофизических и технологических свойств образца от температуры. Добавление, удаление и редактирование новых точек зависимости свойств образца от температуры осуществляются с помощью панели кнопок быстрого доступа и команд меню «Образец».

Рабочее место информационной системы предусматривает возможность поиска образцов и их теплофизических и технологических свойств. Для поиска рабочее место использует хранимые процедуры, выполняемые на сервере БД.

Сформирована отдельная форма для поиска образца по химическому составу. Для поиска вводятся концентрации учитываемых компо-

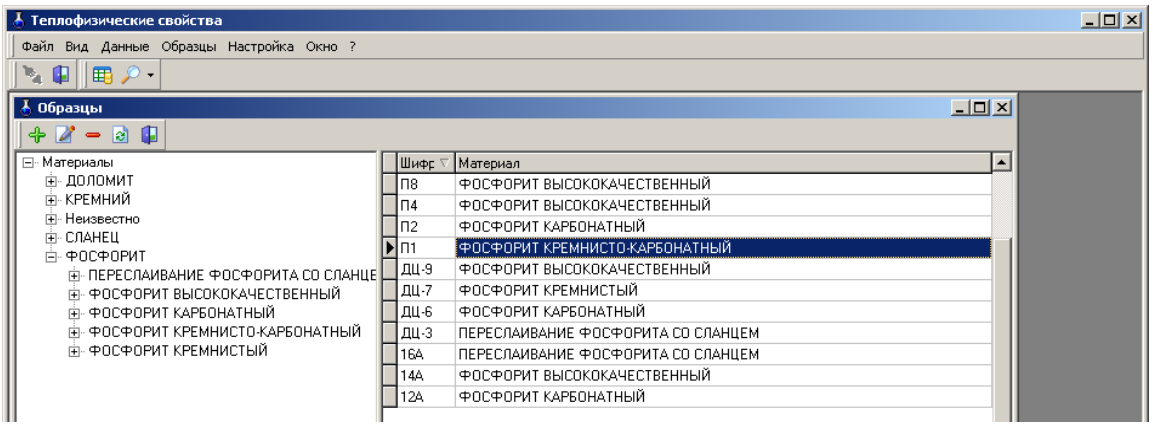

Рис. 2. Фрагмент формы для ввода и редактирования информации об исследованных образцах

Fig. 2. A form for entering and editing information on tested samples

нентов в процентах. Поиск выполняется при нажатии соответствующей кнопки на панели быстрого доступа или выбором команды «Поиск» в меню «Поиск образца». В случае успешного поиска его результат выводится в виде шифра образца, его материала и химического состава. Также имеется возможность перехода в режим просмотра информации об образце с использованием формы ввода и редактирования информации об образце.

Разработанная форма для поиска теплофизических и технологических свойств образцов показана на рисунке (см. http://www.swsys.ru/uploaded/image/2022-3/2022-3-dop/13.jpg). Для поиска вводятся концентрации учитываемых компонентов (в процентах) и температура. Поиск выполняется нажатием соответствующей кнопки на панели быстрого доступа или выбором команды «Поиск» в меню «Поиск свойств». В случае успешного поиска его результат выводится в виде шифра образца, его материала, химического состава и списка свойств, соответствующих заданной температуре.

Заключение

С использованием разработанной информационной системы проведено комплексное исследование температурных зависимостей теплопроводности и теплоемкости всех основных типов литологических разностей фосфатных руд. Установлено, что теплопроводности сырьевых фосфоритовых материалов существенно различаются и определяются структурой и минералогическим составом пород.

Установлено, что теплофизические свойства претерпевают глубокие изменения в результате физико-химических превращений, возникающих в процессе нагрева. Диапазон изменения коэффициента теплопроводности составил 0,5–7 Вт/м·К, удельной теплоемкости – 2–4 10^6 кДж/м^3·К при температурах от 300 К до 1 300 К.

В рамках предлагаемой информационной системы разработаны БД и составлены паспорта теплофизических и технологических свойств ряда фосфоритов, необходимых для теплотехнических расчетов термически активируемых химико-энерготехнологических процессов и аппаратов обогащения фосфоритовой руды. Применение информационной системы для обобщения и анализа экспериментальных данных показывает, что можно выделить основные типы мономинерального сырья с определенным набором технологических свойств, которые могут быть приняты в качестве основных компонент в структурной модели технологических свойств. В качестве таковых были выбраны кремнезем, карбонаты, фосфатное вещество и прочие примеси, свойства которых определены на основе обработки данных и приведены в информационной системе.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ в рамках научных проектов № 22-61-00096, 22-11-00335.

Литература

1. Леонтьев Л.И. Физико-химические особенности комплексной переработки железо-содержащих руд и техногенных отходов // XX Менделеевский съезд по общей и прикладной химии: тез. докл. 2016. С. 92.
2. Бобков В.И., Борисов В.В., Дли М.И. Подход к исследованию теплопроводности нечеткими численными методами в условиях неопределенности теплофизических характеристик // Системы управления, связи и безопасности. 2017. № 3. С. 73–83.
3. Bobkov V.I., Borisov V.V., Dli M.I., Meshalkin V.P. Study of the thermal characteristics of phosphate raw materials in the annealing temperature range. Theoretical Foundations of Chemical Engineering, 2017, vol. 51, no. 3, pp. 307–312. DOI: 10.1134/S0040579517030022.
4. Курилин С.П., Соколов А.М., Прокимнов Н.Н. Компьютерная программа для эксплуатационной диагностики электромеханических систем на основе топологического подхода // Прикладная информатика. 2021. Т. 16. № 4. С. 62–73. DOI: 10.37791/2687-0649-2021-16-4-62-73.
5. Мешалкин В.П., Бобков В.И., Дли М.И. Автоматизированная система поддержки принятия решений по управлению энергоресурсоэффективностью химико-энерготехнологической системы обжига фосфоритовых окатышей // Теоретические основы химической технологии. 2019. Т. 53. № 6. С. 609–616. DOI: 10.1134/S0040357119060095.
6. Булыгина О.В., Емельянов А.А., Емельянова Н.З. Имитационное моделирование в экономике и управлении. М.: НИЦ ИНФРА-М, 2021. 592 с.
7. Булыгина О.В., Емельянов А.А., Росс Г.В., Яшин Е.С. Инвестиции, инновации, импортозамещение: имитационное моделирование с элементами искусственного интеллекта в управлении проектными рисками // Прикладная информатика. 2020. Т. 15. № 1. С. 63–102.

8. Мешалкин В.П., Панченко С.В., Бобков В.И., Дли М.И. Анализ теплофизических и химико-технологических свойств отходов горно-обогатительных комбинатов // Теоретические основы химической технологии. 2020. Т. 54. № 1. С. 30–37. DOI: 10.31857/S0040357120010170.

9. Пучков А.Ю., Лобанева Е.И., Култыгин О.П. Алгоритм прогнозирования параметров системы переработки отходов апатит-нефелиновых руд // Прикладная информатика. 2022. Т. 17. № 1. С. 55–68.

10. Тимофеева А.С., Никитченко Т.В., Федина В.В. Определение комкуемости железорудной шихты с целью прогнозирования прочностных свойств окатышей // Современные наукоемкие технологии. 2015. № 8. С. 53–57.

11. Леонтьев Л.И., Григорович К.В., Костина М.В. Фундаментальные исследования как основа создания новых материалов и технологий в области металлургии. Ч. 1. // Изв. вузов. Черная металлургия. 2018. Т. 59. № 1. С. 11–22. DOI: 10.17073/0368-0797-2016-1-11-22.

12. Luis P., Bruggen B. Exergy analysis of energy-intensive production processes: advancing towardsa sustainable chemical industry. J. of Chemical Technology and Biotechonology, 2014, vol. 89, no. 9, pp. 1288–1303. DOI: 10.1002/JCTB.4422.

13. Elgharbi S., Horchani-Naifer K., Férid M. Investigation of the structural and mineralogical changes of Tunisian phosphorite during calcinations. J. of Thermal Analysis and Calorimetry, 2015, vol. 119, no. 1, pp. 265–271. DOI: 10.1007/s10973-014-4132-5.

14. Борисов В.В., Курилин С.П., Луферов В.С. Нечеткие реляционные когнитивные темпоральные модели для анализа и прогнозирования состояния сложных технических систем // Прикладная информатика. 2022. Т. 17. № 1. С. 27–38. DOI: 10.37791/2687-0649-2022-17-1-27-38.

Software & Systems
DOI: 10.15827/0236-235X.139.502-508

Received 13.05.22, Revised 22.06.22
2022, vol. 35, no. 3, pp. 502–508

Information system for calculation, information accumulation and certification of phosphorite thermophysical properties

V.A. Orekhov [1], *Assistant, fundukoff@mail.ru*
V.I. Bobkov [1], *Dr.Sc. (Engineering), Head of Department, vovabobkoff@mail.ru*
S.V. Panchenko [1], *Dr.Sc. (Engineering), Professor, tan_pan@inbox.ru*

[1] *Branch of the National Research University "MPEI" in Smolensk, Smolensk, 214013, Russian Federation*

Abstract. The paper proposes creating a certificate of phosphorite properties, which allows preserving in electronic form experimental temperature dependencies of the material thermal conductivity coefficient at its first heating and in the annealed state, specific true heat capacity at the first and second heating, effective heat capacity at the first heating, relative linear expansion, electrical conductivity and density of phosphate material at heating.

There is a developed an information system that can implement such certificate of properties. It allows inputting and storing data on chemical composition and thermophysical and technological properties of samples in digital form, searching and processing them. This system uses client-server technology to access and process data. Calculation of thermophysical properties of phosphorites by structural models takes into account hierarchical properties of phosphorite components, their volume and mass fractions. The information for determining the component proportions is the material mineralogical composition.

The information system includes a program for calculating a thermal conductivity coefficient and a specific heat capacity. It differs by taking into account mass and volume fractions of the main rock-forming minerals using interpolation of table temperature values of thermal conductivity coefficients and specific heat capacities of phosphorite, carbonate and silica to determine thermophysical properties of the components at any temperature. The thermal conductivity coefficient of the material is calculated is based on the combined thermal conductivity model taking into account the endothermic reaction of carbonate dissociation; the specific heat capacity is calculated from the additive model.

There is a developed algorithm for a program for calculating thermophysical properties by the chemical composition of phosphorites.

Keywords: information system, algorithm, thermal conductivity, heat capacity, structure, chemical composition.

Acknowledgements. *The work was supported by the Russian Science Foundation within the framework of the scientific projects no. 22-61-00096, 22-11-00335.*

References

1. Leontev L.I. Physical and chemical features of the complex processing of iron-containing ores and industrial waste. *Proc. XX Mendeleev Congress on General and Applied Chemistry*, 2016, p. 92 (in Russ.).

2. Bobkov V.I., Borisov V.V., Dli M.I. Approach to a heat conductivity research by fuzzy numerical methods in the conditions of indeterminacy thermal characteristics. *Systems of Control, Communication and Security*, 2017, no. 3, pp. 73–83 (in Russ.).

3. Bobkov V.I., Borisov V.V., Dli M.I., Meshalkin V.P. Study of the thermal characteristics of phosphate raw materials in the annealing temperature range. *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*, 2017, vol. 51, no. 3, pp. 307–312. DOI: 10.1134/S0040579517030022.

4. Kurilin S.P., Sokolov A.M., Prokimnov N.N. A computer program for electromechanical system operational diagnostics based on the topological approach. *J. of Applied Informatics*, 2021, vol. 16, no. 4, pp. 62–73. DOI: 10.37791/2687-0649-2021-16-4-62-73 (in Russ.).

5. Meshalkin V.P., Bobkov V.I., Dli M.I. An automated decision support system for managing the energy and resource efficiency of a chemical-energy-technological system for roasting phosphorite pellets. *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*, 2019, vol. 53, no. 6, pp. 609–616. DOI: 10.1134/S0040357119060095 (in Russ.).

6. Bulygina O.V., Emelyanov A.A., Emelyanova N.Z. *Simulation Modeling in Economics and Management*. 2021, 592 p. (in Russ.).

7. Bulygina O.V., Emelyanov A.A., Ross G.V., Yashin E.S. Investments, innovations, import substitution: simulation with elements of artificial intelligence in project risk management. *J. of Applied Informatics*, 2020, vol. 15, no. 1, pp. 63–102 (in Russ.).

8. Meshalkin V.P., Panchenko S.V., Bobkov V.I., Dli M.I. Analysis of thermophysical and chemical-technological properties of waste from mining and processing plants. *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*, 2020, vol. 54, no. 1, pp. 30–37. DOI: 10.31857/S0040357120010170 (in Russ.).

9. Puchkov A.Yu., Lobaneva E.I., Kultygin O.P. Algorithm for predicting the parameters of a system for processing waste apatite-nepheline ores. *J. of Applied Informatics*, 2022, vol. 17, no. 1, pp. 55–68 (in Russ.).

10. Timofeeva A.S., Nikitchenko T.V., Fedina V.V. Determining the compressibility of iron ore charge in order to predict the strength properties of pellets. *Modern High Technologies*, 2015, no. 8, pp. 53–57 (in Russ.).

11. Leontev L.I., Grigorovich K.V., Kostina M.V. Fundamental investigations as the basis of creation of new materials and technologies in metallurgy. P. 1. *Izvestiya. Ferrous Metallurgy*, 2018, vol. 59, no. 1, pp. 11–22. DOI: 10.17073/0368-0797-2016-1-11-22 (in Russ.).

12. Luis P., Bruggen B. Exergy analysis of energy-intensive production processes: advancing towardsa sustainable chemical industry. *J. of Chemical Technology and Biotechonology*, 2014, vol. 89, no. 9, pp. 1288–1303. DOI: 10.1002/JCTB.4422.

13. Elgharbi S., Horchani-Naifer K., Férid M. Investigation of the structural and mineralogical changes of Tunisian phosphorite during calcinations. *J. of Thermal Analysis and Calorimetry*, 2015, vol. 119, no. 1, pp. 265–271. DOI: 10.1007/s10973-014-4132-5.

14. Borisov V.V., Kurilin S.P., Luferov V.S. Fuzzy relational cognitive temporal models for analyzing and state prediction of complex technical systems. *J. of Applied Informatics*, 2022, vol. 17, no. 1, pp. 27–38. DOI: 10.37791/2687-0649-2022-17-1-27-38 (in Russ.).

Для цитирования

Орехов В.А., Бобков В.И., Панченко С.В. Разработка информационной системы расчета, накопления информации и паспортизации теплофизических свойств фосфоритов // Программные продукты и системы. 2022. Т. 35. № 3. С. 502–508. DOI: 10.15827/0236-235X.139.502-508.

For citation

Orekhov V.A., Bobkov V.I., Panchenko S.V. Information system for calculation, information accumulation and certification of phosphorite thermophysical properties. *Software & Systems*, 2022, vol. 35, no. 3, pp. 502–508 (in Russ.). DOI: 10.15827/0236-235X.139.502-508.