

УДК 519.654:544.7-047.37
DOI: 10.18799/24131830/2024/1/4414
Шифр специальности ВАК: 2.8.4

Варианты применения метода наименьших квадратов в аппроксимациях Шишковского и Розина–Раммлера

В.М. Галкин¹, Ю.С. Волков², Л.В. Чеканцева^{1✉}, В.А. Иванов¹

¹ Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Россия, г. Томск

² Институт математики им. С.Л. Соболева СО РАН, Россия, г. Новосибирск

✉ chlb@tpu.ru

Аннотация. *Актуальность* исследования обусловлена необходимостью развития и оптимизации математического аппарата для обработки результатов лабораторных экспериментов и повышения адекватности получаемых результатов. *Целью* работы является создание альтернативных способов определения параметров зависимостей Шишковского и Розина–Раммлера, которым подчиняются процессы адсорбции поверхностно активного вещества из водного раствора на твёрдых адсорбентах и осаждения взвешенных частиц в седиментационном анализе. *Методы.* Основным методом определения параметров двухпараметрических зависимостей является метод наименьших квадратов. Стандартный подход основан на поиске минимума функции двух переменных вычислительными способами нелинейного программирования. В качестве необходимых условий минимума целевой функции используются уравнения, получаемые путём приравнивания к нулю производных целевой функции по каждому из параметров. Рассмотрены альтернативные подходы получения явных формул и сведение к решению трансцендентного уравнения. *Результаты.* Для двухпараметрических зависимостей Шишковского и Розина–Раммлера предложены альтернативные подходы определения неизвестных параметров. При стандартном подходе решение задачи основано на численной минимизации функции двух переменных методами нелинейного программирования. Предложен подход, в котором уравнения Шишковского и Розина–Раммлера подвергаются некоторым эквивалентным преобразованиям так, чтобы использование необходимых условий минимума позволяло получить линейное уравнение хотя бы в отношении одного из искомых параметров. Это ведёт к упрощению вычислений, требуется численно решить одно трансцендентное уравнение, второй параметр тогда определяется по явной формуле. А для зависимости Розина–Раммлера удалось в одном из предлагаемых вариантов вообще получить явные формулы для нахождения обоих параметров.

Ключевые слова: метод наименьших квадратов, обработка экспериментальных данных, адсорбция, поверхностно активные вещества, седиментационный анализ, зависимость Шишковского, зависимость Розина–Раммлера

Для цитирования: Варианты применения метода наименьших квадратов в аппроксимациях Шишковского и Розина–Раммлера / В.М. Галкин, Ю.С. Волков, Л.В. Чеканцева, В.А. Иванов // Известия Томского политехнического университета. Инжиниринг георесурсов. – 2024. – Т. 335. – № 1. – С. 128–139. DOI: 10.18799/24131830/2024/1/4414

UDC 519.654:544.7-047.37
DOI: 10.18799/24131830/2024/1/4414

Variants of application of the least squares method in Szyszkowski and Rosin–Rammler approximations

V.M. Galkin¹, Yu.S. Volkov², L.V. Chekantseva^{1✉}, V.A. Ivanov¹

¹ National Research Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russian Federation

² Sobolev Institute of Mathematics, Novosibirsk, Russian Federation

✉ chlb@tpu.ru

Abstract. Relevance. The need to develop and optimize the mathematical apparatus for processing the results of laboratory experiments and increasing the adequacy of the results obtained. **Aim.** To create alternative methods for finding the parameters of the Szyszkowski and Rosin–Rammler dependencies, which are subject to surfactant adsorption from an aqueous solution on solid adsorbents and deposition of suspended particles in sedimentation analysis. **Methods.** The main method for determining the parameters of two-parameter dependencies is the least squares method. The standard approach is based on finding the minimum of a function of two variables by computational methods of nonlinear programming. The equations, obtained by equating the derivatives of the objective function for each of the parameters to zero, are used as necessary conditions for the minimum of the objective function. The paper considers alternative approaches to obtaining explicit formulas and reduction to the solution of the transcendental equation. **Results.** For the two-parameter dependencies of Szyszkowski and Rosin–Rammler, the alternative approaches for determining unknown parameters are proposed. In the standard approach, solving the problem is based on numerical minimization of a function of two variables by nonlinear programming methods. The authors propose the approach, in which the Szyszkowski and Rosin–Rammler equations are subjected to some equivalent transformations so that the use of the necessary minimum conditions makes it possible to obtain a linear equation with respect to at least one of the required parameters. This leads to simplification of calculations, it is required to solve one transcendental equation numerically, the second parameter is then determined by an explicit formula. And for the Rosin–Rammler dependence, in one of the proposed variants, it was possible to obtain explicit formulas for finding both parameters.

Keywords: least squares method, experimental data processing, adsorption, surfactants, sedimentation analysis, Szyszkowski dependence, Rosin–Rammler dependence

For citation: Galkin V.M., Volkov Yu.S., Chekantseva L.V., Ivanov V.A. Variants of application of the least squares method in Szyszkowski and Rosin–Rammler approximations. *Bulletin of the Tomsk Polytechnic University. Geo Assets Engineering*, 2024, vol. 335, no. 1, pp. 128–139. DOI: 10.18799/24131830/2024/1/4414

Введение. Особенности экспериментов

В настоящее время повышенное внимание уделяется поверхностным явлениям, так как именно эти явления вызывают повышенный интерес научных и инженерно-технических работников. Возникает необходимость важнейшие фундаментальные закономерности представлять в виде количественных соотношений, что позволяет глубже раскрывать физический смысл явлений и определять границы применимости получаемых соотношений. Закономерности протекания поверхностных явлений служат теоретической основой получения материалов с заданными свойствами. Основой изучения закономерностей является эксперимент и его математическая обработка.

Опишем особенности проведения экспериментов, из которых получают данные для зависимостей Шишковского и Розина–Раммлера [1–3]. Для выявления этих зависимостей и определения их параметров используется метод наименьших квадратов (МНК) [4]. Эмпирическая зависимость Шишковского применяется для определения и изучения поверхностного натяжения раствора в зависимости от концентрации в нём поверхностно активного вещества (ПАВ) при средних концентрациях ПАВ и исследования закономерностей адсорбции ПАВ из водного раствора на твёрдых адсорбентах. В свою очередь зависимость Розина–Раммлера применяется для описания интегральной кривой накопления в координатах «время – относительные весовые доли» и позволяет получить дифференциальное распределение всех весовых долей по размерам частиц. Это распределение хорошо описывает результат воздействия на материал про-

цесса осаждения взвешенных частиц в седиментационном анализе или результат механического разрушения материала [5].

Что касается получения зависимости Шишковского, то здесь при проведении эксперимента часто используется так называемый капельный метод. Суть его заключалась в измерении на сталагмометре СТ-2 объёма капли исследуемого раствора ПАВ и определении величины поверхностного натяжения с дальнейшим расчётом и построением изотерм адсорбции. Для повышения точности эксперимента проводится 100 итераций для каждого раствора ПАВ с последующим расчётом среднего значения объёма капли. По полученным точкам строится аппроксимирующая зависимость Шишковского, которая даёт связь коэффициента поверхностного натяжения (КПН) с концентрацией ПАВ [6–9].

Использование зависимости Розина–Раммлера возможно для данных, подготовленных методом непрерывного взвешивания седиментационного осадка. Целью является получение кривых распределения, анализ которых позволяет установить фракционный состав системы. В этом методе площадка весов находится в жидкости на заданной глубине. При этом взаимного влияния частиц и влияния стенок нет. Частицы сферические, одинаковой плотности. Их постоянная скорость определяется из закона Стокса и зависит от диаметра частицы, её плотности, вязкости и плотности жидкости [10, 11]. В процессе эксперимента идёт регистрация интегрального веса осадка через определённые промежутки времени. Полученная кривая осаждения аппроксимируется зависимостью Розина–Раммлера, по которой определяются интеграль-

ная и дифференциальная кривые по размерам частиц.

Особенность обработки данных экспериментов изложена отдельно для зависимостей Розина–Рамллера и Шишковского.

О применении метода наименьших квадратов

Пусть имеются экспериментальные (с индексом «е») данные

$$\{(w_{i,e}; z_{i,e})\}; i = 1, \dots, N, \quad (1)$$

где $w_{i,e}$ – вес или КПН; $z_{i,e}$ – время или концентрация ПАВ.

Предполагается, что данные должны аппроксимировать некоторую двухпараметрическую зависимость

$$w = w(z, m_1, m_2) \quad (2)$$

с неизвестными параметрами m_1 и m_2 , которые и требуется определить. Даже если мы знаем значения истинной зависимости (2), равенства

$$w_{i,e} = w(z_{i,e}, m_1, m_2); i = 1, \dots, N, \quad (3)$$

могут выполняться лишь приближённо в силу погрешностей эксперимента. Поэтому для экспериментальных данных (1) может оказаться, что такие параметры m_1 и m_2 , обеспечивающие строгое выполнение всех равенств (3), подобрать невозможно. Тогда мы будем добиваться не строгого выполнения равенств (3), а наименьшей погрешности в этих равенствах. Математически это можно записать так, что нам нужно найти такие значения параметров m_1 и m_2 , чтобы суммарная погрешность в равенствах (3) была наименьшей. Для этого вычисляются все отклонения (невязки) в равенствах (3) и суммируются квадраты этих отклонений, после чего находится минимум целевой функции

$$S_0(m_1, m_2) = \sum_{i=1}^N [w_{i,e} - w(z_{i,e}, m_1, m_2)]^2. \quad (4)$$

Ясно, что если для данных (1) есть параметры m_1 и m_2 , обеспечивающие точное выполнение равенств (3), то значение целевой функции (4) при этих параметрах даст 0. Подбор таких параметров m_1 и m_2 в аппроксимирующей зависимости (2), которые доставляют минимум сумме (4), и носит название «метод наименьших квадратов» (МНК) [4], и запись задачи имеет общий вид:

$$(m_1, m_2) = \arg\{\min(S_0(m_1, m_2))\}. \quad (5)$$

Здесь и далее считается, что аналитические выражения функций, образующих двухпараметрическую зависимость (2), позволяют дифференцировать эти функции по параметрам m_1 и m_2 .

Непосредственное решение задачи (5) основывается на нелинейном программировании [12].

Кроме этого, используется необходимое условие минимума (НУМ):

$$\frac{\partial S_0}{\partial m_1} = 0, \frac{\partial S_0}{\partial m_2} = 0. \quad (6)$$

Если искомые параметры входят в (2) линейно, или если после преобразований удаётся прийти к линейным выражениям, то из (6) получаются более удобные в применении алгебраические соотношения. Иногда в качестве таких преобразований удобно логарифмировать или экспонировать равенство (2), что будет вести к изменению целевой функции, но также обеспечивающей наименьшее отклонение в преобразованных равенствах (3).

Рассмотрим использование таких преобразований, когда получается аналитическое выражение для искомых параметров, но при этом возникает особенность типа $\ln(0)$ или получается трансцендентное уравнение, которое их связывает.

Варианты реализации при аппроксимации соотношением Шишковского

Эмпирическое уравнение Шишковского описывает влияние концентраций ПАВ в растворе на КПН раствора

$$\sigma = \sigma_0 - B \cdot \ln(1 + AC), \quad (7)$$

где σ – КПН раствора с ПАВ; σ_0 – известный КПН чистого раствора; $A > 0$, $B > 0$ – искомые коэффициенты аппроксимации, условие $B > 0$ будет доказано, условие $A > 0$ очевидно; C – концентрация ПАВ в растворе.

Заметим, что для равенства (7) можно использовать следующие эквивалентные записи:

$$\ln(\sigma_0 - \sigma) = \ln(B \cdot \ln(1 + AC)), \quad (8)$$

$$\exp\left(\frac{\sigma_0 - \sigma}{B}\right) = 1 + AC, \quad (9)$$

$$\frac{\sigma_0 - \sigma}{B} = \ln(1 + AC). \quad (10)$$

Пусть имеются данные из эксперимента: $\{\sigma_i, C_i\}$; $i = 1, \dots, N$; $C_i > 0$, здесь σ_i – КПН, C_i – концентрация ПАВ в растворе. Тогда сумма квадратов отклонений (невязок) для равенства (7) будет:

$$S(A, B) = \sum_{i=1}^N [\sigma_0 - \sigma_i - B \cdot \ln(1 + AC_i)]^2. \quad (11)$$

Эквивалентные равенства (8)–(10) приводят к следующим целевым функциям:

$$S_1(z, A) =$$

$$\sum_{i=1}^N [\ln(\sigma_0 - \sigma_i) - z - \ln(\ln(1 + AC_i))]^2, z = \ln B, \quad (12)$$

$$S_2(A, B) = \sum_{i=1}^N \left[\exp\left(\frac{\sigma_0 - \sigma_i}{B}\right) - 1 - AC_i \right]^2, \quad (13)$$

$$S_3(A, B) = \sum_{i=1}^N \left[\frac{\sigma_0 - \sigma_i}{B} - \ln(1 + AC_i) \right]^2. \quad (14)$$

Рассмотрим варианты нахождения неизвестных параметров A и B .

Вариант 1. Методы нелинейного программирования применяются непосредственно к (11) или к аналогам (12)–(14), ищется минимум и определяются значения A и B , при которых этот минимум достигается:

$$(A, B) = \arg\{\min[S(A, B)]\}. \quad (15)$$

Вариант 2. Для целевой функции (11) из НУМ $\frac{\partial S}{\partial B} = 0$ получаем:

$$B = \frac{\sum_{i=1}^N [(\sigma_0 - \sigma_i) \cdot \ln(1 + AC_i)]}{\sum_{i=1}^N [\ln(1 + AC_i)]^2}. \quad (16)$$

Другое условие минимума $\frac{\partial S}{\partial A} = 0$ приводит к равенству:

$$\sum_{i=1}^N \frac{(\sigma_0 - \sigma_i) C_i}{1 + AC_i} - B \sum_{i=1}^N \frac{C_i \cdot \ln(1 + AC_i)}{1 + AC_i} = 0,$$

подставив в которое выражение B из (16), приходим к трансцендентному уравнению относительно неизвестного параметра A :

$$\sum_{i=1}^N \frac{(\sigma_0 - \sigma_i) C_i}{1 + AC_i} - \frac{\sum_{i=1}^N [(\sigma_0 - \sigma_i) \cdot \ln(1 + AC_i)]}{\sum_{i=1}^N [\ln(1 + AC_i)]^2} \times \sum_{i=1}^N \frac{C_i \cdot \ln(1 + AC_i)}{1 + AC_i} = 0,$$

решив которое затем определяем параметр B из (16).

Вариант 3. НУМ $\frac{\partial S_1}{\partial z} = 0$ для целевой функции (12) приводит к:

$$z = \frac{1}{N} [\sum_{i=1}^N \ln(\sigma_0 - \sigma_i) - \sum_{i=1}^N \ln \ln(1 + AC_i)], \quad (17)$$

или

$$B = \exp \left\{ \frac{1}{N} \left[\sum_{i=1}^N \ln(\sigma_0 - \sigma_i) - \sum_{i=1}^N \ln \ln(1 + AC_i) \right] \right\}, \quad (18)$$

а другое НУМ $\frac{\partial S_1}{\partial A} = 0$ для этой целевой функции позволяет записать равенство:

$$\sum_{i=1}^N \frac{[\ln(\sigma_0 - \sigma_i) - z - \ln \ln(1 + AC_i)] \cdot C_i}{(1 + AC_i) \cdot \ln(1 + AC_i)} = 0. \quad (19)$$

Подстановка z из (17) в (19) даёт трансцендентное уравнение относительно A :

$$\sum_{i=1}^N \ln \frac{\sigma_0 - \sigma_i}{\ln(1 + AC_i)} \cdot \frac{C_i}{(1 + AC_i) \cdot \ln(1 + AC_i)} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \ln \frac{\sigma_0 - \sigma_i}{\ln(1 + AC_i)} \sum_{i=1}^N \frac{C_i}{(1 + AC_i) \cdot \ln(1 + AC_i)},$$

после решения которого будет определён параметр B из (18). Заметим, равенство (18) показывает, что $B > 0$.

Вариант 4. Для целевой функции (13) НУМ $\frac{\partial S_2}{\partial A} = 0$ позволяет выразить параметр A :

$$A = \frac{\sum_{i=1}^N [\exp(\frac{\sigma_0 - \sigma_i}{B}) - 1] C_i}{\sum_{i=1}^N C_i^2}, \quad (20)$$

из другого НУМ $\frac{\partial S_2}{\partial B} = 0$ можно получить соотношение:

$$\sum_{i=1}^N \left[\exp\left(\frac{\sigma_0 - \sigma_i}{B}\right) - 1 - AC_i \right] \exp\left(\frac{\sigma_0 - \sigma_i}{B}\right) (\sigma_0 - \sigma_i) = 0,$$

подставив в которое выражение для параметра A из (20), придём к трансцендентному уравнению относительно параметра B :

$$\sum_{i=1}^N \left[\exp\left(\frac{\sigma_0 - \sigma_i}{B}\right) - 1 \right] \exp\left(\frac{\sigma_0 - \sigma_i}{B}\right) (\sigma_0 - \sigma_i) = \frac{\sum_{i=1}^N \left[\exp\left(\frac{\sigma_0 - \sigma_i}{B}\right) - 1 \right] C_i}{\sum_{i=1}^N C_i^2} \sum_{i=1}^N C_i (\sigma_0 - \sigma_i) \exp\left(\frac{\sigma_0 - \sigma_i}{B}\right).$$

После нахождения параметра B параметр A находится из (20).

Вариант 5. Применение НУМ $\frac{\partial S_3}{\partial B} = 0$ к целевой функции (14) позволяет получить:

$$B = \frac{\sum_{i=1}^N (\sigma_0 - \sigma_i)^2}{\sum_{i=1}^N [\ln(1 + AC_i) \cdot (\sigma_0 - \sigma_i)]}. \quad (21)$$

Другое НУМ $\frac{\partial S_3}{\partial A} = 0$ приводит к соотношению:

$$\sum_{i=1}^N \left[\frac{\sigma_0 - \sigma_i}{B} - \ln(1 + AC_i) \right] \cdot \frac{C_i}{1 + AC_i} = 0,$$

из которого после подстановки B из (21) получаем трансцендентное уравнение относительно параметра A :

$$\sum_{i=1}^N \frac{(\sigma_0 - \sigma_i) C_i}{1 + AC_i} = \frac{\sum_{i=1}^N (\sigma_0 - \sigma_i)^2}{\sum_{i=1}^N [\ln(1 + AC_i) \cdot (\sigma_0 - \sigma_i)]} \sum_{i=1}^N \frac{C_i \cdot \ln(1 + AC_i)}{1 + AC_i},$$

после решения которого, параметр B находится из (21).

Таким образом, в вариантах 2–5 один из неизвестных параметров – A или B – искомым зависимости (7) находится из трансцендентного уравнения, и после этого по явной формуле в виде алгебраического выражения находится другой. При этом используется не численный поиск минимума некоторой функции, как в (15), а более простой способ – численное решение трансцендентного уравнения, которое получается из НУМ целевой функции.

О вычислении адсорбции

После применения метода наименьших квадратов и определения параметров зависимости уравнения Шишковского, которому подчиняются результаты рассматриваемого эксперимента, можно построить изотермы поверхностного натяжения (рис. 1), т. е. зависимость КПН раствора с ПАВ от концентрации ПАВ в растворе [13–16].

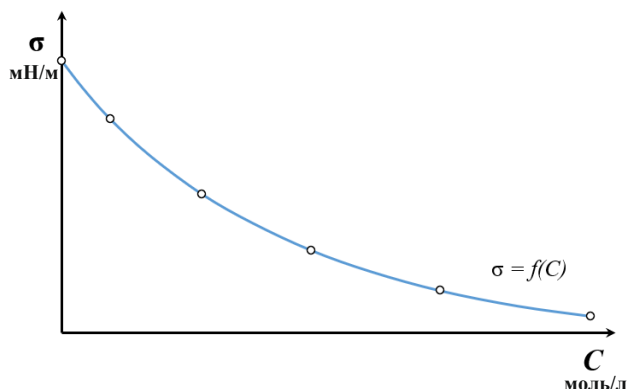


Рис. 1. Изотерма поверхностного натяжения

Fig. 1. Surface tension isotherm

Простое термодинамическое соотношение между поверхностной концентрацией (адсорбцией), обозначаемой Γ , и изменением КПН с активной концентрацией растворяемого вещества σ было выведено Гиббсом:

$$\Gamma = -\frac{C}{RT} \cdot \frac{d\sigma}{dC},$$

где R – универсальная газовая постоянная; T – температура. Тогда величина адсорбции может быть вычислена путём дифференцирования уравнения Шишковского (7):

$$\Gamma = -\frac{C}{RT} \cdot \frac{d\sigma}{dC} = \frac{C}{RT} \cdot \frac{BA}{1+AC}. \quad (22)$$

Изотерма адсорбции изображена на рис. 2 [17, 18].

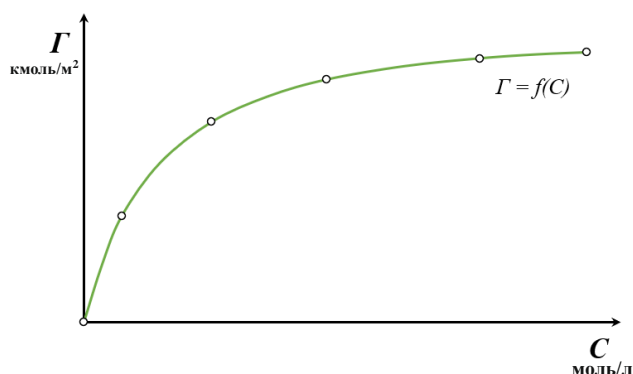


Рис. 2. Изотерма адсорбции

Fig. 2. Adsorption isotherm

Для нахождения величины предельной адсорбции с целью описания возможного поведения изотермы необходимо взять предел от адсорбции Γ при концентрации C , стремящейся к бесконечности:

$$\Gamma_{\infty} = \lim_{C \rightarrow \infty} \Gamma = \frac{C}{RT} \cdot \frac{BA}{1+AC} = \frac{B}{RT}. \quad (23)$$

Обработка экспериментов

Опытные значения данного раздела взяты из [19]. Эксперименты по определению поверхностного натяжения чистых растворов изопропилового спирта и растворов ПАВ после адсорбции на твёрдых адсорбентах проводились при температуре 23 °С и давлении 775 мм рт. ст. Проведены три эксперимента: один с раствором чистого изопропилового спирта и ещё два с растворами изопропилового спирта с добавлением измельчённого твёрдого адсорбента (активированный уголь; смесь глины с двуокисью кремния). Результаты экспериментов представлены в табл. 1–3.

Таблица 1. Экспериментальные значения поверхностного натяжения чистых растворов изопропилового спирта

Table 1. Experimental values of surface tension of isopropyl alcohol pure solutions

i	0	1	2	3	4	5
C_i , моль/л/mole/l	0	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6
σ_i , мН/м/mN/m	72,27	46,51	45,28	43,19	41,88	41,54

Таблица 2. Экспериментальные значения поверхностного натяжения растворов изопропилового спирта после адсорбции на угле

Table 2. Experimental values of surface tension of isopropyl alcohol solutions after adsorption on carbon

i	0	1	2	3	4	5
C_i , моль/л/mole/l	0	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6
σ_i , мН/м/mN/m	72,27	48,25	47,63	46,01	45,25	44,35

Таблица 3. Экспериментальные значения поверхностного натяжения растворов изопропилового спирта после адсорбции на смеси глины с двуокисью кремния

Table 3. Experimental values of surface tension of isopropyl alcohol solutions after adsorption on a mixture of clay and silicon dioxide

i	0	1	2	3	4	5
C_i , моль/л/mole/l	0	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6
σ_i , мН/м/mN/m	72,27	47,98	46,23	44,86	43,73	43,45

Аппроксимация полученных экспериментальных значений КПН реализована путём применения описанного МНК. Параметры уравнения Шишковского в первом эксперименте равны $A=889,54$; $B=4,92$; во втором – $A=3184,94$; $B=3,67$; и в третьем – $A=1481,79$; $B=4,31$.

После определения и аппроксимации полученных значений поверхностного натяжения всех исследуемых растворов строились соответствующие изотермы (рис. 3).

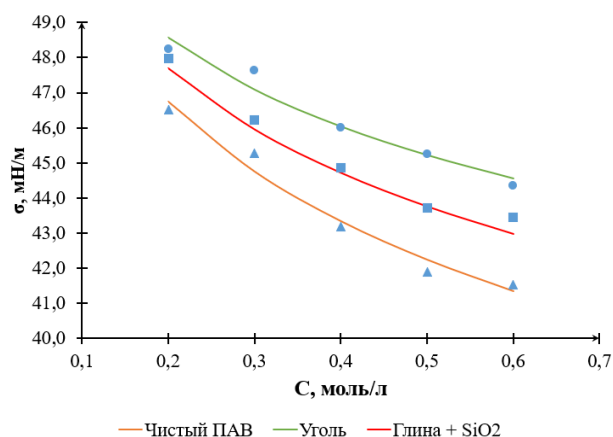


Рис. 3. Изотермы поверхностного натяжения экспериментов

Fig. 3. Surface tension isotherms of experiments

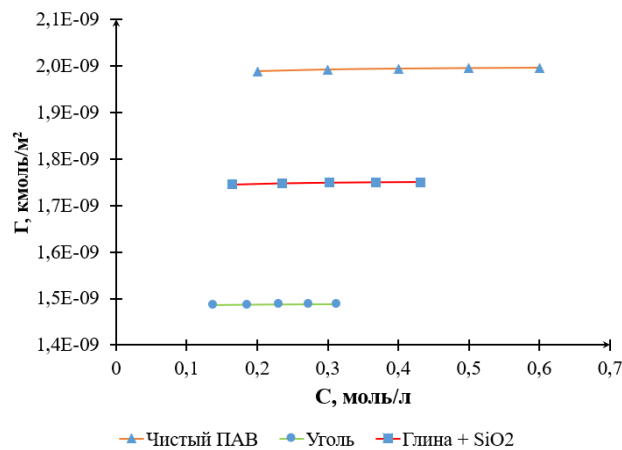


Рис. 4. Изотермы адсорбции исследуемых растворов

Fig. 4. Adsorption isotherms of the studied solutions

Результаты расчёта адсорбции и данных для построения изотерм адсорбции по формуле (22) представлены в табл. 4–6.

Изотермы адсорбции растворов приведены на рис. 4. Предельная адсорбция, вычисленная по формуле (23), для рассматриваемых растворов равна $2,0001 \cdot 10^{-9}$; $1,4903 \cdot 10^{-9}$ и $1,7531 \cdot 10^{-9}$, соответственно.

Варианты реализации при аппроксимации соотношением Розина–Раммлера

Рассмотрим процесс седиментации, когда на весы оседают сферические частицы разного размера, но одинаковой плотности [20–23]. Их скорость осаждения определяется законом Стокса. Пусть для кривой накопления имеются экспериментальные данные $\{(P_{i,e}, t_{i,e})\}$; $i = 1, \dots, N$, где $P_{i,e}$ – вес осадка в момент времени $t_{i,e}$; $t_{i,e} < t_{i+1,e}$; $P_{i,e} \leq P_{i+1,e}$ (рис. 5).

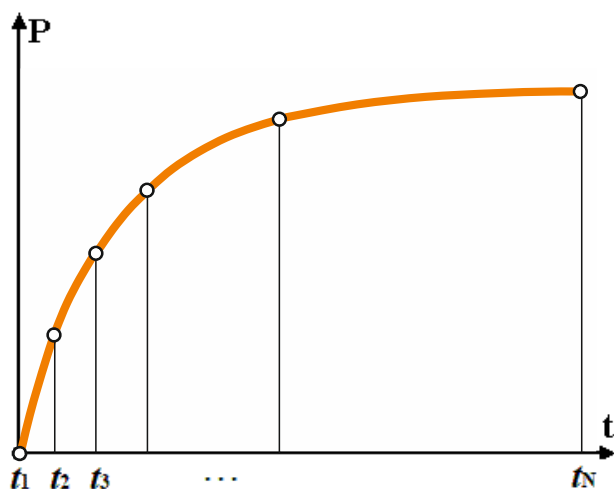


Рис. 5. Кривая седиментации в моменты времени $t_1, t_2, t_3, \dots, t_N$

Fig. 5. Sedimentation curve at times $t_1, t_2, t_3, \dots, t_N$

Таблица 4. Адсорбции растворов чистого изопропилового спирта

Table 4. Adsorption of pure isopropyl alcohol solutions

i	0	1	2	3	4	5
C_i , моль/л/mole/l	0	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6
Γ_i , кмоль/м²/kmole/m²	0	$1,9889 \cdot 10^{-9}$	$1,9926 \cdot 10^{-9}$	$1,9945 \cdot 10^{-9}$	$1,9956 \cdot 10^{-9}$	$1,9964 \cdot 10^{-9}$

Таблица 5. Адсорбции растворов изопропилового спирта после эксперимента на угле

Table 5. Adsorption of isopropyl alcohol solutions after the experiment on carbon

i	0	1	2	3	4	5
C_i , моль/л/mole/l	0	0,14	0,19	0,23	0,27	0,31
Γ_i , кмоль/м²/kmole/m²	0	$1,4869 \cdot 10^{-9}$	$1,4878 \cdot 10^{-9}$	$1,4882 \cdot 10^{-9}$	$1,4886 \cdot 10^{-9}$	$1,4888 \cdot 10^{-9}$

Таблица 6. Адсорбции растворов изопропилового спирта после эксперимента на смеси глины с двуокисью кремния

Table 6. Adsorption of isopropyl alcohol solutions after the experiment on a mixture of clay and silicon dioxide

i	0	1	2	3	4	5
C_i , моль/л/mole/l	0	0,16	0,23	0,30	0,37	0,43
Γ_i , кмоль/м²/kmole/m²	0	$1,746 \cdot 10^{-9}$	$1,748 \cdot 10^{-9}$	$1,749 \cdot 10^{-9}$	$1,750 \cdot 10^{-9}$	$1,750 \cdot 10^{-9}$

Перейдём к весовым долям и относительному времени $\{(y_i, t_i)\}$:

$$y_i = \frac{P_{i,e} - P_{1,e}}{P_{N,e} - P_{1,e}}; \quad t_i = t_{i,e} - t_{1,e}. \quad (24)$$

Для аппроксимации весовых долей (24) используют уравнение Розина–Раммлера:

$$y = 1 - \exp(-bt^c), \quad (25)$$

$$y(0) = 0, y(\infty) = 1,$$

в котором « b » и « c » – искомые параметры аппроксимации. Тогда целевая функция, сумма квадратов невязок, имеет вид:

$$S(b, c) = \sum_{i=1}^N [1 - \exp(-bt_i^c) - y_i]^2. \quad (26)$$

Для уравнения Розина–Раммлера (25) можно привести несколько эквивалентных записей:

$$\ln(1 - y) = -bt^c, \quad (27)$$

$$\ln(-\ln(1 - y)) = \ln b + c \cdot \ln t, \quad (28)$$

$$(1 - y)^{1/t^c} = \exp(-b). \quad (29)$$

Приведённые формы записи (27)–(29) уравнения Розина–Раммлера (25) позволяют привести другие целевые функции МНК:

$$S_1(b, c) = \sum_{i=1}^N [\ln(1 - y_i) + bt_i^c]^2,$$

$$S_2(x, c) = \sum_{i=1}^N \{ \ln[-\ln(1 - y_i)] - x - c \cdot \ln(t_i) \}^2, \quad (30)$$

$$S_3(z, c) = \sum_{i=1}^N \left[(1 - y_i)^{\frac{1}{t_i^c}} - z \right]^2, \quad (31)$$

$$z = \exp(-b).$$

Рассмотрим варианты нахождения параметров « b » и « c ».

Вариант 1. Методы нелинейного программирования применяются для поиска минимума непосредственно к целевой функции (26) или к аналогам (27)–(29), ищутся значения параметров « b » и « c », при которых этот минимум достигается:

$$(b, c) = \arg\{\min S(b, c)\}. \quad (32)$$

Вариант 2. Из НУМ $\frac{\partial S_1}{\partial b} = 0$ получим:

$$b = \frac{\sum_{i=1}^N t_i^c \ln(1 - y_i)}{\sum_{i=1}^N (t_i^c)^2}. \quad (33)$$

Другое НУМ $\frac{\partial S_1}{\partial c} = 0$ приводит к соотношению:

$$\sum_{i=1}^N [t_i^c \ln t_i \ln(1 - y_i)] + b \sum_{i=1}^N (t_i^c)^2 \ln t_i = 0,$$

из которого, используя (33), получаем трансцендентное уравнение относительно параметра c :

$$\sum_{i=1}^N (t_i^c)^2 \cdot \sum_{i=1}^N [t_i^c \ln t_i \ln(1 - y_i)] + \sum_{i=1}^N t_i^c \ln(1 - y_i) \cdot \sum_{i=1}^N (t_i^c)^2 \ln t_i = 0, \quad (34)$$

решение которого позволяет из (33) найти и параметр b .

Вариант 3. Применение НУМ $\frac{\partial S_2}{\partial x} = 0$ к целевой функции (30) позволяет получить:

$$x = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [\ln(-\ln(1 - y_i)) - c \cdot \ln t_i] \quad (35)$$

или:

$$b = \exp \left\{ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [\ln(-\ln(1 - y_i)) - c \cdot \ln t_i] \right\}. \quad (36)$$

Другое условие минимума $\frac{\partial S_2}{\partial c} = 0$ приводит к равенству:

$$\sum_{i=1}^N [\ln(-\ln(1 - y_i)) - c \cdot \ln t_i] \cdot \ln t_i - x \sum_{i=1}^N \ln t_i = 0,$$

с помощью (35), исключая параметр x аналогично [24], получаем явное выражение для нахождения параметра c :

$$c = \frac{N \sum_{i=1}^N [\ln(-\ln(1 - y_i))] \cdot \ln t_i - \sum_{i=1}^N \ln t_i \sum_{i=1}^N [\ln(-\ln(1 - y_i))]}{N \sum_{i=1}^N (\ln t_i)^2 - (\sum_{i=1}^N \ln t_i)^2}. \quad (37)$$

После нахождения параметра c параметр b также определяется по явной формуле (36).

Вариант 4. Для целевой функции (31) НУМ $\frac{\partial S_3}{\partial z} = 0$ позволяет выразить:

$$z = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (1 - y_i)^{\frac{1}{t_i^c}} \quad (38)$$

или:

$$b = -\ln \left\{ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (1 - y_i)^{\frac{1}{t_i^c}} \right\}. \quad (39)$$

Второе НУМ $\frac{\partial S_3}{\partial b} = 0$ даёт соотношение:

$$\sum_{i=1}^N \left[(1 - y_i)^{\frac{1}{t_i^c}} - z \right] (1 - y_i)^{\frac{1}{t_i^c}} \cdot \ln(1 - y_i) \frac{\ln t_i}{t_i^c} = 0,$$

подставив в которое z из (38), приходим к трансцендентному уравнению относительно параметра c :

$$\sum_{i=1}^N (1 - y_i)^{\frac{2}{t_i^c}} \cdot \ln(1 - y_i) \frac{\ln t_i}{t_i^c} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (1 - y_i)^{\frac{1}{t_i^c}} \cdot \sum_{i=1}^N (1 - y_i)^{\frac{1}{t_i^c}} \cdot \ln(1 - y_i) \frac{\ln t_i}{t_i^c}, \quad (40)$$

решив которое, параметр b найдём из (39).

Отметим, что для целевой функции (26) ни одно из НУМ не приводит к линейному уравнению относительно какого-либо из искомых параметров, удаётся свести лишь к квадратному уравнению. Поэтому ввиду громоздкости выражений мы не стали получать решение для функции (26). А в варианте 3 оба НУМ приводят к линейным уравнениям относительно обоих искомых параметров, что позволило выписать решение в явном виде. В вариантах 2 и 4 параметр «с» искомой зависимости (25) находится из трансцендентного уравнения (34) или (40), и после этого по явной формуле в виде алгебраического выражения (33) или (39), соответственно, находится другой параметр «b». При этом используется не численный поиск минимума некоторой функции как в (32), а более простой способ – численное решение трансцендентного уравнения, которое получается из НУМ целевой функции.

Решение проблемы с особенностью

Формулы в вариантах 2–4 имеют особенность типа $\ln(t_i)$, или $\ln(1 - y_i)$, или $\ln[-\ln(1 - y_i)]$ при $y_i = 0, y_i = 1, t_i = 0$, что во время счёта приведёт к аварийному останову. Для преодоления этой проблемы предлагается алгоритм:

- 1) Выбирается вариант для расчёта параметров b и c , которые вычисляются методом (32). Это будет образец для сравнения.
- 2) Выбирается малое число $\varepsilon > 0$, например, $\varepsilon = 10^{-3}$.
- 3) Значения 0 и 1 в данных (24) заменяются на ε и $1 - \varepsilon$.
- 4) По новым данным проводятся вычисления для выбранного варианта.
- 5) Значение ε уменьшается, $\varepsilon = \varepsilon/2$.
- 6) Значения 0 и 1 в данных (24) заменяются на ε и $1 - \varepsilon$.
- 7) По новым данным проводятся повторные вычисления.
- 8) Точность вычислений определяется путём сравнения найденных параметров b и c для ε и $\varepsilon/2$.
- 9) Если точность вычислений не удовлетворяет, то ε уменьшается и производится переход на пункт 3.

Для проверки алгоритма этого пункта рассмотрен модельный пример

$$\{(y_i, t_i)\}; i = 1, \dots, 14;$$

где

$$t_1 = 0, t_{i+1} = t_i + 10, t_{14} = 130;$$

$$y_i = y(t_i) \cdot (1 + 0,01 \cdot RNd),$$

где $RNd \in [0, 1]$ – случайное число, $y(t_i)$ соответствует формуле (25) с коэффициентом $b = 0,2$ и $c = 0,2$. Расчеты показали, что при $\varepsilon < 10^{-3}$ ошибки в найденных коэффициентах меньше 1 %.

О дифференциальном распределении

Дифференциальное распределение в зависимости от радиуса частицы r получается с использованием формулы Стокса и перехода от рассмотрения зависимости от времени оседания к зависимости от радиуса частицы. Имеем:

$$(\rho_{\text{част}} - \rho_{\text{ж}}) \cdot V \cdot g = 6\pi r \cdot w \cdot \eta, \quad (41)$$

$$w = \frac{L}{t}, \quad (42)$$

здесь $\rho_{\text{част}}$ и $\rho_{\text{ж}}$ – плотность материала частиц и жидкости; V – объем частицы; g – ускорение свободного падения; w – скорость частицы; η – вязкость жидкости; L – высота столба жидкости.

Из (41) и (42) следует:

$$t = \frac{k^2}{r^2} \quad (43)$$

$$k = \sqrt{\frac{9 \cdot L \cdot \eta}{2g(\rho_{\text{част}} - \rho_{\text{ж}})}},$$

где k – постоянная эксперимента (константа Стокса). Тогда интегральная кривая распределения по размерам частиц получается как зависимость относительного веса частиц дисперсной фазы от радиуса при подстановке (43) в (25):

$$Q(r) = y(t(r)) = 1 - \exp\left(-b \frac{k^{2c}}{r^{2c}}\right). \quad (44)$$

Имеем:

$$\frac{dt}{dr} = -k^2 \cdot r^{-3}, \quad (45)$$

тогда из (25), (43), (45) получается дифференциальное распределение в зависимости от r :

$$\frac{dQ}{dr} = \frac{dy}{dt} \frac{dt}{dr} = -\exp\left(-b \frac{k^{2c}}{r^{2c}}\right) \cdot 2bc \cdot \frac{k^{2c}}{r^{2c+1}}. \quad (46)$$

Найдём r_* – радиус, которому соответствует максимальная доля частиц:

$$r_* = \arg\left\{\max_r\left(\frac{dQ}{dr}\right)\right\} =$$

$$= \arg_r\left(\frac{d^2Q}{dr^2} = 0\right) = k \left(\frac{2bc}{2c+1}\right)^{\frac{1}{2c}}. \quad (47)$$

Тогда максимальная доля частиц будет:

$$\left.\frac{dQ}{dr}\right|_{r_*} = \max\left(\frac{dQ}{dr}\right) = \exp\left(-1 - \frac{1}{2c}\right) \cdot \frac{2c+1}{k} \left(\frac{2c+1}{2bc}\right)^{\frac{1}{2c}}. \quad (48)$$

Анализ седиментации суспензии

Проведём седиментационную обработку результатов эксперимента по данным табл. 1.2.1 из [3], где использовалась суспензия оксида алюминия Al_2O_3 в дистиллированной воде. Для получения кривой осаждения суспензии определяли изменение веса чашечки, помещённой в суспензию, по мере накопления на ней осадка с помощью торсионных весов ВТ-500.

Таблица 7. Экспериментальные значения накопленного веса от времени осаждения

Table 7. Experimental values of accumulated weight versus deposition time

i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
$t_{i,e}$, мин/min	0,25	0,5	0,75	1	1,5	2	2,5	3	5	7	10	15	30	45
$P_{i,e}$, мг/mg	31,5	50,5	59,5	65,5	68,5	72,5	76,5	79,5	80,5	81,5	81,5	81,5	82,5	82,5

Плотность оксида алюминия – $3,99 \text{ г/см}^3$, высота столба суспензии до измерительной чашечки – $0,2 \text{ м}$. Эксперимент продолжается до тех пор, пока измерения веса осадка за 5 минут принимают очень близкие значения. Данные эксперимента представлены в табл. 7.

В соответствии с формулой (24) переходим к весовым долям и относительному времени. Находим параметры зависимости Розина–Раммлера по варианту 3 МНК с явными формулами нахождения параметров (37) и (36). Однако $y_{13} = y_{14} = 1$, непосредственное применение указанных формул приведет к аварийному останову, поэтому, следуя алгоритму, предложенному для решения проблем с особенностью, положим $y_{13} = 1 - 10^{-4}$, $y_{14} = 1 - 10^{-5}$, что позволяет обойти эту проблему.

На рис. 6 представлены экспериментальные значения в весовых долях и кривая осаждения, представленная зависимостью Розина–Раммлера, аппроксимирующей экспериментальные значения по МНК. Найденные параметры таковы $b=1,2138$, $c=0,576$.

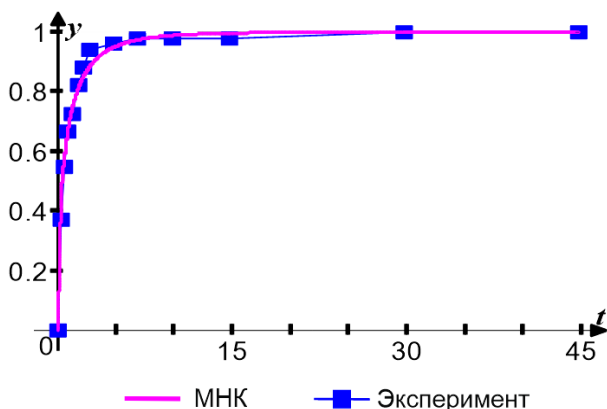


Рис. 6. Кривая седиментации из МНК и экспериментальные данные

Fig. 6. Sedimentation curve from the least squares method (LSM) and experimental data

Результаты седиментационного анализа, отражающие распределение частиц по размерам в системе, представляют в виде интегральной и дифференциальной функций (рис. 7, 8), вычисленных по формулам (44) и (46) соответственно. Максимальная доля частиц рассчитывается по (48).

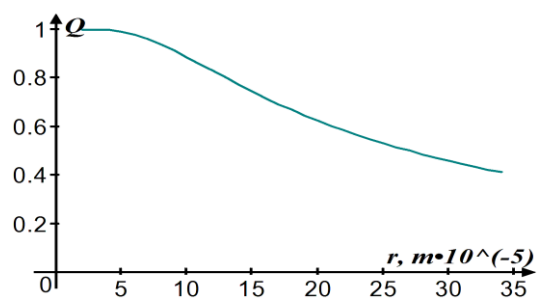


Рис. 7. Интегральная кривая распределения частиц по размерам

Fig. 7. Integral particle size distribution curve

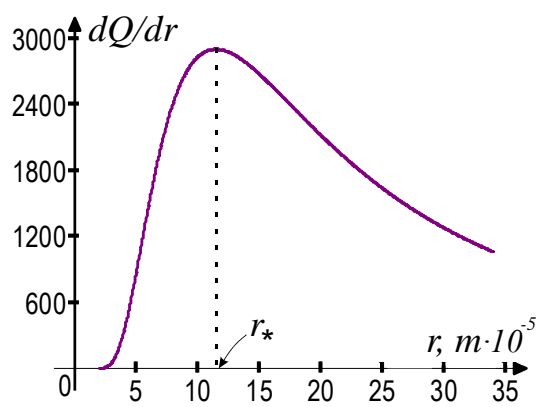


Рис. 8. Дифференциальная кривая распределения частиц по размерам

Fig. 8. Differential particle size distribution curve

Радиус, которому соответствует максимальная доля частиц эксперимента, определяем по формуле (47), он равен $r_* = 1.14 \cdot 10^{-4}$.

Заключение

Приведены варианты формул, полученных на основе МНК, позволяющие аппроксимировать экспериментальные данные соотношениями Шишковского и Розина–Раммлера с использованием как известных способов на основе нелинейного программирования, так и способов на основе решения трансцендентного уравнения. Приведены примеры применения полученных формул на данных реальных экспериментов.

Для известных алгебраических формул, которые позволяют найти решение безитерационно, но имеют особенность, предложен алгоритм обхода этой особенности.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Фролов Ю.Г. Курс коллоидной химии: поверхностные явления и дисперсные системы. – М.: Альянс, 2004. – 463 с.
2. Rosin P., Rammler E. The laws governing the fineness of powdered coal // *Journal of the Institute of Fuel*. – 1933. – Vol. 7. – № 31. – P. 29–36.
3. Манжай В.Н., Чеканцева Л.В. Нефтяные дисперсные системы. – Томск: Изд-во ТПУ, 2016. – 148 с.
4. Линник Ю.В. Метод наименьших квадратов и основы математико-статистической теории обработки наблюдений. – Л.: Физматгиз, 1962. – 352 с.
5. Квеско Н.Г., Росляк А.Т. Весовой седиментометр для автоматизированного измерения гранулометрического состава порошков // *Заводская лаборатория. Диагностика материалов*. – 2000. – № 7. – С. 37–40.
6. Леконцев Е.А. Исследование причин адсорбции поверхностно-активных веществ при ПАВ заводнении // *Теория и практика современной науки: Сборник статей VII Международной научно-практической конференции*. – Пенза: МЦНС Наука и Просвещение, 2022. – С. 202–204.
7. Щелочное-ПАВ-полимерное (ASP) заводнение – эффективный метод увеличения нефтеотдачи на месторождениях вязких нефтей / Б.Ж. Жаппасбаев, И. Гусенов, А.В. Шахворостов, Т.К. Ахмеджанов, С.Е. Кудайбергенов // *Добыча, подготовка, транспорт нефти и газа: Материалы 7-ой Всероссийской научно-практической конференции*. – Томск: ИОА СО РАН, 2016. – С. 90–93.
8. Повышение нефтеотдачи. Изучение адсорбции ПАВ-полимерных коктейлей / Н.Ю. Третьяков, Д.С. Адаховский, Н.В. Нестерова, Е.В. Кикирева // *Деловой журнал Neftegaz.RU*. – 2021. – № 8 (116). – С. 56–63.
9. Нвизуг-Би Л.К. Обзор современных представлений и анализ эффективности механизма вытеснения нефти из пористой среды с применением ПАВ // *Наука. Техника. Технологии (политехнический вестник)*. – 2018. – № 2. – С. 94–111.
10. Hatch L.P. Flow of fluids through granular material: Filtration, expansion, and hindered settling // *Eos, Transactions, American Geophysical Union*. – 1943. – Т. 24. – № 2. – P. 536–546.
11. Study on the stability of a shear-thinning suspension used in oil well drilling / F.M. Fagundes, N.B.C. Santos, J.J.R. Damasceno, F.O. Arouca // *Oil & Gas Sciences and Technology – Revue d'IFP Energies nouvelles*. – 2018. – Vol. 73. – 10.
12. Дэннис Дж.-мл., Шнабель Р. Численные методы безусловной оптимизации и решения нелинейных уравнений. – М.: Мир, 1988. – 440 с.
13. Малышева Ж.Н., Новаков И.А. Теоретическое и практическое руководство по дисциплине «Поверхностные явления и дисперсные системы». – Волгоград: Изд-во ВолгГТУ, 2007. – 392 с.
14. From surface tension to molecular distribution: Modeling surfactant adsorption at the air–water interface / M. Peng, T.T. Duignan, C.V. Nguyen, A.V. Nguyen // *Langmuir*. – 2021. – Vol. 37. – № 7. – P. 2237–2255.
15. Adsorption of sodium dodecyl sulfate at water–dodecane interface in relation to the oil in water emulsion properties / S. Llamas, E. Santini, L. Liggieri, F. Salerni, D. Orsi, L. Cristofolini, F. Ravera // *Langmuir*. – 2018. – Vol. 34. – № 21. – P. 5978–5989.
16. Peng M., Nguyen A.V. Adsorption of ionic surfactants at the air-water interface: The gap between theory and experiment // *Advances in Colloid and Interface Science*. – 2020. – Vol. 275. – Art. 102052.
17. Machrafi H. Surface tension of nanoparticle dispersions unravelled by size-dependent non-occupied sites free energy versus adsorption kinetics // *NPJ Microgravity*. – 2022. – Vol. 8. – Art. 47.
18. Effect of silicon carbide on the surface tension and adsorption of SDS on the sandstone formation / A.P. Pandey, V. Roy, H. Kesarwani, G. Mittal, S. Sharma, A. Saxena // *Offshore Technology Conference Asia*. – Kuala Lumpur, 2022. – Art. OTC-31439-MS.
19. Иванов В.А. Применение технологии ASP-заводнения для повышения эффективности разработки нефтяных месторождений: выпускная квалификационная работа бакалавра. – Томск: ТПУ, 2023. – 80 с.
20. Фигуровский Н.А. Седиментометрический анализ. – М.: Изд-во АН СССР, 1948. – 334 с.
21. Vítěz T., Trávníček P. Particle size distribution of a waste sand from a waste water treatment plant with use of Rosin–Rammler and Gates–Gaudin–Schumann mathematical model // *Acta Universitatis Agriculturae et Silviculturae Mendelianae Brunensis*. – 2014. – Vol. 59. – № 3. – P. 197–202.
22. Brown W.K., Wohletz K.H. Derivation of the Weibull distribution based on physical principles and its connection to the Rosin–Rammler and lognormal distributions // *Journal of Applied Physics*. – 1995. – Vol. 78. – № 4. – P. 2758–2763.
23. An experimental study on the particle size and shape distribution of coal drill cuttings by dynamic image analysis / Z. Zhang, X. Lan, G. Wen, Q. Long, X. Yang // *Geofluids*. – 2021. – Vol. 2021. – Art. 5588248.
24. Дозморов П.С., Росляк А.Т. Методика преобразования накопительной функции седиментометра в гранулометрический состав горной породы // *Наука и образование: электронное научно-техническое издание*. – 2013. – № 6. – С. 267–274.

Информация об авторах

Владислав Михайлович Галкин, кандидат физико-математических наук, доцент отделения нефтегазового дела Инженерной школы природных ресурсов Национального исследовательского Томского политехнического университета, Россия, 634050, г. Томск, пр. Ленина, 30. vlg@tpu.ru

Юрий Степанович Волков, доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник Института математики им. С.Л. Соболева СО РАН, Россия, 630090, г. Новосибирск, пр. Коптюга, 4. volkov@math.nsc.ru; <http://orcid.org/0000-0002-7298-8578>

Лилия Васильевна Чеканцева, старший преподаватель отделения нефтегазового дела Инженерной школы природных ресурсов Национального исследовательского Томского политехнического университета, Россия, 634050, г. Томск, пр. Ленина, 30. chlb@tpu.ru

Владимир Александрович Иванов, магистрант отделения нефтегазового дела Инженерной школы природных ресурсов Национального исследовательского Томского политехнического университета, Россия, 634050, г. Томск, пр. Ленина, 30. vai14@tpu.ru

Поступила в редакцию: 29.09.2023

Поступила после рецензирования: 26.10.2023

Принята к публикации: 20.12.2023

REFERENCES

1. Frolov Yu.G. *Colloidal chemistry course: surface phenomena and disperse systems*. Moscow, Alyans Publ., 2004. 463 p. (In Russ.)
2. Rosin P., Rammler E. The laws governing the fineness of powdered coal. *Journal of the Institute of Fuel*, 1933, vol. 7, no. 31, pp. 29–36.
3. Manzhai V.N., Chekantseva L.V. *Petroleum dispersed systems*. Tomsk, TPU Publ., 2016. 148 p. (In Russ.)
4. Linnik Yu.V. *The least squares method and the fundamentals of the mathematical and statistical theory of observation processing*. Leningrad, Fizmatgiz Publ., 1962. 352 p. (In Russ.)
5. Kvesko N.G., Roslyak A.T. Gravity sedimentometer for automated measurement of particle size distribution of powders. *Industrial Laboratory. Diagnostics of Materials*, 2000, no. 7, pp. 37–40. (In Russ.)
6. Lekontsev E.A. Study of the causes of adsorption of surfactants during surfactant flooding. *Theory and practice of modern science. Collection of articles of the VII International Scientific and Practical Conference*. Penza, MTSNS Nauka i Prosveshchenie Publ., 2022. pp. 202–204. (In Russ.)
7. Zhappasbaev B.Zh., Gusenov I., Shakhvorostov A.V., Akhmedzhanov T.K., Kudaibergenov S.E. Alkali-surfactant-polymer (ASP) flooding is an effective method for increasing oil recovery in viscous oil fields. *Oil and gas production, preparation, transportation. Proc. of the 7th All-Russian Scientific and Practical Conference*. Tomsk, IOA SO RAN Publ., 2016. pp. 90–93. (In Russ.)
8. Tretyakov N.Yu., Adakhovskii D.S., Nesterova N.V., Kikireva E.V. Enhanced oil recovery. Study of adsorption of surfactant-polymer cocktails. *Neftegaz.RU*, 2021, no. 8 (116), pp. 56–63. (In Russ.)
9. Nvizug-Bi L.K. Review of modern concepts and analysis of the effectiveness of the mechanism for displacing oil from porous medium using surfactants. *The science. Technique. Technologies (Polytechnic Bulletin)*, 2018, no. 2, pp. 94–111. (In Russ.)
10. Hatch L.P. Flow of fluids through granular material: Filtration, expansion, and hindered settling. *Eos, Transactions, American Geophysical Union*, 1943, vol. 24, no. 2, pp. 536–546.
11. Fagundes F.M., Santos N.B.C., Damasceno J.J.R., Arouca F.O. Study on the stability of a shear-thinning suspension used in oil well drilling. *Oil & Gas Sciences and Technology – Revue d'IFP Energies nouvelles*, 2018, vol. 73, art. 10.
12. Dennis J.E., Schnabel R.B. *Numerical methods for unconstrained optimization and nonlinear equations*. Englewood Cliffs, Prentice-Hall, 1983. 378 p.
13. Malysheva Zh.N., Novakov I.A. *Theoretical and practical guide to the discipline "Surface phenomena and dispersed systems"*. Volgograd, VolgGTU Publ., 2007. 392 p. (In Russ.)
14. Peng M., Duignan T.T., Nguyen C.V., Nguyen A.V. From surface tension to molecular distribution: Modeling surfactant adsorption at the air–water interface. *Langmuir*, 2021, vol. 37, no. 7, pp. 2237–2255.
15. Llamas S., Santini E., Liggieri L., Salerni F., Orsi D., Cristofolini L., Ravera F. Adsorption of sodium dodecyl sulfate at water–dodecane interface in relation to the oil in water emulsion properties. *Langmuir*, 2018, vol. 34, no. 21, pp. 5978–5989.
16. Peng M., Nguyen A.V. Adsorption of ionic surfactants at the air-water interface: the gap between theory and experiment. *Advances in Colloid and Interface Science*, 2020, vol. 275, art. 102052.
17. Machrafi H. Surface tension of nanoparticle dispersions unravelled by size-dependent non-occupied sites free energy versus adsorption kinetics. *NPJ Microgravity*, 2022, vol. 8, art. 47.
18. Pandey A.P., Roy V., Kesarwani H., Mittal G., Sharma S., Saxena A. Effect of silicon carbide on the surface tension and adsorption of SDS on the sandstone formation. *Offshore Technology Conference Asia*, Kuala Lumpur, 2022, art. OTC-31439-MS.
19. Ivanov V.A. *Application of ASP-flooding technology to improve the efficiency of oil field development*. Bachelor's thesis. Tomsk, TPU Publ., 2023. 80 p. (In Russ.)
20. Figurovskii N.A. Sedimentometric analysis. Moscow, AN SSSR Publ., 1948. 334 p. (In Russ.)
21. Vítěz T., Trávníček P. Particle size distribution of a waste sand from a waste water treatment plant with use of Rosin–Rammler and Gates–Gaudin–Schumann mathematical model. *Acta Universitatis Agriculturae et Silviculturae Mendelianae Brunensis*, 2014, vol. 59, no. 3, pp. 197–202.
22. Brown W.K., Wohletz K.H. Derivation of the Weibull distribution based on physical principles and its connection to the Rosin–Rammler and lognormal distributions. *J. Appl. Phys.*, 1995, vol. 78, no. 4, pp. 2758–2763.
23. Zhang Z., Lan X., Wen G., Long Q., Yang X. An experimental study on the particle size and shape distribution of coal drill cuttings by dynamic image analysis. *Geofluids*, 2021, vol. 2021, art. 5588248.
24. Dozmorov P.S., Roslyak A.T. Methodology for converting the accumulation function of a sedimentometer into the granulometric composition of rock. *Science and Education*, 2013, no. 6, pp. 267–274. (In Russ.)

Information about the authors

Vladislav M. Galkin, Cand. Sc., Associate Professor, National Research Tomsk Polytechnic University, 30, Lenin avenue, Tomsk, 634050, Russian Federation. vlg@tpu.ru

Yuriy S. Volkov, Dr. Sc., Chief Researcher, Sobolev Institute of Mathematics, 4, Koptyug avenue, Novosibirsk, 630090, Russian Federation. volkov@math.nsc.ru; <http://orcid.org/0000-0002-7298-8578>

Liliya V. Chekantseva, Senior Lecturer, National Research Tomsk Polytechnic University, 30, Lenin avenue, Tomsk, 634050, Russian Federation. chlb@tpu.ru

Vladimir A. Ivanov, Master's Student, National Research Tomsk Polytechnic University, 30, Lenin avenue, Tomsk, 634050, Russian Federation. vai14@tpu.ru

Received: 29.09.2023

Revised: 26.10.2023

Accepted: 20.12.2023