

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ СИДЯЩЕЙ КАПЛИ БЕЗГРАДИЕНТНЫМ МЕТОДОМ

**А. А. Сокуров**

*Институт прикладной математики и автоматизации КБНЦ РАН,*

*Нальчик, КБР, Россия*

*e-mail: isokuroff@mail.ru*

*Аннотация.* В статье представлена новая методика для определения поверхностного натяжения и краевого угла по массиву точек оцифрованного профиля сидящей капли. Главная ее особенность состоит в отказе от использования градиентных методов на всех этапах вычислительного процесса. Проведен сравнительный анализ преимуществ и недостатков методики по отношению к традиционным подходам. Разработан программный комплекс, эффективно реализующий всю совокупность алгоритмов. С его помощью на примере реальных жидкостей проведены вычислительные эксперименты. Анализ их результатов подтверждает корректность и надежность предложенных в работе идей.

*Ключевые слова:* сидящая капля, поверхностное натяжение, капиллярная постоянная, уравнение Юнга-Лапласа, симплекс-метод Нелдера-Мида, капиллярные мениски, краевой угол

*Финансирование.* Работа выполнена за счет средств бюджета Института прикладной математики и автоматизации КБНЦ РАН. Никаких дополнительных грантов на проведение или руководство данным конкретным исследованием получено не было.

*Конфликт интересов.* Автор данной работы заявляет, что у него нет конфликта интересов.

*Ссылка для цитирования:* Сокуров А.А. Определение параметров сидящей капли безградиентным методом. *Коллоидный журнал / Colloid journal.* 2026. Т. 88. № 1. С. 115–123. <https://doi.org/10.31851/S0023291226010089>

Поступила в редакцию 04.07.2025

После доработки 03.09.2025

Принята к публикации 03.09.2025

## GRADIENT–FREE METHOD FOR DETERMINING SESSILE DROP PARAMETERS

**A. A. Sokurov**

*Institute of Applied Mathematics and Automation – the filial branch of Federal State Budgetary Scientific Establishment  
“Federal Scientific Center “Kabardin–Balkar Scientific Center of Russian Academy of Sciences”,  
Nalchik, Kabardino–Balkarian Republic, Russia  
e-mail: isokuroff@mail.ru*

*Abstract.* The article presents a new method for determining surface tension and contact angle from an array of points of a digitized sessile drop profile. Its key feature is the complete avoidance of gradient-based methods at all stages of the computational process. A comparative analysis of the advantages and disadvantages of the method relative to traditional approaches is conducted. A software package has been developed that efficiently implements the entire set of algorithms. Using this package, computational experiments were performed on real liquids. An analysis of the results confirms the correctness and reliability of the ideas proposed in the work.

*Keywords:* sessile drop, surface tension, capillary constant, Young–Laplace equation, Nelder–Mead simplex method, capillary menisci, contact angle

*Funding.* This work was funded by the budget of the Institute of Applied Mathematics and Automation of the Kabardino–Balkar Scientific Centre of Russian Academy of Sciences. No additional grants have been received to conduct or direct this particular study.

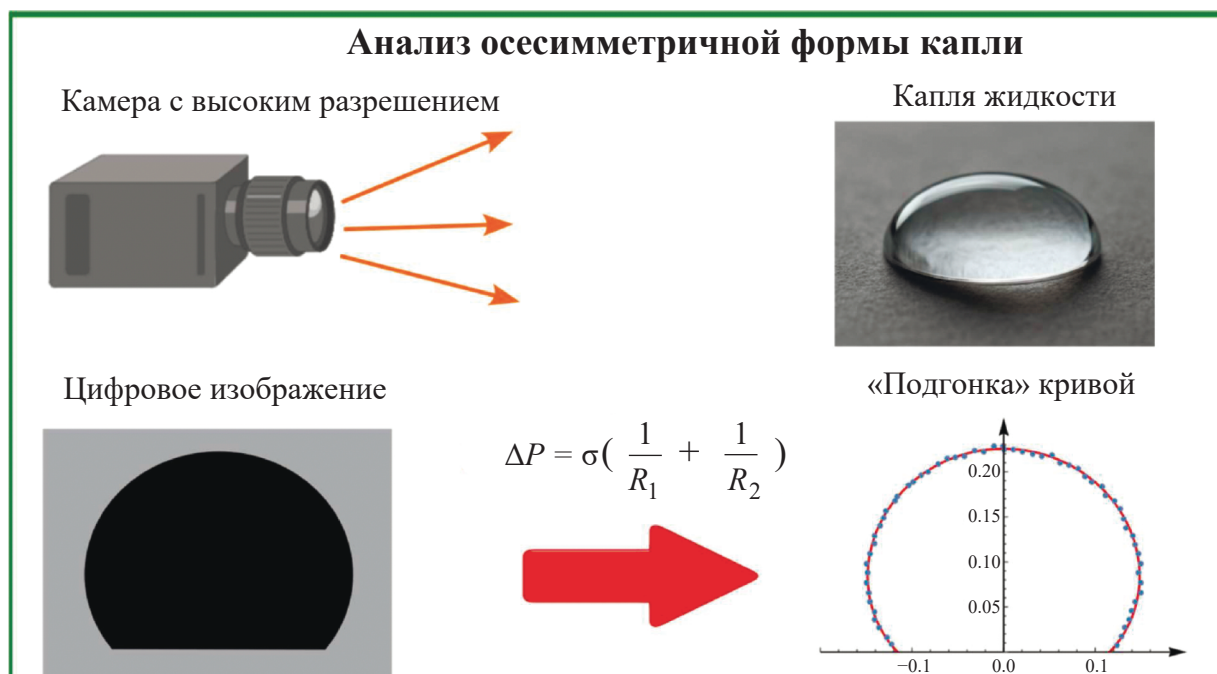
*Conflict of interests.* The author of this work declares that he has no conflict of interest.

*For Citation:* Sokurov A.A. Gradient–Free Method for Determining Sessile Drop Parameters. *Kolloidnyy Zhurnal / Colloid Journal*. 2026;88(1):115–123. (In Russ.) <https://doi.org/10.31851/S0023291226010089>

Received July 04, 2026

Revised September 03, 2026

Accepted September 03, 2026



## ВВЕДЕНИЕ

Поверхностное натяжение и краевой угол смачивания представляют собой важнейшие термодинамические параметры, характеризующие поведение границы раздела между различными объемными фазами. Отражая баланс межмолекулярных сил на межфазной границе и в зоне трехфазного контакта, они играют центральную роль в широком спектре фундаментальных и прикладных задач.

Такие явления, как смачивание, растекание, образование и стабильность пен и эмульсий, капиллярные эффекты, процессы нанесения покрытий и печати, напрямую зависят от значений поверхностного натяжения и краевого угла [1–3]. В биологических системах и медицине эти параметры важны для понимания поведения клеточных мембран, диагностики патологий по составу биожидкостей, а также разработки новых лекарственных средств [4–6]. В промышленности точное и надежное измерение поверхностного натяжения и краевого угла имеет критическое значение для обеспечения качества продукции и оптимизации технологических процессов [7]. Последнее особенно актуально в нефтеперерабатывающей, химической, пищевой, фармацевтической и микроэлектронной отраслях, где даже небольшие изменения смачивающих свойств материалов могут существенно повлиять на эффективность производственных процессов и эксплуатационные характеристики конечного продукта.

К настоящему времени разработано множество методов для измерения поверхностного натяжения и краевого угла [8]. Большинство из них основано на прямом измерении сил или других физических характеристик

капиллярной системы. К числу наиболее распространенных относятся: метод отрыва кольца, капиллярного поднятия, максимального давления пузырька и метод Вильгельми. Главным недостатком методов такого типа является низкая точность измерений, а в отдельных случаях – сложность и неудобство практической реализации. Можно утверждать, что на сегодняшний день почти все они утратили свою актуальность, по крайней мере, в отношении к газо/жидкофазным системам. Исключения касаются лишь металлов.

Помимо прямых методов, существуют также косвенные, в которых поверхностное натяжение и краевой угол определяются путем измерения связанных с ними величин. Назовем их условно аналитическими. В основе аналитических методов лежат количественные соотношения между физическими параметрами равновесных капиллярных менисков и их линейными размерами (центральная высота, диаметр, радиус контактной линии, объем и т.п.). В рамках этих подходов геометрические характеристики мениска измеряются непосредственно, например, по фотоснимкам или с помощью видеоизмерительного микроскопа. Затем физические параметры, алгебраически связанные с поверхностным натяжением, находятся из соответствующих уравнений. Аналитические методы также не лишены недостатков: плохая точность, необходимость сбора данных только в заранее определенных точках мениска, узкий диапазон размеров и форм менисков, специфические ограничения на величину краевого угла и род жидкости.

На сегодняшний день наиболее точным и универсальным методом измерения поверхностного натяжения и краевого угла является метод численного анализа

равновесных форм капиллярных менисков, обладающих осевой симметрией. Объектом исследований в них выступают, главным образом, сидящие и висящие капли. Впервые метод был представлен в [9]. Суть его заключается в «подгонке» теоретического профиля капли, находящейся в состоянии термодинамического равновесия во внешнем силовом поле, к набору экспериментальных точек. Делается это путем минимизации целевой функции, выражающей суммарное отклонение пробного профиля от заданных точек. На финальном этапе на основе информации в минимальной точке и находят искомые величины. Под теоретическим профилем здесь понимается кривая-решение параметризованной системы дифференциальных уравнений Башфорта-Адамса. Координаты экспериментальных точек извлекают из оцифрованных фотоснимков реальных капель.

В дальнейшем описанный прием неоднократно совершенствовался [10–13]. В частности: были рассмотрены различные комбинации варьируемых переменных в оптимизационной задаче; были проанализированы способы задания начального приближения, необходимого для запуска итерационного процесса; были улучшены компьютерные техники выделения границы капель на цифровых фотографиях. Однако, несмотря на прогресс в отдельных аспектах, основополагающий алгоритм минимизации целевой функции остался неизменным – это метод Ньютона-Рафсона и его аналоги (например, алгоритм Левенберга-Марквардта). Как известно, метод Ньютона относится к классу градиентных методов и обладает высокой скоростью сходимости. Но его сходимость не гарантирована и сильно зависит от выбора начального приближения. При неудачном выборе начального приближения или нарушении условий на гладкость функций метод Ньютона либо теряет высокую скорость, либо вовсе расходится. Во-вторых, в данном случае он применяется к многопараметрической функции, составные части которой не имеют аналитического представления. Это приводит к необходимости попутного решения начальной задачи для системы из десятка нелинейных дифференциальных уравнений. Вышесказанное в итоге делает соответствующий программно-вычислительный комплекс чрезвычайно сложным и неустойчивым.

В настоящей работе для определения поверхностного натяжения и краевого угла предлагается подход, полностью исключающий использование градиентных методов на всех этапах вычислений. Как следствие – численные алгоритмы значительно упрощаются. Благодаря эффективным механизмам оптимизации увеличение процессорного времени остается в пределах, допустимых для большинства практических ситуаций. Подход реализуется применительно к сидящей капле, однако его обобщение на случай висящей капли представляется несложным.

## МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Рассматривается капля жидкости на горизонтально ориентированной гладкой подложке. Все образующие

единую термодинамическую систему флюидные фазы считаются однородными. Введем систему координат, связанную с профилем идеальной осесимметричной капли, как показано на рис. 1.

Обратим внимание, что апекс капли не обязательно совпадает с началом координат и может располагаться в произвольной точке  $(x_0, z_0)$  плоскости  $XZ$ . Условием механического равновесия капли в поле силы тяжести является выполнение уравнения капиллярности Лапласа в каждой точке ее свободной поверхности:

$$\sigma \left( \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) = \Delta p_0 + \Delta \rho g (z - z_0), \quad (1)$$

где  $\sigma$  – поверхностное натяжение на границе «жидкость–газ»,  $R_{1,2}$  – главные радиусы кривизны поверхности капли,  $\Delta p_0$  – избыточное давление в апексе капли,  $\Delta \rho$  – разность плотностей жидкой и газообразной фаз,  $g$  – ускорение свободного падения. Комбинируя известные из геометрии соотношения для плоских кривых, из (1) получается система дифференциальных уравнений Башфорта-Адамса, описывающая правую ветвь профиля капли:

$$\frac{dx}{d\varphi} = \frac{\cos \varphi}{2b + c(z - z_0) - \sin \varphi / (x - x_0)}, \quad (2a)$$

$$\frac{dz}{d\varphi} = \frac{\sin \varphi}{2b + c(z - z_0) - \sin \varphi / (x - x_0)}, \quad (2b)$$

где  $b$  – кривизна профиля в апексе,  $c = \Delta \rho g / \sigma$  – капиллярная постоянная,  $\varphi$  – угол наклона касательной к профилю с положительным направлением оси  $X$ ,  $(x, z)$  – координаты произвольной точки на профиле. Для численного моделирования капель систему уравнений (2a)–(2b) обычно дополняют начальными условиями в апексе:

$$x(\varphi = 0) = x_0, \quad z(\varphi = 0) = z_0. \quad (2c)$$

Равновесная форма капли однозначно определяется значениями параметров  $b$  и  $c$ , тогда как значения  $x_0$  и  $z_0$  задают положение ее апекса в системе координат.

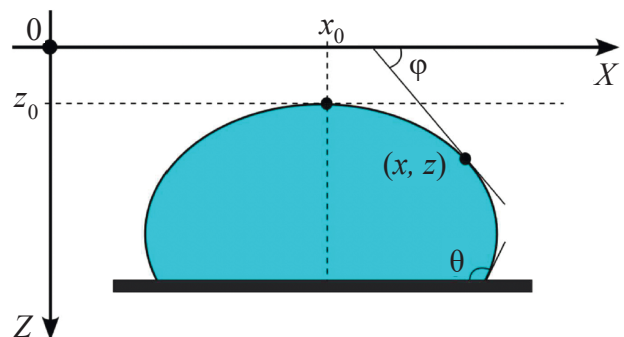


Рис. 1. Сидящая капля и связанная с ней система координат

Как хорошо известно, начальная задача (2) разрешима в явном виде только в отсутствие внешнего поля при  $c = 0$ . В остальных случаях необходимо привлечение численных методов. Для численного интегрирования (2) с заданной точностью нами используется метод Рунге-Кутты-Фельберга 4-го порядка [14]. Он относится к семейству вложенных адаптивных методов Рунге-Кутты и реализует комбинацию двух схем: схемы четвертого порядка, используемой для расчета основного приближенного решения, и схемы пятого порядка, которая служит для оценки локальной погрешности и управления величиной шага интегрирования. В практических расчетах метод Рунге-Кутты-Фельберга обеспечивает высокую точность при относительно малых в сравнении с аналогами вычислительных затратах.

### ОПТИМИЗАЦИОННАЯ ПРОЦЕДУРА

Пусть дан массив экспериментальных точек, полученных в результате измерения профиля реальной капли. Забегая вперед, скажем, что в данной работе вопросы, связанные с цифровой обработкой видеозаписей и устройством экспериментальных установок, не рассматриваются. Отправным пунктом в методе анализа осесимметричных форм капиллярных менисков служит целевая функция  $E$ , характеризующая степень отклонения массива точек от теоретического профиля. Обычно она определяется как сумма квадратов расстояний между профилем и каждой точкой:

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \{e_i = l^2(p_i, \mathcal{L})\}, \quad (3)$$

где  $N$  – общее число точек,  $l$  – расстояние по нормали,  $p_i$  – экспериментальная точка с координатами  $(\tilde{x}_i, \tilde{z}_i)$ ,  $\mathcal{L}$  – теоретический профиль. Дальнейшие рассуждения предполагают, что теоретический профиль и экспериментальные точки располагаются в одной и той же

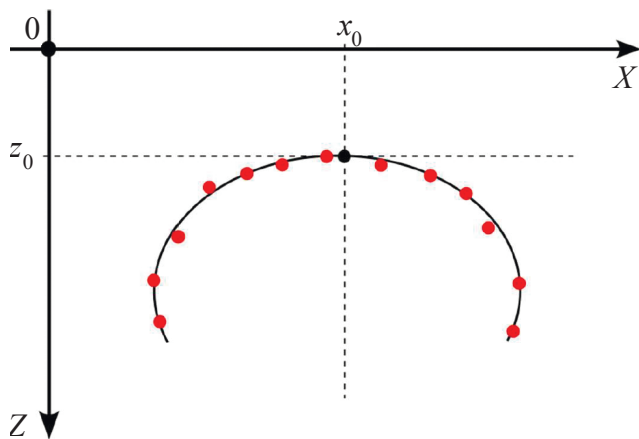


Рис. 2. Теоретический профиль и экспериментальные точки

системе координат (рис. 2), а все расчеты ведутся в размерных величинах.

Оптимизационная задача ставится следующим образом: найти такой набор параметров  $P = \{b, c, x_0, z_0\}$  системы уравнений (2), при котором теоретический профиль доставляет глобальный минимум целевой функции (3). После того как ее решение станет известным, из параметра  $c$  элементарно выразится значение поверхностного натяжения  $\sigma$ . Для нахождения контактного угла  $\theta$  остается проинтегрировать задачу (2) с учетом уже известного  $P = P_{\min}$  до достижения граничного условия

$$z|_{\varphi=\theta} = \max(\tilde{z}_i).$$

Поиск минимума целевой функции  $E$  будем проводить методом Нелдера-Мида [15]. Метод Нелдера-Мида представляет собой численный метод многомерной оптимизации, не требующий вычисления производных. В расчетах участвуют только значения функции. Он прост в реализации и эффективен для задач малой и средней размерности (не более 20 переменных).

Значение функции  $E$  в точке  $P$  складывается из расстояний между каждой экспериментальной точкой и соответствующим  $P$  теоретическим профилем. В свою очередь, квадрат расстояния между  $i$ -й точкой и профилем находится как минимум функции

$$e_i(\varphi) = [x(\varphi) - \tilde{x}_i]^2 + [z(\varphi) - \tilde{z}_i]^2$$

на отрезке  $[0, \pi]$ . Экстремумы  $e_i$  являются корнями уравнения

$$\frac{de_i}{d\varphi} = 2 \left[ (x - \tilde{x}_i) \frac{dx}{d\varphi} + (z - \tilde{z}_i) \frac{dz}{d\varphi} \right] = 0.$$

Принимая во внимание явные выражения для производных  $x(\varphi)$  и  $z(\varphi)$  из системы (2), находим

$$\frac{de_i}{d\varphi} = \frac{2[(x - \tilde{x}_i) \cos \varphi + (z - \tilde{z}_i) \sin \varphi]}{2b + c(z - z_0) - \sin \varphi / (x - x_0)} = 0.$$

Но раз знаменатель дроби в последнем уравнении не может обращаться в нуль [16], оно эквивалентно следующему уравнению:

$$(x - \tilde{x}_i) \cos \varphi + (z - \tilde{z}_i) \sin \varphi = 0. \quad (4)$$

Для численного решения (4) будем использовать метод Брента [17]. Как и метод Нелдера-Мида, он не нуждается в производных и в контексте обсуждаемой проблемы обладает рядом преимуществ. Во-первых, это гарантированная сходимость. Во-вторых, достигается высокая скорость сходимости, немногим меньшая скорости метода Ньютона. И в-третьих, нет нужды в начальном приближении к корню, а только в его локализации: корни (4) заведомо принадлежат интервалу  $[0, \pi]$ .

С уравнением (4) связана одна трудность. Метод Брента в процессе поиска корней требует вычисления множества промежуточных значений  $x$  и  $z$ , что подразумевает многократное решение задачи (2). Поскольку такая процедура выполняется для всех экспериментальных точек, последнее приводит к значительным расходам вычислительных ресурсов. В предшествующих работах принимались различные меры по снижению нагрузки на ЭВМ в данном вопросе. Например, задача (2) для фиксированного  $P$  решалась только один раз, после чего в дальнейших расчетах участвовала интерполяционная кривая. Однако в подходе с интерполяцией возникают сложности с контролем точности вычислений. Заранее неизвестно, по скольким точкам ее производить, чтобы обеспечить желаемую точность. Число узлов интерполяции может различаться в зависимости от набора параметров  $P$ . Нами в целях экономии процессорного времени применяется кэширование. Суть его в следующем. При фиксированном  $P$  заранее рассчитываются координаты определенного числа опорных точек профиля. Затем, в зависимости от того, к какому участку принадлежит задаваемое  $\varphi$ , координаты ближайшей опорной точки в обход апекса капли берутся в качестве начальных условий системы (2). После того как значение функции  $E$  для аргумента  $P$  вычислено, кэш сбрасывается. Все расчеты с уравнениями (2) и (4) при этом ведутся с одинаковой точностью. Сравнительные тесты показывают, что прием с кэшированием оказывается эффективным и позволяет кратно экономить ресурсы ЭВМ с сохранением прозрачности вычислений.

Для инициализации метода Нелдера-Мида требуется указать начальное приближение. В данном случае это конфигурация многогранника, построенного по пяти точкам  $P_k$ . В качестве вершины  $P_0$  рекомендуется

задавать параметры окружности или эллипса, проведенных через исходный массив точек методом наименьших квадратов. Отметим, что оба варианта имеют точное решение [11]. Остальные вершины многогранника получаются добавлением небольших фиксированных возмущений к каждой из координат  $P_0$ . Если известны грубые значения искомого величин, то  $P_0$  можно формировать с их учетом. Единственное жесткое условие, которое предъявляется к выбору вершин – они должны образовать замкнутый многогранник.

Метод Нелдера-Мида относится к методам безусловной минимизации. В то же время имеются очевидные ограничения на возможные значения капиллярной постоянной. В процессе работы метода одна из вершин многогранника может выйти за границы физически допустимой области. Как правило, такое происходит при неудачном задании начального многогранника или настройки управляющих параметров самого метода. Чтобы избежать подобных ситуаций, необходимо добавить проверку вершин на каждой итерации и корректировать их через проекцию на допустимое множество. Второй способ заключается в модифицировании целевой функции путем добавления штрафа за выход за границы.

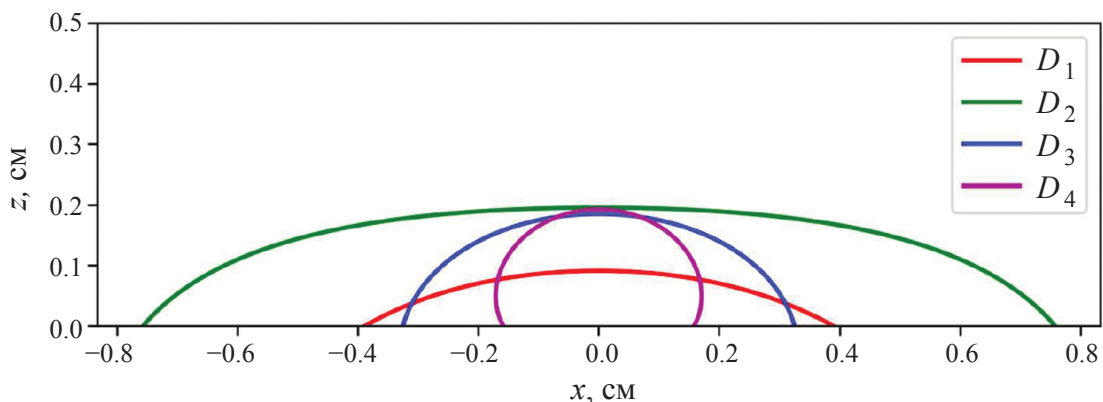
#### ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

В целях валидации методики была проведена серия вычислительных экспериментов. Путем решения задачи (2) генерировались теоретические профили сидящих капель различных размеров, форм и углов контакта.

Для определенности в экспериментах использовались значения капиллярных постоянных, соответствующих

**Таблица 1.** Параметры капель в вычислительных экспериментах

Параметры	$D_1$ (вода)	$D_2$ (этанол)	$D_3$ (глицерин)	$D_4$ (ртуть)
$c, \text{см}^{-2}$	13.448	19.511	27.402	34.707
$b, \text{см}^{-2}$	1	0.3	2	5
$\theta^\circ$	30	50	75	120



**Рис. 3.** Теоретические профили капель в вычислительных экспериментах

реальным жидкостям и металлам: вода, этанол, глицерин и ртуть. Полный набор параметров задачи (2) приведен в табл. 1.

Затем формировались массивы точек, равномерно распределенных вдоль всего профиля капли. Эти массивы выступали в качестве «экспериментальных данных» и подавались на вход программы, реализующей описанную методику. Относительные погрешности в процентах в полученных результатах представлены в табл. 2. Можно видеть, что они пренебрежимо малы как в случае капиллярной постоянной, так и в случае контактного угла.

Точность численного интегрирования задачи (2) и решения уравнения (4) в ходе экспериментов составляла  $10^{-9}$ ; входной массив состоял из 1000 точек. Начальные значения параметров  $b$  и  $(x_0, z_0)$  задавались на основе эллипсоидального приближения, а  $c$  принималось равным единице. Метод Нелдера-Мида завершал свою работу при одновременном выполнении двух условий: 1) разница в абсолютной величине между значениями целевой функции  $E$  в вершинах симплекса меньше  $10^{-9}$  см; 2) по каждой координате разница между лучшей вершиной (с минимальным значением  $E$ ) и всеми остальными меньше  $10^{-9}$  (см,  $\text{см}^{-1}$  и  $\text{см}^{-2}$ ).

В табл. 2 подтверждается корректность предложенной методики. Однако следует иметь в виду, что ее валидация проводилась на искусственно сгенерированных данных. Решалась обратная задача нахождения параметров, исходя из теоретических точек. В реальных же условиях выделение контура капли неизбежно сопряжено с ошибками оцифровки. Поэтому для более адекватной имитации процесса оцифровки профиля капли, а также для проверки устойчивости методики к выбросам смоделированные в предыдущих вычислительных экспериментах теоретические профили были подвергнуты искажению согласно [13]. Для этого координаты рассчитанных точек  $(x_i, z_i)$  преобразовывались в соответствии с соотношениями:

$$\tilde{x}_i = p_x \times \text{round}(x_i / p_x),$$

$$\tilde{z}_i = p_z \times \text{round}(z_i / p_z),$$

где  $p_x, p_z$  характеризуют линейные размеры пикселя матрицы оптической системы вдоль осей  $X$  и  $Z$ . Оптимизационная задача решалась заново, используя искаженные таким образом входные данные. Погрешности результатов при  $p_x = p_z = 10$  мкм (таковы типичные размеры пикселей современных фотоаппаратов) приведены в табл. 3.

Как можно видеть, погрешности достаточно малы, что делает методику пригодной для большинства практических и научных приложений.

Этап минимизации целевой функции  $E$  является ключевым в методе анализа осесимметричных форм капиллярных менисков. Применение здесь метода Нелдера-Мида имеет один недостаток. В сравнении с градиентными методами он ожидаемо оказывается не столь эффективным в плане скорости сходимости. В вычислительных экспериментах выше время работы программы достигало десятков секунд. Для аппаратных систем, функционирующих в режиме реального времени, подобная задержка может считаться критической. Тенденцию изменения продолжительности  $t$  выполнения программы по мере увеличения числа точек  $N$  профиля можно наблюдать на рис. 4. Обращает на себя внимание практически линейный характер изменения времени  $t$ . Здесь стоит сказать, что на скорость сходимости метода Нелдера-Мида при прочих равных условиях влияют настройки его параметров, задающих степень деформации многогранника. В работе использовались настройки по умолчанию. Какие-либо рекомендации по оптимальной установке этих параметров в научной литературе, к сожалению, отсутствуют.

С другой стороны, метод Нелдера-Мида обладает рядом качеств, выгодно отличающих его от градиентных. Во-первых – простота реализации алгоритма. Математический аппарат в подходе с использованием данного метода существенно упрощается и становится менее подверженным случайным ошибкам. То же самое касается и программной части. Во-вторых, метод Нелдера-Мида более лоялен в подборе начального приближения. К слову, в тестах выше стартовые значения параметра  $c$  приравнивались единице, что сильно меньше эталонных значений. Вдобавок, эллипс не всегда

**Таблица 2.** Относительные погрешности вычисления параметров

Параметры	$D_1$	$D_2$	$D_3$	$D_4$
$\Delta c, \%$	$3.375 \times 10^{-5}$	$2.793 \times 10^{-6}$	$8.605 \times 10^{-6}$	$1.934 \times 10^{-5}$
$\Delta \theta, \%$	$3.917 \times 10^{-6}$	$1.263 \times 10^{-6}$	$3.085 \times 10^{-6}$	$3.572 \times 10^{-6}$

**Таблица 3.** Относительные погрешности вычисления параметров в экспериментах с искаженными данными

Параметры	$D_1$	$D_2$	$D_3$	$D_4$
$\Delta c, \%$	0.016	0.003	0.055	0.003
$\Delta \theta, \%$	0.008	0.016	0.017	0.012

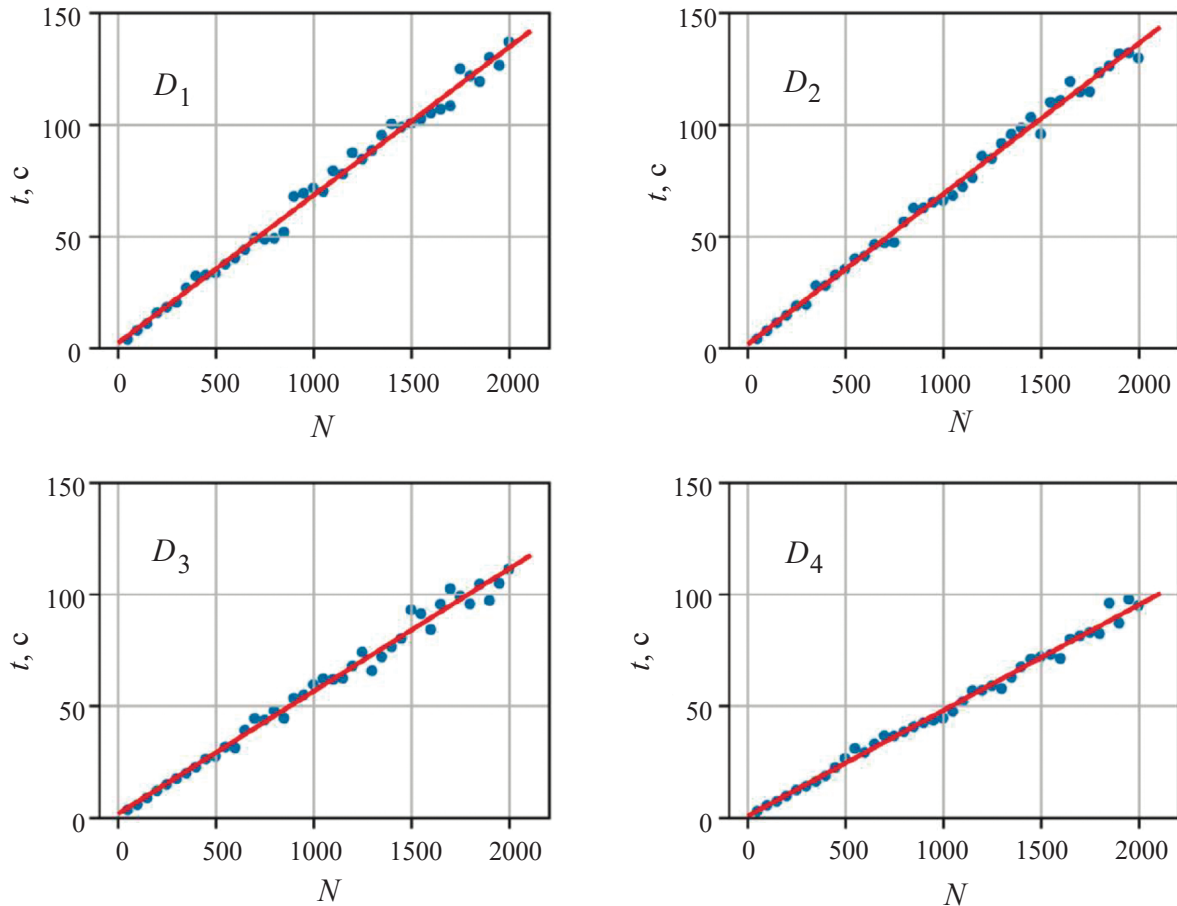


Рис. 4. Время работы программы в зависимости от числа экспериментальных точек

обеспечивает хорошее приближение и для остальных параметров. Несмотря на это, во всех тестах метод Нелдера-Мида продемонстрировал устойчивую сходимость к точным значениям. Ожидать того же в аналогичных условиях от метода Ньютона не приходится. Но самое главное преимущество состоит в том, что открывается возможность гибко настраивать целевую функцию, задавая в ней различные критерии оптимизации. Если известны значения геометрических/физических характеристик капли, то в целевую функцию можно включить соответствующие им члены. Речь идет в первую очередь о величинах, поддающихся измерению с точностью, на порядок выше точности оцифровки профиля. Изменение целевой функции отразится на программном комплексе только в части определения самой функции и не повлияет сколь-нибудь заметно на остальные компоненты. Напротив, в градиентных методах изменение критериев минимизации потребует полного пересмотра всей вычислительной схемы.

#### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе предложена новая вычислительная методика для определения поверхностного натяжения

и краевого угла по экспериментально измеренной форме сидящей капли. Ее отличительной особенностью является полный отказ от использования градиентных методов. Основные этапы вычислений реализованы с помощью эффективных численных алгоритмов, таких как метод Рунге-Кутты-Фельберга с адаптивным шагом и метод Брента с гарантированной сходимостью. Минимизация целевой функции, выражающей расхождение между теоретическим профилем и массивом экспериментальных точек, осуществляется симплекс-методом Нелдера-Мида. Рассмотрен способ генерации начального симплекса в методе Нелдера-Мида через эллипсоидальное и круговое приближения.

Разработан программный комплекс, объединяющий воедино всю совокупность алгоритмов. С его помощью проведена серия вычислительных экспериментов. В ходе этих экспериментов выявлена корректная и устойчивая сходимость даже в условиях, когда стартовые значения искомых величин в десятки раз отличаются от реальных. И хотя расходы процессорного времени возрастают, они компенсируются устойчивостью сходимости и возможностью переопределения целевой функции. Комбинируя в целевой функции различные критерии оптимизации в зависимости

ситуации, можно надеяться на получение более точных значений поверхностного натяжения и контактного угла. Принимая во внимание стремительный рост вычислительных мощностей современных компьютеров, наблюдаемый в последние десятилетия, разработка и теоретическое обоснование новых оптимизационных подходов на базе безградиентных методов представляются важным и перспективным направлением исследований.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Adamson A.W., Gast A.P.* Physical chemistry of surfaces. Wiley-Interscience: New York, 1997.
2. *Israelachvili J.N.* Intermolecular and surface forces. Academic Press: London, 2011.
3. *de Gennes P.G., Brochard-Wyart F., Quéré D.* Capillarity and wetting phenomena: drops, bubbles, pearls, waves. Springer Science & Business Media, 2013.  
<https://doi.org/10.1007/978-0-387-21656-0>
4. *Castner D.G., Ratner B.D.* Biomedical surface science: foundations to frontiers // *Surface Science*. 2002. V. 500. № 1–3. P. 28–60.  
[https://doi.org/10.1016/S0039-6028\(01\)01587-4](https://doi.org/10.1016/S0039-6028(01)01587-4)
5. *Soncini R., Klein W.* Surface tension in biological systems – a common problem with a variety of solutions // *Comp. Biochem. Physiol. A: Mol. Integr. Physiol.* 2023.  
<https://doi.org/10.1016/j.cbpa.2023.111475>
6. *Ahmad Fikri bin Anwar Fadzil, Pramanik A., et al.* Role of surface quality on biocompatibility of implants – A review // *Annals of 3D Printed Medicine*. 2022. V. 8. P. 100082.  
<https://doi.org/10.1016/j.stlm.2022.100082>
7. *Berg J.* Wettability. Boca Raton: CRC Press, 1993.
8. *Русанов А.И., Прохоров В.А.* Межфазная тензиометрия. С-Пб.: Химия, 1994.
9. *Rotenberg Y., Boruvka L., Neumann A.W.* Determination of surface tension and contact angle from the shapes of axisymmetric fluid interfaces // *Journal of Colloid and Interface Science*. 1983. V. 93. № 1. P. 169–183.  
[https://doi.org/10.1016/0021-9797\(83\)90396-X](https://doi.org/10.1016/0021-9797(83)90396-X)
10. *Río O.I., Neumann A.W.* Axisymmetric drop shape analysis: computational methods for the measurement of interfacial properties from the shape and dimensions of pendant and sessile drops // *J. Colloid Interface Sci.* 1997. V. 196. № 2. P. 136–147.  
<https://doi.org/10.1006/jcis.1997.5214>
11. *Емельяненко А.М., Бойнович Л.Б.* Применение цифровой обработки видеоизображений для определения параметров сидящих и висящих капель // *Коллоид. журн.* 2001. Т. 63. № 2. С. 178–193.
12. *Hoorfar M., W Neumann A.* Recent progress in axisymmetric drop shape analysis (ADSA) // *Adv. Colloid Interface Sci.* 2006. V. 121. № 1–3. P. 25–49.  
<https://doi.org/10.1016/j.cis.2006.06.001>
13. *Emelyanenko A.M., Boinovich L.B.* The role of discretization in video image processing of sessile and pendant drop profiles // *Colloids Surf. A: Physicochem. Eng. Asp.* 2001. V. 189. № 1–3. P. 197–202.  
[https://doi.org/10.1016/S0927-7757\(01\)00585-4](https://doi.org/10.1016/S0927-7757(01)00585-4)
14. *Хайпер Э., Ваннер Г., Нерсетт С.* Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи. М.: Мир, 1990.
15. *Nocedal J., Wright S.J.* Numerical optimization. Springer, 2006.  
<https://doi.org/10.1007/978-0-387-40065-5>
16. *Финн Р.* Равновесные капиллярные поверхности. Математическая теория. М.: Мир, 1989.
17. *Press W.H., Teukolsky S.A., et al.* Numerical recipes: the art of scientific computing. Cambridge University Press, 2007.