

**МІНІСТЕРСТВО ОХОРОНИ ЗДОРОВ'Я УКРАЇНИ  
ТЕРНОПІЛЬСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ МЕДИЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ІМЕНІ І. Я. ГОРБАЧЕВСЬКОГО МОЗ УКРАЇНИ**

Фармацевтичний факультет  
Кафедра медичної інформатики

**ЗАТВЕРДЖУЮ**  
Завідувач кафедри  
Вакуленко Дмитро Вікторович  
«     » квітня 2024р.

УДК 665.5

**КВАЛІФІКАЦІЙНА РОБОТА**

На тему :

**«МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ДВОФАЗНОГО ПОТОКУ В  
ПОРИСТИХ СЕРЕДОВИЩАХ»**

Виконав(ла) здобувач(ка) вищої  
освіти 5 курсу  
Оочної форми навчання  
Спеціальності 226 «Фармація,  
промислова фармація»  
\_\_\_\_\_ Лейбів Юлія Юріївна

Науковий керівник  
Доктор біологічних наук, професор  
\_\_\_\_\_ Вакуленко Дмитро Вікторович

**ТЕРНОПІЛЬ 2024**

## ЗМІСТ

<b>ЗМІСТ</b> .....	2
<b>ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ</b> .....	3
<b>ВСТУП</b> .....	4
<b>РОЗДІЛ 1. ТЕОРЕТИЧНА ЧАСТИНА</b>	
1.1 Застосування Змішування незмішуваних рідин.....	7
1.2 Властивості та особливості незмішуваних рідин.....	12
1.3 Наявні методи та проблеми для змішування незмішуваних рідин.....	26
1.4 Об'єкти для моделювання середовища для змішування незмішуваних рідин.....	28
1.5 Методи моделювання середовищ та засобів для змішування.....	32
1.6 Методи оцінки ефективності та технологічності середовищ та засобів для змішування.....	38
1.7 Порівняльний аналіз існуючих технологій та обладнання для змішування.....	39
1.8 Перспективи застосування математичних моделей для оптимізації процесів змішування незмішуваних речовин.....	42
<b>РОЗДІЛ 2. ЧИСЕЛЬНИЙ ЕКСПЕРИМЕНТ</b> .....	44
2.1 Основні рівняння та граничні умови.....	46
2.2 Емульсійний метод.....	47
2.3 Чисельний експеримент.....	51
<b>ВИСНОВКИ</b> .....	70
<b>СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ</b> .....	71

## ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ

O/V/O – олія/вода/олія

O/V – олія/вола

V/O – вода/олія

ГСЧ – генератор випадкових чисел

CFD – обчислювальна динаміка рідин та газів.

ANN – штучна нейронна мережа

ANFIS – адаптивна нейро-неофазна система випадків

CAS - казеїнат натрію.

## ВСТУП

**Актуальність теми.** Змішування незмішуваних компонентів у багатьох галузях є важливою з різних причин. Питання змішування незмішуваних компонентів відкриває шлях до створення нових формул та продуктів з унікальними властивостями. Дослідження теми змішування незмішуваних компонентів може покращити якість та ефективність продуктів у багатьох сферах, включаючи косметику, харчову промисловість, фармацію та інші галузі. З екологічної точки зору змішування незмішуваних компонентів може допомогти створити більш екологічно чисті продукти, зменшуючи використання шкідливих хімічних речовин та сприяючи сталому виробництву. Споживачі все більше цінують індивідуалізовані підходи та персоналізовані продукти. Змішування незмішуваних компонентів може допомогти виробникам створити продукти, які відповідають конкретним потребам та вимогам кожного споживача. Проблеми косметології сьогодні дуже актуальні. Зовнішність дає можливість мати гарне життя. На жаль, велика кількість людей має проблеми зі шкірою обличчя, які починаються з молодю, і це тягне за собою матеріальні. (ОС Скринська, Юлія Валеріївна Антонова-Рафі, Ігор Юліанович Худецький *КПІ ім.Ігоря Сікорського, 2018*).

У процесі приготування натуральної косметики ручної роботи часто стикаємося з проблемою змішування жиророзчинних компонентів у водному середовищі. Змішування незмішуваних компонентів у тоніку є актуальною з кількох причин. У косметології велике значення має створення продуктів з оптимальними властивостями. Змішування незмішуваних компонентів може допомогти досягти бажаних консистенції, текстури, аромату та інших характеристик тоніку. Процес змішування незмішуваних компонентів може бути використане для створення нових формул тоніку, які відповідають змінюваним потребам споживачів або трендам у косметичній індустрії. Нові методи та технології змішування можуть призвести до розробки більш ефективних та стабільних формул тоніку, що відкриває шлях для інновацій у цій галузі. Споживачі все більше шукають натуральні та екологічно чисті продукти. Змішування

незмішуваних компонентів може допомогти створити тонік без використання агресивних хімічних розчинників або консервантів. Створення екологічно здорового тоніку є актуальною темою, оскільки сучасні споживачі все більше обертають увагу на екологічність та безпеку продуктів, які вони використовують. Зростаюча свідомість про вплив хімічних і штучних складників на здоров'я та навколишнє середовище змушує виробників шукати більш екологічні та натуральні альтернативи. Створення тоніку на основі природних і органічних інгредієнтів, які мають корисні властивості для шкіри та організму загалом, може бути відповіддю на цей попит. Такий тонік буде цінуватися споживачами, які стежать за своїм здоров'ям та прагнуть до більш екологічного способу життя.

Моделювання найважливіший етап дослідження, від якого залежить залежить вирішення всіх завдань. Математичне моделювання двофазного потоку в пористих середовищах є основним інструментом для розуміння і прогнозування. У косметології математичне моделювання двофазного потоку в пористих середовищах може використовуватися для дослідження проникнення косметичних засобів у шкірні шари. Незалежно від того, математичне моделювання може бути використане для оптимізації формули косметичних продуктів, зокрема тоніків, для забезпечення максимальної ефективності проникнення.

Отже, тема змішування незмішуваних компонентів залишається актуальною і має великий потенціал для подальшого розвитку та впровадження в різних сферах промисловості.

**Мета та завдання дослідження.** Метою кваліфікаційної роботи є провести огляд літературних джерел, щодо моделей та методів для змішування незмішуваних рідин у косметології, провести експериментальне моделювання та обрати оптимальні характеристики середовища для змішування екологічно здорового тоніку для очищення шкіри обличчя, як додатковий засіб доглядової косметики для жінок.

Для досягнення поставленої мети кваліфікаційної роботи необхідно вирішити такі завдання:

1. Провести огляд літературних джерел застосування змішування незмішуваних рідин у косметології.

2. За аналізом літературних джерел провести оцінку властивостей та особливостей незмішуваних рідин.

3. Вивчити та проаналізувати наявні методи та проблеми для змішування незмішуваних рідин.

4. Провести аналіз можливих об'єктів для моделювання середовищ та засобів для змішування незмішуваних рідин.

5. Розглянути за аналізом літературних джерел методи моделювання середовищ та засобів для найкращого змішування.

6. Вивчити методи оцінки ефективності та технологічності середовищ та засобів для змішування.

7. Провести порівняльний аналіз існуючих технологій та обладнання для змішування.

8. Визначити перспективи застосування математичних моделей.

9. Провести чисельний експеримент для обрання оптимальних характеристик середовища для змішування екологічно здорового тоніку для очищення шкіри обличчя, як додатковий засіб доглядової косметики для жінок.

**Новизна даної роботи:** Проведено огляд літературних джерел та аналіз методів змішування незмішуваних рідин тоніків для догляду шкіри у косметології. Адаптовано існуючі математичні моделі та симуляції до вибору оптимальних характеристик середовища для створення екологічно здорового тоніку для догляду за шкірою обличчя.

**Практичне значення:** Розроблені технології для забезпечення оптимальних характеристик середовища для змішування екологічно здорового тоніку для очищення шкіри обличчя, як додатковий засіб доглядової косметики для жінок.

**Об'єкт досліджень:** середовище для змішування незмішуваних речовин в пористих середовищах з крайовими умовами екологічно здорового тоніку для очищення шкіри обличчя, як додатковий засіб доглядової косметики для жінок.

**Предмет досліджень:** Математична модель процесів що моделює середовище для змішування незмішуваних речовин в пористих середовищах з крайовими умовами екологічно здорового тоніку для очищення шкіри обличчя, як додатковий засіб доглядової косметики для жінок.

## РОЗДІЛ 1

### 1.1. Застосування змішування незмішуваних рідин

Рідини, які не змішуються або змішуються обмежено називаються емульсіями.

Емульсія - це є лікарська форма, яка складається з дисперсної фази і дисперсійного середовища та утворює суцільну фазу. Емульгатор потрібно додавати на межі розподілу двох незмішуваних рідин для стабілізації емульсії. Водна (водна) фаза найчастіше береться для інкапсуляції білків і декількох інших лікарських засобів у техніці емульсії «вода в маслі у воді» (вау). Але такий метод видає певні проблеми, такі як зменшення стабільності, розрив вибуху та низька ефективність захоплення. Тому, було розроблено нову емульсійну систему «тверда речовина в олії у воді» (свиноматка) для створення певних лікарських засобів, пробіотиків, білків, антитіл і танінів для усунення цих проблем. У такому методі активний інгредієнт інкапсульований у вигляді твердої речовини та доданий до масляної фази, яка утворює дисперсію твердого масла. Пізніше цю дисперсію змішують з водою для утворення безперервної фази для збільшення абсорбції лікарського засобу. Ця стаття сконцентрована на різних дослідженнях, що проведені для дослідження ефективності складів, виготовлених у вигляді емульсій тверда вода-олія, порівняно зі звичайними емульсіями вода-олія-вода. Короткий виклад результатів, отриманих у кожному

дослідженні, представлений у цій статті. Техніка емульсії для свиноматок може стати корисною в найближчому майбутньому, оскільки вона показала покращення стабільності та ефективності захопленого активного інгредієнта[1].

Множинні емульсії — є складними полідисперсними системами, в яких одночасно існує емульсія «олія у воді» і «вода в олії», що стабілізовані ліпофільними та гідрофільними поверхнево-активними речовинами. Співвідношення поверхнево-активних речовин є важливим для досягнення стабільності багаторазових емульсій. Серед множинних емульсій типу «вода-у-олії-у-воді» (в/о/в) і «олія-у-воді-в-олії» (о/в/о) саме перша має більш ширші сфери застосування і більше вивчається. Розглянуто рецептуру, методику приготування та методи визначення характеристик *in vitro* для декількох емульсій. Детальніше обговорюються різні чинники, що впливають на стабільність декількох емульсій, і підходи до стабілізації з особливим посиленням на множинні емульсії типу «в/в/в». Сприятливі механізми та швидкість вивільнення ліків разом із долею багатьох емульсій *in vivo* роблять їх універсальними носіями. Він займає широкий спектр застосувань у контрольованій або тривалій доставці ліків, цілеспрямованій доставці, маскуванні смаку, посиленні біодоступності, іммобілізації ферментів тощо. Кілька емульсій також використовуються як проміжний етап у процесі мікрокапсуляції та є системами, що викликають зростаючий інтерес для перорального застосування. доставка гідрофільних препаратів, нестійких у шлунково-кишковому тракті, як білки та пептиди. З покращенням методів приготування, стабілізації та реологічної характеристики багатьох емульсій, він зможе створити нову систему-носій впершу чергу для косметики. У цьому огляді акцент зроблено на рецептурі, методах стабілізації та потенційному застосуванні системи багаторазової емульсії [2].

Змішування незмішуваних рідин може мати кілька застосувань, наприклад: емульгування, екстракція, реакційна екстракція. Емульгування – це процес створення стабільної дисперсії одного рідинного компонента в іншому, як у випадку води у олії або олії у воді. Це широко використовується в харчовій, косметичній та фармацевтичній промисловості для створення продуктів, таких



як масла, креми і лосьйони. Екстракція - Деякі речовини можуть бути виділені з одного розчинника в інший, використовуючи незмішувані рідини. Реакційна екстракція – це процес, в якому реакційна суміш розчиняється в одному розчиннику, і після додавання іншого розчинника утворюється фаза, в якій продукти реакції перебувають. Наприклад, у фармацевтичній промисловості це використовується для виділення певних речовин з біомаси. Оскільки нас цікавить процес змішування речовин з боку косметології, то варто в першу чергу звернути увагу на процес емульгування. Емульгування -це потужний, добре відомий метод змішування та диспергування незмішуваних компонентів у безперервній рідкій фазі. Емульгування в косметології використовується для створення стабільних змушених емульсій, де один компонент (наприклад, вода) розподіляється у другому компоненті (наприклад, олія). Це дозволяє косметичним засобам, таким як креми, лосьйони, тоніки, масла для тіла та інші, мати консистенцію, яка легко розподіляється на шкірі і добре нею поглинається.

У випадку тоніку вода і активні інгредієнти можуть бути емульговані в розчинниках, які сприяють їх розподілу на шкірі після нанесення. Наприклад, багато тоніків містять воду як основний компонент, а також екстракти рослин або інші корисні інгредієнти. Ці інгредієнти можуть бути розчинені у спеціальних розчинниках, таких як гліцерин або етанол, і емульговані разом за допомогою емульгаторів, таких як полісорбати або стеарати. Це дозволяє тоніку мати легку текстуру, яка швидко вбирається шкірою, забезпечуючи вологу та корисні інгредієнти. Такі тоніки можуть бути особливо корисними для досконалого очищення обличчя, вирівнювання тону шкіри, звуження пор і підвищення гідратації. Змішування незмішуваних компонентів в тоніку важливо з багатьох причин. Одна з них це стабілізація формули - незмішуванні компоненти можуть мати різні фізичні властивості, такі як густину або поверхневе натягнення. Шляхом змішування за допомогою емульгаторів або диспергентів можна створити стабільну формулу, яка не розділятиметься під час зберігання і використання. Оптимізація дії - змішування різних компонентів дозволяє поєднувати їх властивості для досягнення певного ефекту. Наприклад, вода може бути емульгована з активними інгредієнтами для забезпечення

глибокого зволоження шкіри, тоді як розчинники можуть допомогти в розподілі корисних речовин на поверхні шкіри. Комфорт та легкість нанесення - змішування незмішуваних компонентів може поліпшити текстуру продукту та забезпечити більш однорідне покриття шкіри. Це може зробити процес використання тоніку більш комфортним та ефективним. Забезпечення стабільності і тривалості продукту - правильне змішування різних компонентів допомагає запобігти розділенню і відкладенню інгредієнтів у тоніку. Це може збільшити тривалість придатності продукту та забезпечити його ефективність протягом тривалого часу. Комбінування різних компонентів може підвищити ефективність дії тоніку на шкіру. Наприклад, поєднання води з активними інгредієнтами може забезпечити кращий зволожувальний ефект та покращити поглиблення корисних речовин у шкіру. Область активних речовин, і особливо активних емульсій, достатньо швидко розвивається, досягнуто значного прогресу і теоретичному, і на експериментальному рівнях. Підсумовуючи прогрес експериментальних досліджень, пов'язаних з активними краплями, конституція активних крапель, зокрема хімічний склад і структура поверхонь розділу, має вирішальне значення. Важливо, такі властивості емульсії, як механізм руху, швидкість, траєкторія, сила взаємодії та час життя, пов'язані зі складом краплі. Розглядається, не тільки традиційні одиночні емульсії, але й більш складні варіанти, такі як краплі Janus, емульсії Пікерінга та багаторазові емульсії. Описано активну поведінку ізольованих крапель, а також попарну та багатотільну взаємодію між краплями. Також виділено вплив фізичних бар'єрів, які формують локальні хімічні градієнти та потік рідини [3].

Отже, змішування незмішуваних компонентів в тоніку є важливою процедурою для забезпечення якості, стабільності та ефективності косметичного продукту. Тонік - це один з етапів догляду за шкірою обличчя після очищення та перед використанням зволожувальних або живильних засобів. Основна функція тоніка - відновлення рН балансу шкіри та видалення залишків очищувальних засобів, а також підготовка шкіри до подальшого догляду. Основні складові тоніку можуть включати воду (як розчинник), гліцерин або гіалуронову кислоту (для зволоження), екстракти рослин або

вітаміни (для живлення та заспокоєння шкіри), а також антиоксиданти та інші активні інгредієнти, спрямовані на покращення стану шкіри. Тонік може мати різні текстури, від водяних до гелеподібних або тонік-лос'йонів. Вибір текстури може залежати від типу шкіри та уподобань користувача. Використання тоніка після очищення шкіри допомагає зволожити та заспокоїти її, а також підготувати до подальших кроків у догляді за шкірою, таких як нанесення сироваток, кремів або засобів з SPF захистом. Зазвичай тонік наносять на обличчя за допомогою ватного диска або просто пальців, доки шкіра не буде насичена продуктом. Існує багато екологічно здорових тоніків, які не містять спиртів та інших шкідливих речовин. Деякі ключові складники та властивості, які можна знайти у таких тоніках це гідролати, екстракти рослин, гліцерин, ефірні олії, екстракти фруктів та ягід. Гідролати отримуються під час процесу виробництва ефірних олій із рослин, і вони можуть бути ефективними для заспокоєння та зволоження шкіри. Серед популярних гідролатів є ромашка, лаванда та троянда, які мають антиоксидантні та заспокійливі властивості. Багато рослинних екстрактів, таких як алое вера, огірок та зелений чай, мають зволожуючі, заспокійливі та антиоксидантні властивості, які можуть бути корисними для шкіри. Гліцерин – це натуральний зволожувач, який притягує вологу до шкіри та допомагає зберігати її, підвищуючи її гідратацію. Деякі ефірні олії, такі як лаванда, чайне дерево або герань, можуть мати антибактеріальні властивості та додати приємний аромат тоніку без використання синтетичних ароматизаторів. Екстракти фруктів та ягід можуть бути додані для їхніх антиоксидантних властивостей та вітамінного живлення шкіри. Обираючи екологічно здоровий тонік без спиртів, важливо звертати увагу на склад продукту та його сертифікації, щоб переконатися в якості та безпеці використання для вашої шкіри та навколишнього середовища. Вважається, що зовнішній вигляд шкіри відображає міцне здоров'я та силу людини. Тому косметична промисловість переймається елегантністю кінцевого продукту, одне з головних цілей, яка необхідна це зовнішній вигляд самої формули та косметичне застосуванням, для якого продукт виготовляється. Через їх нанорозмір і перламутроподібну природу косметичні ліпідні наноносії

відіграють важливу роль у косметичній промисловості. Особливості, які обговорюються в цьому розділі для косметичних ліпідних нано носіїв , включають стабільність інтегрованих речовин, здатність до навантаження, контрольоване/ініційоване вивільнення, оклюзійність, утворення плівки та проникнення через шкіру. Технологія виготовлення; питання, що стосуються виробництва, у тому числі великого та дрібносерійного; нормативні аспекти; описується стан допоміжних речовин і підтверджена фізична та хімічна стабільність.

За останні кілька років на споживчому ринку дуже розширила межі косметика, що містить «нанотехнології» і претендує на включення «нанорозмірних інгредієнтів» і «наночастинок». Багато виробників засобів по догляду за шкірою (наприклад, кремів, лосьйонів, косметичних есенцій тощо) використовують емульсію надвисокого тиску та інші методи для нанорозміру своїх активних інгредієнтів до десятків нанометрів, що є меншим за проміжки між клітинами шкіри в роговий шар (70 нм), намагаючись покращити їх проникність шкірою та здатність до всмоктування. Багато рідких ліпосом і твердих частинок, таких як наночастинки карбонату кальцію , наповнені провітаміном А (Yomiuri Shimbun Ryokan, 2005) і наносфери PLGA (полі лактид-ко-гліколід), наповнені провітаміном С, нещодавно використовуються як носії нанокосметики для посилення продуктивність косметичних засобів. У цьому розділі ми зосередимося на технології наносфер PLGA з провітаміном С і використаємо її як приклад твердого носія для створення функціональної косметики для догляду за шкірою [4].

## **1.2. Властивості та особливості незмішуваних рідин**

Емульсії швидко дестабілізуються за різних умов під час приготування та зберігання. Тому необхідно знати і розуміти ті фактори, які можуть впливати на стабільність емульсій, що є важливим для їхніх подальших досліджень. Казеїнат натрію (CAS) часто використовується в ролі поживного і функціонального інгредієнта під час приготування емульсії завдяки його

хорошій розчинності і емульгуючим властивостям. CAS-стабілізовані емульсії можна вважати хорошими системами доставки харчових емульсій, але їх застосування все ще обмежене за певних умов через їхню нестійкість до крему та агрегації. Таким чином, метою цього огляду є те, щоб забезпечити повний огляд того, як різні навантаження на навколишнє середовище та умови обробки впливають на стабільність CAS-стабілізованих емульсій і як покращити їхню стабільність. Спочатку були узагальнені загальні властивості CAS як емульгаторів і характеристика стабілізованих CAS емульсій типу «олія у воді» (O/W). Потім, були представлені основні механізми нестабільності, які діють в емульсіях, стабілізованих CAS. Крім цього, зверталася увага загальним факторам, такі як рН, концентрація емульгатора, іонна сила, окислення та умови обробки, що впливають на стабільність емульсії O/W, стабілізованої CAS. На цій основі введено загальноприйняті методи оцінки стабільності емульсії. Нарешті, також описано та узагальнено найсучасніші стратегії для покращення стабільності емульсії на основі CAS. Очікується, що цей огляд забезпечить теоретичну основу для майбутнього застосування CAS у харчових емульсіях [5].

Незмішувані рідини мають кілька властивостей і особливостей, які роблять їх унікальними. Незмішуванні рідини можуть мати різні густини, що робить їх важкими або неможливими для змішування без відповідної обробки. Кожна рідина має свою власну поверхневу напругу, що може ускладнити їх змішування, оскільки це може вимагати додаткової енергії для подолання цих напруг та створення змушеної емульсії. Незмішуванні рідини можуть мати різні температури кипіння та точки замерзання, що може впливати на їхню поведінку та змішування при різних умовах температури. Рідини можуть бути полярними або неполярними, що також може впливати на їх змішування, оскільки полярні рідини можуть бути легше емульговані за допомогою емульгаторів. Рідини можуть мати різну розчинність у різних розчинниках, що може впливати на їх змішування та емульгацію. Ці властивості потребують уваги та дотримання певних процесів та технологій для ефективного змішування незмішуваних рідин у косметології та інших галузях. За правилом Банкрофта, безперервною стає та фаза, в якій емульгатор краще розчинюється. Якщо емульгатор не

використовується або він має однакову спорідненість як до ліпофільного, так і до гідрофільного середовища, то тип емульсії, яка утворюється при диспергуванні, визначається співвідношенням об'ємів фаз дисперсної фази та дисперсійного середовища. Фаза з меншою об'ємною часткою стає дисперсійною. Емульсії типу «олія у воді» — це рідкі системи, в яких дисперсійна (або зовнішня) фаза — вода, а внутрішня, дисперсна фаза складається із оліє-жирових компонентів. Системи типу «олія у воді» діють як охолоджуючі за рахунок високого вмісту вільної води. Вони легко розподіляються по шкірі, швидко всмоктуються і, як правило, не залишають після себе жирного блиску. Для частого й тривалого використання при сухій шкірі емульсії типу «олія у воді» непридатні, оскільки вода швидко випаровується і продовжує стимулювати трансепідермальну втрату вологи. Через це підсилюється висихання шкіри, тому такі емульсії бажано використовувати поперемінно із системами «вода в олії». У емульсії типу «вода в олії» дисперсійна, або безперервна, фаза складається із олієподібних компонентів, а дисперсна фаза — із води. Завдяки своїй ліпофільній зовнішній фазі системи типу «вода в олії» навіть при високому вмісті води є пережирюючими системами, котрі показані переважно при сухій шкірі. Тонка жирова плівка, яка всмоктується в поверхню шкіри і частково — у верхні шари рогового шару, дещо зменшує випаровування вологи і тим самим направляє потоки шкірної вологи в середину шкіри. Множинними емульсіями називають комплексні системи, в котрих краплі дисперсної фази містять дрібніші крапельки, які ідентичні або схожі на безперервну фазу. Таким чином, множинні емульсії містять, як мінімум, три фази. У емульсії типу «в/о/в» в зовнішній водній фазі знаходяться дисперговані крапельки олії, які являють собою дисперсійне середовище для водної фази. У системах «о/в/о» протилежна структура. Емульсії типу в/о/в мають високу косметичну привабливу силу і високий доглядаючий ефект при використанні. Їх переваги насамперед складаються із одночасного володіння властивостями емульсій типу «о/в» та «в/о». В одній формі продукт забезпечує бар'єрний захист шкіри та довготривалу підтримку вологості з приємним відчуттям на шкірі. Через

зовнішню водну фазу безпосередньо після аплікації відбувається швидке зволоження верхніх шарів шкіри. Одночасно на шкіру лягає захисна плівка із крапельок олії, з яких звільнюється заключена в них водяна фаза, яка також дещо стримує процес зменшення вологості шкіри.

Косметологія - наука, яка у широко розвивається, і має важливе значення і вплив на суспільство. Косметичний сектор дуже зацікавлений у пошуку нових біологічних альтернатив, які можуть хоч якось покращити властивості косметологічного продукту, а також замінити хімічні сполуки і задовольнити потреби цільових споживачів. Багато сполук є біологічного походження і одержані з бактерій, грибів і водоростей. Ряд біологічних сполук, таких як біоповерхнево-активні речовини, вітаміни, антиоксиданти, пігменти, ферменти, пептиди, мають багатообіцяючі та корисні властивості. Крім того, ці продукти можна легко виробляти в промислових масштабах. Огляд охоплюватиме важливість і використання мікробних сполук для нових косметичних рецептур, а також пов'язаних із ними продуктів [6].

Тонік - це косметичний засіб для догляду за шкірою обличчя, який використовується після очищення шкіри для видалення залишків макіяжу, бруду і зайвого себуму (шкірного жиру), а також для зволоження та освіження шкіри. Основним аспектами тоніку є освіження шкіри, балансування рН, видалення залишків засобів для миття обличчя, зволоження а також підготовка шкіри до наступних етапів догляду. Тонік містить активні інгредієнти, які допомагають заспокоїти та освіжити шкіру після очищення. Має здатність відновити природний рівень рН шкіри, який може бути порушений через використання очищувальних засобів. Також, може допомогти видалити залишки макіяжу, мила або очищувального гелю, які можуть залишитися на шкірі після миття. Деякі тоніки містять зволожуючі інгредієнти, які допомагають зберегти вологу у шкірі, підвищуючи її гідратацію. Тонік допомагає підготувати шкіру до подальших етапів догляду, таких як нанесення сироваток, кремів або інших засобів. Інгредієнти тоніків можуть варіюватися в залежності від типу шкіри та бажаних результатів. Наприклад, тоніки для жирної шкіри можуть містити віджимані рослинні екстракти або кислоти, що зменшують вироблення себуму,

тоді як тоніки для сухої шкіри можуть містити зволожуючі інгредієнти, такі як гіалуронова кислота або гліцерин. Існує кілька типів тоніків, призначених для різних типів шкіри та різних потреб. Зволожуючі тоніки містять зволожуючі інгредієнти, такі як гіалуронова кислота, алое вера або гліцерин, щоб допомогти підтримувати вологу у шкірі, особливо корисні для сухої або дегідратованої шкіри. Освіжаючі тоніки містять освіжаючі інгредієнти, такі як екстракти зеленого чаю, огірка або розмарину, які допомагають заспокоїти та освіжити шкіру після очищення. Матуючі тоніки призначені для жирної або комбінованої шкіри і містять інгредієнти, які допомагають контролювати вироблення себуму та матують шкіру, запобігаючи блиску. Ексfolіюючі тоніки містять відшаровуючі або пілінгові інгредієнти, такі як альфа- та бета-гідроксікислоти або фруктові екстракти, які допомагають видалити відмерлі клітини шкіри та покращити текстуру шкіри. Вирівнюючі тоніки містять інгредієнти, такі як вітамін С або Е, які допомагають вирівняти тон шкіри, зменшити появу плям та пігментації, а також покращити загальний колір та вигляд шкіри. Кожен тип тоніку має свої унікальні властивості та переваги, тому вибір конкретного типу може залежати від потреб та типу вашої шкіри. Склад тоніку для шкіри може варіюватися в залежності від його призначення та типу шкіри, але основні складові можуть включати: гліцерин, гіалуронова кислота, алое вера, гліколева кислота, які виконують основну функцію зволоження. Освіжаючі екстракти, такі як екстракти зеленого чаю, огірка, розмарину або м'яти. М'які очищувачі, такі як ромашка, лаванда, календула. Антиоксиданти такі як, вітамін С і Е, коензим Q10, екстракти родзинок або гранату. Ексfolіанти, такі як альфа- та бета-гідроксікислоти, фруктові екстракти, саліцилова кислота. Матуючі інгредієнти, такі як екстракти чорниці, цинку, алое вера. Заспокоюючі інгредієнти, такі як екстракти календули, ромашки, алое вера. Антибактеріальні компоненти, такі як, тріклозан, екстракт чаю дерева, екстракт евкаліпта. Звичайно, точний склад тоніку буде залежати від конкретного продукту та його виробника. Важливо обирати тонік, який підходить за типом шкіри та відповідає потребам у догляді за шкірою.

Для приготування тонізуючого засобу для обличчя знадобиться тонік або



гідролат (наприклад, розова вода), базова олія (така як мигдальна або жожоба), ефірні олії (якщо потрібно), а також можливо натуральні пігменти (наприклад, коричнева глина для пігментування). Зазвичай розрахунок складу такий: 70% тонік, 20% базова олія, 10% ефірні олії (якщо використовуються). Потрібно добре змішати всі складники і ретельно перемішати перед використанням. Потім можна наносити на обличчя з допомогою ватного диска або розпилювача. Найкраще робити тест на невеликій ділянці шкіри перед використанням, щоб переконатися, що відсутні алергічні реакції або подразнення.

Майже до всіх дермокосметичних емульсій додається ароматизатор, оскільки він є ключовим фактором у виборі споживачем та сприяє сприйняттю ефективності продукту. Аромат являє собою складну суміш ароматичних хімікатів у різних концентраціях, які розподіляються між фазами емульсії залежно від їхніх фізико-хімічних властивостей, впливаючи на структуру, стабільність, текстуру та запах кінцевого продукту. Вивчення взаємодії між ароматом і дермокосметичними емульсіями важливо для розуміння впливу аромату на їхню мікроструктуру, стабільність, текстуру та вивільнення молекул аромату [7].

Існують емульсії, які мають велике значення для застосування в харчовій науці, будучи засобом для зниження вмісту жиру або для контрольованого виправлення та вивільнення активних речовин. Протест виробництва та стабільність є складними аспектами. Зазвичай деякі емульсії готуються за допомогою двох етапів емульгування, а для забезпечення стабільності використовуються різні підходи. Існує можливість отримати кілька емульсій за одну стадію, використовуючи інверсію емульсії, проте отримані емульсії залишаються не дуже стійкими. Недавно було продемонстровано декілька протилежних методів, що викликають формування стійких множинних емульсій за допомогою одноетапних процесів виробництва. Тут ми розглядаємо поточний стан мікрофлюїдних, полімер-стабілізованих частинково-стабілізованих підходів; вони залежать від розділення фази, ролі електроліту та уловлювання розчинника з частинками відповідно [8].

Є новий метод приготування стійких багаторазових емульсій вода-в-олії-в-міцелі (W/O/W(m)) через одноетапне емульгування, що дозволяє їм залишатися стійкими протягом 60 днів. Це раніше від відомих методів, які використовувалися для формування нестійких систем. Досліджено вплив різних поверхнево-активних речовин і олій на процес утворення емульсій та виявлено, що утворення стійких емульсій залежить не лише від температури, але і від складу компонентів. Також показано, що значення точки наднизького поверхневого натягу має важливе значення для формування таких емульсій [9].

Мета даного обзору полягає у розгляді функцій гіалуронової кислоти (ГК) та її потенціалу як ефективного засобу доставки для місцевого або трансдермального застосування. Було відзначено кілька механізмів доставки ГК, таких як шляхи на основі рецепторів, гідратація шкіри, взаємодія з роговим шаром, а також біoadгезивні та в'язкопружні властивості. Для досягнення оптимальної ефективності були розроблені різні системи доставки, використовуючи ГК з різною молекулярною масою та хімічними модифікаціями, такі як гідрогелі, наномульсії, мікроемульсії, мікроголки та інші. Ефективність доставки оцінювалася за допомогою *in vitro* клітинної дифузії Франції та/або *in vivo* моделями тварин. Обзор підтвердив, що ГК може бути ефективним засобом доставки як для місцевого, так і для трансдермального застосування завдяки своїм унікальним властивостям та біомедичним перевагам для шкіри [10].

Косметична індустрія на сьогоднішній день активно розвивається, використовуючи передові технології та створюючи нові інноваційні та стійкі продукти. Асортимент косметичних засобів включає засоби для догляду за шкірою, кольорову косметику, засоби для волосся, макіяж та засоби для догляду за тілом. загальноприйняті косметичні емульсії стабілізуються за допомогою поверхнево-активних речовин або полімерів. Проте спостерігається потреба в переході на стійкі емульсії без таких речовин через їх негативний вплив на навколишнє середовище та здоров'я. Щоб задовольнити попит споживачів на безпечні та біологічно розкладені продукти, широка популярність набирає

створення емульсій без поверхнево-активних речовин шляхом використання стабілізаторів у вигляді частинок [11].

Попит на косметичні емульсії з природними активними компонентами, такі як рослинні екстракти, збільшується через безліч їхніх переваг. Якість косметичних емульсій може залежати від процесів розподілу та зберігання, що може призвести до перекисного окислення ліпідних компонентів. Це впливає на ефективність, текстуру та зовнішній вигляд косметичного продукту, тому необхідно шукати безпечні та ефективні сполуки для відновлення процесів окислення. У цій статті наведено огляд параметрів, які впливають на окислювальну стабільність емульсії, а також методи оцінки цієї стабільності. Основний акцент робиться на використанні рослинних екстрактів, багатих фенольними речовинами, для підвищення окислювальної стабільності косметичних емульсій. Застосування рослинних екстрактів у косметичних емульсіях має перспективи завдяки їх антиоксидантним властивостям, які можуть призвести до перекисного окислення ліпідів під час зберігання. Рослинні види є джерелом біологічно активних сполук, які можуть бути використані в косметичній та фармацевтичній промисловості [12].

Косметичні засоби, такі як шампуні, гелі для душу, туші для вій і основи для макіяжу, можна розглядати як комплексні рідини. У залежності від форми продукту, склад комплексної рідини може змінюватися від поверхнево-активних систем, які часто зустрічаються в миючих засобах, до емульсій типу «масло у воді» та «вода в маслі», які використовуються у макіяжі, кольоровій косметиці та засобах для догляду за шкірою. Ці складні рідини змінюють ключову роль у формуванні реологічних і трибологічних характеристик, істотних для забезпечення як сенсорної, так і функціональної ефективності. Будь-які зміни в реології продукту мають суттєвий вплив на його важливі функціональні властивості, такі як стабільність і кондиціонування волосся. Позитивні сенсорні характеристики завжди цінуються споживачами, тому важливо постійно розглядати можливості оптимізації реологічних формул для задоволення їх очікувань [13].

Естетичні і тактильні характеристики можуть суттєво впливати на сприйняття косметичного продукту споживачами. Проте традиційний аналіз займає багато часу, є витратним та не дає інформації про переваги цільової аудиторії. У першій стадії проекту ми пропонували непідготовленим споживачам оцінити шість косметичних емульсій на основі їх естетики за допомогою досвіду «перевірте все, що застосовуєте» (САТА). Наші цілі включали кількісне оцінювання реологічних та текстурних властивостей шести косметичних емульсій із зеленими біопохідними пом'якшувачами і визначення статистичних зв'язків між споживчим описом продукту та інструментальними вимірюваннями. Результати щодо текстури та реології показують на те, що емульсії відрізняються від очікувань. Вимірювання текстурних та реологічних характеристик дали результати, які схожі на розрізнення, зроблені споживачами. Використання оливкової олії замість гептилундециленату як пом'якшувального диска підвищило твердість, розподіл, липкість, в'язкість та розмір крапельок емульсії в будь-якому випадку, крім емульсій у шкірній парі. Усі шість емульсій мали тенденцію розріджуватися при зсуві. В'язкість і твердість емульсій прямо корелювали між собою. Емульсії залишалися стабільно видимими при кімнатній температурі протягом 6 місяців, а в'язкість залишалася стійкою протягом цього періоду. Певні тактильні властивості можна надійно передбачити за допомогою інструментальних вимірювань. Виявлення та кількісна оцінка зв'язків між сенсорними, текстурними та реологічними властивостями може сприяти досягненню властивостей відповідних характеристик продукту, адаптованих до потреби ринку [14].

Емульсії Пікерінга - це системи, в яких тверді частинки стабілізують олію та воду. Вони вважаються безпечними і розкладеними, тому можуть бути корисними в багатьох галузях, таких як харчова промисловість, косметика та медицина. Вони особливі цінні як носії ефірних олій, які мають антибактеріальні та антиоксидантні властивості. У цьому огляді розглядається останній прогрес у застосуванні емульсії Пікерінга як носіїв речовин, що мають лікувальні властивості, антиоксидантів та антимікробних засобів, а також у використанні їх в активній упаковці [15].

У косметичній, косметичній та харчовій промисловості широко використовують концентровані емульсії для зменшення витрат на зберігання та транспортування, а також для надання додаткових характеристик. Недавнє дослідження спрямоване на отримання концентрованих емульсій із вмістом олії 50 мас.% за участю двох природних емульгаторів - сапонінів квіла та рамноліпідів. Воно оцінило вплив концентрації емульгатора на розміри частинок, реологічні властивості та стабільність емульсії. Результати показали, що розмір частинок емульсії зменшився при збільшенні концентрації сапонінів квіла та рамноліпідів, причому рамноліпіди були ефективнішими у формуванні менших крапель. Обидва емульгатори забезпечували стабільність концентрованих емульсій за різних умов, включаючи різні температури, концентрації солі та рН. Реологічні властивості підтвердили, що концентровані емульсії, стабілізовані сапонінами квіла або рамноліпіди, мають низьку в'язкість при зсуві [16].

У поточний час у косметичній та харчовій промисловості створені натуральні барвники. які, барвники, отримані з природних джерел, відзначаються вищою екологічністю та безпечністю для здоров'я з синтетичними альтернативами. У цьому дослідженні було проведено оцінку рослинних екстрактів *Gomphrena globosa* L., *Clitoria ternatea* L., *Carthamus tinctorius* L., *Punica granatum* L. і *Papaver rhoeas* L. як природних та функціональних барвників для використання в косметичній промисловості. Була проведена оцінка цитотоксичності на клітинних лініях кератиноцитів і фібробластів, а також визначені антиоксидантні та антивікові властивості шляхом визначення їх здатності пригнічувати активність ферментів колагенази та еластази. Крім того, був визначений склад екстрактів. Отримані екстракти також використовувалися в рецептурі крему для обличчя, після чого був проведений аналіз кольору. Дослідження показало, що отримані екстракти не мають цитотоксичної дії та мають високий антиоксидантний потенціал. Крім того, екстрактивили сильну здатність інгібувати активність колагенази та більшу здатність інгібувати еластазу, що забезпечує ефективне та тривале зволоження шкіри після їх застосування. Дослідження також показало, що

екстракти *P. rhoeas* L., *C. ternatea* L. і *C. tinctorius* L. можуть бути ефективно використані як косметичні засоби, що забезпечують інтенсивний та стійкий колір під час зберігання продукту. Проте екстракти *P. granatum* L. і *G. globosa* L., хоча їх активні властивості виявились сприятливими, не виявили себе ефективними як косметичні барвники, після косметичних, оскільки косметичні емульсії з цими екстрактами суттєво не відрізнялися за кольором від емульсій без екстракту [17].

Останні десятиліття значного та безперервного зростання попиту на косметику призвело до розробки складних рецептур, орієнтованих на високу ефективність, привабливий зовнішній вигляд, сенсорну допомогу та безпеку. Однак, незважаючи на зростаючий попит щодо споживачів, виробники досягають обмежень оптимальної рівноваги між концентрацією активних сполук та основним препаратом, враховуючи природу структури шкіри, зокрема, ідеального проникнення активних сполук через природний шкірний бар'єр. Емульсія - це суміш двох незмішуваних фаз, а інтерес до нанорозмірної емульсії зріс через її специфічні властивості, такі як висока стабільність, привабливий зовнішній вигляд і властивості доставки ліків. Таким чином, очікується, що продуктивність підвищується за допомогою наноносія на основі ліпідів. Наномульсії створені різними методами: високоенергетичним та низькоенергетичним. Розробка наномульсій з перспективою великомасштабного виробництва є одним із ключових атрибутів у процесі вибору методу, після чого рецептура косметики відображається в доставці продукту споживачам. Таким чином, мета цього огляду полягала в тому, щоб проілюструвати основні високо- та низькоенергетичні методи, застосовані в косметиці та розробці дерматологічних продуктів, їх особливості, останні дослідження та розгляд оптимізації процесу вибору. Специфічний процес, пов'язаний з неорганічними наночастинками, полімерними наночастинками та рецептурою нанокапсул, у цьому документі не розглядається [18].

Вивчаючи впливу різних рослинних олій на текстурні, реологічні та сенсорні властивості косметичних рецептур на основі органогелю, було створено чотири емульсії на основі органогелю, в які додавалися соняшникова,

макадамії або оливкова олія. В результаті аналізу реологічної поведінки, текстурного профілю та сенсорних властивостей, було отримано результати які показали, що рослинні олії не змінили псевдопластичну реологічну поведінку, але вплинули на площу гістерезису та роботу зсувової композиції. Соняшникова олія підвищила індекс консистенції та всі параметри текстури, тоді як олія макадамії зменшила твердість і консистенцію. Крім того, косметичний препарат на основі органогелю з соняшниковою олією отримав найвищий бал сенсорною оцінкою. Отже, рослинні олії впливають на реологічні властивості, текстурний профіль та сенсорні властивості досліджуваних композицій. Однак один із соняшникових олій має більш виражений вплив у косметичній композиції на основі органогелю, особливо з урахуванням текстурного профілю та потреб споживачів під час сенсорного аналізу [19].

При дослідженні, яке спрямовано на оцінку впливу рослинних олій на стійкість емульсії. Основними компонентами олійних фаз були пальмовий олеїн (POo), оливкова олія (OO), сафлорова олія (SAF), олія виноградних кісточок (GSO), соєва олія (SBO) та соняшникова олія (SFO) з різним ступенем насиченості. Усі емульсії зберігалися при 4 °C, 27 °C і 40 °C протягом 35 днів і піддавалися різним тестам на стабільність, включаючи зміну температури, центрифугування, циклічний тест, рН і температуру плавлення. Результати показали, що POo демонструє найвищу стабільність, за ним йдуть SAF, OO, GSO, SFO та SBO. Крім того, результати свідчать про те, що ступінь насиченості рослинних олій суттєво впливає на стабільність емульсії за результатами центрифугування приблизно на 30% рівні використання олії. Емульсія на основі POo показала стабільність протягом експериментального періоду, що підтверджує можливість використання POo як хорошої олії-носія для різних продуктів у косметичній промисловості [20].

Шкіра людини - це складна жива тканина, що постійно розвивається і самовідновлюється завдяки постійній секреції ліпідів. Характеристика цього біологічного матеріалу є ключовою проблемою в дермокосметичних та фармацевтичних галузях. Розуміння взаємодії шкіри з навколишнім середовищем під час використання засобів догляду за шкірою є числом для

кращого контролю різних явищ. Спосіб нанесення продуктів на погіршення поведінки. Було створено п'ять емульсій O/W із загальною кількістю двох пом'якшувачів (ізогексадекан і стеаринова кислота). Додатковий інструментальний та сенсорний аналіз поведінки розподілу проводився *in vivo* на шкірі людини та *in vitro* на небіологічній поверхні, щоб вивчити вплив пом'якшувачів та їх суміші на здатність до розподілу та проникнення емульсій O/W. Проведено перший скринінг для інсталяції зв'язку між фізико-хімічними властивостями пом'якшувачів і розподілом поведінки на людській шкірі. Потім деякі цікаві параметри з трибологічного дослідження на шкірі для більш детального розуміння взаємодії продукту/шкіри з часом. У заключній частині дослідження успішно випробувальний оригінальний метод з використанням небіологічних поверхонь, що імітують використання, що має великий інтерес для оцінки ефективності нової формули на шкірі, а також для фундаментальних досліджень і стандартизованих вимірювань, а також вирішення проблем логістики та безпеки досліджень *in vivo* [21].

Попит споживачів на підвищення продуктивності продукту разом із обов'язковим досягненням цілей безпеки та ефективності є головною причиною зміни формули, а також складним завданням для розробників. Будь-яка зміна рецептури, незалежно від її доцільності - чи то для інноваційного удосконалення продукту (введення нових активних складових або сировини) чи через необхідність (наприклад, через законодавчі обмеження щодо торгівлі), обмеження доступності складових на ринку або впровадження нового виробничого обладнання, може мати різні наслідки, які можуть бути бажаними або ні. Методом дослідження було оцінено вплив багатьох факторів - зміни складу, умов виробництва та їх взаємодії на текстурні та реологічні характеристики емульсії, використовуючи загальний експериментальний факторний план і підхід, встановити, який міг би, до певної міри, замінити деякі дорогі та трудомісткі тести (наприклад, певний сенсорний аналіз), які часто вимагаються після зміни рецептури. Була використана стратегія експериментального дизайну для виявлення впливу факторів зміни складу (додавання нових активних складових, зміни методу приготування) на текстурні



та реологічні властивості косметичних емульсій, особливо тих, що пов'язані з певними сенсорними властивостями та розміром крапель. Загальний експериментальний факторний план показав значний прямий вплив кожного фактора, а також взаємодію на деякі характеристики системи та надав деяку ціну інформації для точного налаштування умов зміни рецептури. Після додавання STEM-ліпосом консистенція, індекс в'язкості, твердості та когезивності були знижені, а також певні реологічні параметри (модуль пружності та в'язкості), тоді як максимальна та мінімально видима в'язкість і розмір крапель збільшилися. Наявність пом'якшувача (сквалену) залежно від концентрації впливає на всі досліджувані параметри. Модифікація методу приготування (використання Ultra Turrax замість пропелерної мішалки) створювала емульсію з вищою стійкістю та максимальною видимою в'язкістю, але призводила до зменшення мінімальної видимої в'язкості, площі петлі гістерезису, усіх контрольованих параметрів колової реології та розміру крапель. Дослідження показало, що встановлений підхід, який компенсує загальний дизайн експерименту та інструментальні, реологічні та текстурні вимірювання, може бути доцільним, більш об'єктивним, повторюваним і економічно ефективним у часі та витратах для розробки косметичних емульсій із задовільними, покращеними або незмінними властивостями [22].

Зросло зацікавлення в природній косметиці, що збільшило зростання попиту на продукти без консервантів на основі рослинних складів. Новаторські емульсії типу В/О/В, з екстрактами трав, розроблені одночасно, з катіонною формою, індукованою екстрактом розмарину в етанолі, стабілізовані трав'яними гелями. Зважаючи на багатий фітохімічний склад рослинних екстрактів та присутність спирту, що може спричинити подразнення, сенсibiliзацію або сухість шкіри, безпека цієї системи доставки була об'єктом дослідження. Мета нашого дослідження - оцінити потенціал таких емульсій на основі природних компонентів щодо подразнення шкіри та фототоксичності за допомогою 3D-моделей епідермісу *in vitro*, а також вплив на вологість, вміст шкірного сала та пігментацію шкіри за допомогою медико-біологічного обстеження та дерматоскопічної камери. Крім того, до результатів тестування на

життєздатність клітин *in vitro*, досліджувана емульсія не мала подразнення ефекту або фототоксичності для кератиноцитів шкіри людини. У випадках з використанням на шкірі, емульсія не викликала сухості шкіри, навіть з наявністю етанолу. Таким чином, можна зробити висновок, що ця емульсія є безпечною для використання як продукт, який не вимивається, після чого вона позитивно впливає на властивості шкіри, або як напівтверда фармацевтична основа, для інкапсуляції активних сполук [23].

Емульсії знаходять своє застосування в різних сферах промисловості, таких як фармація, косметика та харчова промисловість, і вони викликають значний науковий інтерес. Крім того, у повсякденному житті ми користуємося водними емульсіями, але також важливу роль відіграють емульсії з "олія в маслі" (o/o) через їх унікальну фізику та можливості застосування. У цій статті ми досліджуємо поведінку органічних крапель, оточених органічним середовищем (o/o емульсії) з іншими функціональними групами, які піддають впливу змінного електричного поля. Поведінку крапель можна класифікувати за п'ятьма типами: "без ефекту", "рух", "деформація", "розрив межі" та "розлад". Використовують ключове безрозмірне число  $We = \frac{\rho \omega^2 R^2}{\sigma}$  разом з геометричним каналом для опису типової поведінки емульсій, таких як силіконове масло/1,6-гександiolдіакрилат та мінеральне масло/1,6-гександiolдіакрилат. На відміну від водної емульсії, релаксація Максвелла-Вагнера гальмує електричний ефект і надає ефективну частоту в діапазоні від 0,5 до 3 кГц. Збільшення в'язкості краплі погіршення ескалації, що сприяє ефекту зсуву за тих же умов потоку. Краплі етиленгліколю переважно демонструють ефективну коалесценцію навіть при низьких значеннях  $We = \frac{\rho \omega^2 R^2}{\sigma}$ , що пояснюється притягуванням вільних зарядів, спричиненим підвищенням провідності. У емульсії 1,6-гександiolдіакрилат/силіконове масло крапля має тенденцію утворювати рідку плівку, яка розширюється на весь канал завдяки спорідненості краплі зі стінкою каналу. Між електродами при високій напругі коливаються різноманітні подовжені колони. Ці висновки можуть сприяти розумінню електрогідродинамічної фізики в олійно-олійній емульсії та керуючій поведінці крапель швидкою реакцією, програмованим і високопродуктивним способом.

Очікується, що ця технологія маніпулювання краплями може бути широко впроваджена в широкі області хімічного синтезу, біологічних і матеріалознавчих наук [24].

### **1.3. Найважливіші методи та проблеми для змішування незмішуваних рідин**

Існує кілька методів для змішування незмішуваних рідин, але кожен з них має свої переваги та обмеження. Механічне змішування включає в себе використання механічних засобів, таких як мішалки або блендери, для створення турбулентності та подрібнення незмішуваних фаз. Проте цей метод може бути обмеженим у використанні для великого масштабу виробництва, а також може призвести до руйнування дрібних частинок або емульсій. Емульгація вимагає використання емульгаторів та додаткових речовин для створення стабільних емульсій. Проблемою можна вибрати правильний емульгатор для конкретної пари рідини, а також нестійкість емульсії з часом. Використання ультразвукового змішування для створення мікро- та наномульсій шляхом використання ультразвукових хвиль. Проте цей метод може бути вимогливим до обладнання та енергії, а також може вимагати додаткового процесу контролю. Мікросистеми змішування включають в себе використання мікросистем для поділу рідини на дрібні частинки та створення стабільних емульсій. Проте цей метод може бути дорогим та складним у реалізації. Проблеми, які можуть виникнути при змішуванні незмішуваних рідин, включають розділення емульсій з часом, нестійкість продукту, складності при виборі правильних емульгаторів або проблеми з диспергуванням незмішуваних фаз. Також можуть виникати проблеми з часом стійкості продукту та його влади.

Змішування незмішуваних рідин може стикатися з проблемами, які ускладнюють процес та можуть вплинути на якість отриманого продукту.

Найпоширенішими проблемами є фазове розділення, неоднорідність, стійкість емульсії, погіршення властивостей, втрата активних компонентів.

Розглядаючи фазове розділення, після змішування рідини можна розділити окремі фази через їх незмішуваність. Це може призвести до утворення

відокремлених шарів рідини або емульсії, які втрачають стабільність та є неочікуваними. Незмішуваність рідини може сприяти утворенню неоднорідності в продукті, що може бути небажаним з точки зору якості та ефективності. У разі використання емульсії для змішування незмішуваних рідин може виникнути проблема з їхньою стійкістю. Емульсія може розділитися або втратити стабільність під час зберігання або використання. Незмішуваність рідини може призвести до зміни властивостей продукту, таких як текстура, консистенція або ефективність. Під час змішування незмішуваних рідин може виникнути ризик втрати активних компонентів через їхню нерівномірну розподіленість у продукті.

Ці проблеми можуть бути складними для вирішення, і вони часто вимагають використання спеціальних методів або технологій для забезпечення стабільного та якісного продукту.

Емульсія - це форма лікарського захворювання, що складається з розподіленої рівномірно дисперсної фази, що містить краплі в навколишній рідині, що утворює суцільну фазу. Емульгатор додається на межі двох незмішуваних рідин для стабілізації емульсії. Різні типи емульсій, такі як вода в олії (в/о), олія у воді (о/в), мікроемульсії та множинні емульсії, використовують для доставки ліків. Водна (водна) фаза традиційно використовується для інкапсуляції білків та інших лікарських засобів у техніці емульсії "вода в маслі у воді" (вау). Проте цей метод має проблеми, такі як зниження стабільності та низька ефективність захоплення. Тому була розроблена нова емульсійна система "тверда речовина в олії у воді" (свиноматка) для створення певних лікарських засобів. Активний компонент інкапсульований у вигляді твердої речовини та доданий до масляної фази, яка утворює дисперсію твердого масла. Потім цю дисперсію змішують з водою для утворення безперервної фази для посилення всмоктування лікарської інфекції. У цій статті розглядається дослідження ефективності складів, виготовлених у вигляді емульсії твердої води-олії, залежно від звичайних емульсій вода-масло-вода. Результати кожного дослідження коротко представлені в цій статті. Техніка емульсії для свиноматок

може бути корисною в майбутньому, оскільки показала підвищення стабільності та ефективності цікавого активного компонента [25].

#### **1.4.Об'єкти для моделювання середовищ для змішування незмішуваних рідин**

Для моделювання середовищ для змішування незмішуваних рідин можна використовувати різні об'єкти та системи. Мікросистеми змішування використовуються для змішування дуже малих об'ємів рідин на мікро-або наномасштабі. Вони можуть включати мікроканали, мікросенсори або мікропомпи, що допомагають утворювати турбулентні потоки та забезпечують ефективне змішування. Ультразвукові системи - ультразвукові хвилі можуть бути використані для створення турбулентності та дрібних крапель рідин, що полегшує їх змішування. Ультразвукові ванни або ультразвукові роги часто використовуються у лабораторних та промислових дослідженнях. Механічні засоби змішування, це можуть бути мішалки, блендери, вібраційні платформи або інші механічні пристрої, які створюють турбулентні потоки та сприяють змішуванню рідин. Емульгатори та стабілізатори допомагають стабілізувати емульсії, таких як емульгатори та стабілізатори, може полегшити змішування незмішуваних рідин. Капельне змішування, метод включає в себе додавання однієї рідини у іншу у вигляді дрібних крапель. Використання спеціальних пристроїв, таких як капельні камери або мікропіпетки, може допомогти контролювати процес змішування.

Ці об'єкти та системи можуть бути використані окремо або у поєднанні з іншими методами для ефективного змішування незмішуваних рідин у різних дослідницьких, промислових та медичних застосуваннях.

При моделюванні середовищ для змішування незмішуваних рідин використовуються об'єкти, які відображають основні характеристики процесу.

1. Контейнери та реакційні посудини: Ці об'єкти відображають середовище, в якому відбувається змішування рідин. Вони можуть мати різні форми, об'єми та матеріали, що впливає на процес змішування.

2. Мішалки та магнітні мішалки: Ці об'єкти використовуються для створення турбулентності та перемішування рідин у контейнерах. Мішалки

можуть мати різні форми та конфігурації, такі як вертикальні або горизонтальні осі, що впливає на ефективність змішування.

3. Емульгатори та диспергатори: Ці об'єкти використовуються для створення стабільних емульсій або дисперсій, забезпечуючи рівномірне розподілення рідинних фаз. Вони можуть включати ультразвукові емульгатори, високошвидкісні турбінні мішалки та інші пристрої.

4. Моделі руху рідин: Ці об'єкти використовуються для математичного моделювання руху рідин у середовищі змішування. Вони можуть включати різні математичні моделі та алгоритми, такі як моделі турбулентності або руху частинок.

5. Комп'ютерні програми та симулятори: Ці об'єкти використовуються для візуалізації та аналізу процесу змішування рідин на комп'ютері. Вони можуть включати спеціалізовані програми для обробки даних з експериментів, а також комп'ютерні симулятори для математичного моделювання.

Ці об'єкти допомагають не лише візуалізувати процес змішування рідин, а й аналізувати його характеристики та властивості з метою оптимізації процесу та покращення якості продукту.

У науці для моделювання середовищ змішування незмішуваних рідин використовуються різноманітні підходи та об'єкти. Фізичні моделі, що включають в себе лабораторні пристрої, такі як мішалки, магнітні мішалки, емульгатори, диспергатори та інші пристрої, які відтворюють умови змішування рідин в контрольованих умовах. Ці фізичні моделі дозволяють вивчати процеси змішування на практиці та експериментально отримувати дані. Комп'ютерні моделі, що базуються на математичних моделях руху рідин, які розраховуються за допомогою комп'ютерних програм. Ці моделі дозволяють прогнозувати та аналізувати різні аспекти змішування рідин, включаючи турбулентність, розподіл компонентів та ефективність процесу. Експериментальні дослідження, які науковці також використовують різноманітні методи експериментального дослідження, щоб вивчити процеси змішування незмішуваних рідин у реальних умовах. Ці дослідження можуть включати в себе вимірювання концентрацій різних компонентів, аналіз теплових та масових переносів, вивчення впливу

різних параметрів на процес та інші методи. У більш обширних системах, таких як природні водойми або промислові реактори, використовуються моделі на макроуровні, щоб досліджувати змішування рідин на великій масштабі. Ці моделі враховують гідродинамічні та термодинамічні аспекти середовища для прогнозування процесів змішування. Комбінація цих підходів дозволяє науковцям отримувати комплексний огляд процесів змішування незмішуваних рідин та розробляти оптимальні стратегії для покращення ефективності та якості продукції.

При комп'ютерному моделюванні середовищ для змішування незмішуваних рідин використовуються різні програмні інструменти та методи. Одним з таких підходів є використання програм для обчислювальної гідродинаміки (CFD), які дозволяють моделювати рух рідини і турбулентні потоки в реальних або умовних середовищах.

Наприклад, розглянемо моделювання змішування двох незмішуваних рідин у контейнері за допомогою програми для обчислювальної гідродинаміки:

1. Створення геометрії: Спочатку потрібно побудувати геометрію системи, включаючи контейнер, рідини та будь-які інші об'єкти або перешкоди. Це може бути зроблено за допомогою спеціалізованих програм для проектування та моделювання.
2. Визначення умов граничних умов: Потрібно задати умови на границях системи, такі як швидкість руху рідини, тиск, температура тощо. Ці умови визначаються на основі умов експерименту або технічних характеристик системи.
3. Визначення фізичних властивостей рідин: Для кожної рідини потрібно задати фізичні властивості, такі як густина, в'язкість та теплопровідність. Ці властивості впливають на рух рідин та їх змішування.
4. Моделювання турбулентного потоку: За допомогою спеціальних рівнянь та алгоритмів розв'язуються рівняння Нав'є-Стокса, що описують рух рідини та турбулентні потоки в системі. Це дозволяє прогнозувати рух рідини та їх змішування в середовищі.

5. Аналіз результатів: Після завершення симуляції аналізуються отримані результати, такі як розподіл концентрації рідин, швидкість та температура потоку тощо. Це дозволяє зрозуміти динаміку змішування рідин та вплив різних параметрів на процес.

Комп'ютерне моделювання дозволяє ефективно досліджувати процеси змішування незмішуваних рідин у різних умовах та оптимізувати дизайн та умови експерименту для досягнення бажаних результатів.

### **1.5 Методи моделювання середовищ та засобів для змішування.**

Математичне моделювання процесів конвективно дифузійного масоперенесення з урахуванням масообміну знаходить важливі застосування при вирішенні проблем в розробці фармацевтичних та косметичних засобів. На теперішній час перспективним є використання мікропористих середовищ для змішування потоків незмішуваних речовин, що дає можливість зменшити розміри відповідних пристроїв, створити відносно недорогі, швидкі і ефективні методи виготовлення високоякісних фармацевтичних та косметичних продуктів. На сьогодні вже відомі математичні моделі дифузійно-адсорбційного масоперенесення в неоднорідних середовищах. Проте актуальним залишається дослідження такого роду процесів у випадку наявності домінуючих складових механізму перенесення, що приводить до появи малих параметрів у відповідних математичних моделях. Зокрема, при дослідженні багатокomпонентного тепломасоперенесення в мікропористих середовищах, необхідно враховувати низку факторів, таких як співвідношення між величинами параметрів, що характеризують ті чи інші складові процесу, залежність фізичних та гемодинамічних властивостей таких матеріалів. Їх урахування призводить до ускладнення математичних моделей процесів сингулярностями, породженими малими параметрами. Тому постає актуальна задача розробки нових або удосконалення існуючих методів розв'язання відповідних крайових задач. Принцип локалізації, що використовується у методах теорії збурень, дозволяє одночасно отримати і достатню точність, і значне спрощення процесу розв'язування. Асимптотичний метод розв'язування типових модельних крайових задач для сингулярно збурених параболічних та



еліптичних рівнянь на теперішній час ефективно використовується для дослідження процесів конвективної дифузії при змішуванні в одно- та багатозв'язаних, плоских і просторових криволінійних областях, за умови превалювання певних складових процесу над іншими.

Моделювання процесу в мікрореакторі є ключовим етапом дослідження, що дозволяє точно передбачити перетворення реагентів у каналах та сформулювати чіткі рекомендації щодо впровадження розробленої моделі в практичний експеримент на лабораторному чи промисловому рівнях. Додатково, попередній розрахунок з використанням сучасних програмних засобів дозволяє передбачити умови проведення досліджень, здійснити планування експерименту та, отже, суттєво зменшити обсяг експериментальних робіт, витрати матеріалів та часу.

Моделювання включає аналіз наступних ключових аспектів: визначення рівня для переносу маси, тепла, імпульсу, а також встановлення початкових і граничних умов для конкретного процесу чи реакції; перетворення цих рівнів у числовий код з урахуванням обраного середовища обчислень; проведення серії теоретичних експериментів з наданням набору даних для подальшої інтерпретації, обробки та візуалізації; дослідження впливу різних параметрів на продуктивність системи; обґрунтування доцільності проведення процесу в мікрореакторі з метою оптимізації роботи окремих елементів чи всього виробництва.

Згідно з даними, даними в літературі, ефективними чисельними методами для розв'язання рівнянь математичної моделі мікрореактора є: метод кінцевих елементів, рівняння Нав'є-Стокса, метод побудови розрахункових місць та методи розв'язування систем лінійних алгебраїчних рівнів. Ці методи включають у себе рівень матеріального та теплового балансів, фізичні параметри перетворення реагентів, кінетичний рівень для реакцій та рівень гідродинаміки потоків (CFD – Computational Fluid Dynamics).

Сучасні різноманітні програмні засоби для аналізу складних процесів, які створюють вбудовані математичні моделі для вивчених процесів і реакцій, а також для програмування нових процесів на базі використовуваних моделей.

Найвідомішими серед них є Fluent, CFD-ACE+, COMSOL Multiphysics, CoventorWare, Aspen HYSYS, Aspen Plus, ANSYS, CHEMCAD і Mathcad. У таблиці 1 наведено приклади застосування різних програмних середовищ для дослідження хімічних процесів у мікрореакторах.

Моделювання хімічних реакцій у мікрореакторі				
Об'єкт моделювання	Тип мікрореактора	Опис моделі	Програмний пакет	Посилання
Реакція (конденсація) Кневенегеля	Мембранний мікрореактор (Membrane microreactor)	Диференціальні рівняння матеріального балансу для руху ідеальних речовин в мікроканалах та при проходження через шар каталізатора	Femlab™	[7]
Селективне каталітичне відновлення (SCR) NO <sub>x</sub>	Мікроструктурний реактор (Microstructured reactor)	Метод кінцевих елементів для опису профілів концентрації реагентів (C <sub>16</sub> H <sub>34</sub> , NO) і продуктів (CO <sub>2</sub> , N <sub>2</sub> ) реакції.	Comsol Multiphysics 3.5	[6]
Формування снарядного режиму течії потоку	Мікроструктурний реактор (Microstructured reactor)	CFD-моделювання для дослідження змішування в T-реакторі з урахуванням утворення плівки на стінках мікроканалів	FLUENT (ANSYS Inc.)	[14]
Гідродинаміка потоку	Мікрореактор із сітками (Mesh microreactor)	Дисперсійна модель для аналізу осьової дисперсії потоку рідини	gPROMS©-3.0.2	[15]
Реакція омилення етилацетату	T-подібний мікрореактор (T-microreactor)	Метод кінцевих елементів для розрахунку поля швидкостей та концентрацій	ANSYS CFX	[16]

Таким чином, застосування математичного опису, численних методів і програмних засобів для теоретичного аналізу складних процесів дозволяє отримати детальний опис досліджуваної системи та сформулювати чіткі рекомендації для синтезу нових матеріалів [26].

Для оцінки ефективності дев'яти обчислювальних моделей у моделюванні середньої за часом осьової швидкості рідини та профілів затримки в колонці бульбашки використовуються систематичні зміни міжфазних сил, моделі турбулентності для безперервної та дисперсної фаз, а також коефіцієнти підйомної сили та розподілу бульбашок за розміром. Період коливання газового шлейфу також був врахований у цій оцінці. Аналіз конвергенції з чотирма

ефективними ситками показав, що найтонша сітка мала найбільшу розбіжність з експериментальними даними, що показує наявність інших факторів, крім розміру елементів та показників якості, при виборі сітки для моделювання багатофазного потоку. Для ефективної фази використовувалися стандартні, ГВЧ та реалізовані моделі к-ε, а для дисперсної фази – алгебраїчна та стандартна моделі к-ε. Виявлено, що ізотропна модель RNG для слабкої фази дала точні прогнози в анізотропній області поблизу газорозподільника. Алгебраїчний підхід для газової фази має такі результати зі стандартною моделлю. Найвищі прогнози були отримані за умови одночасної присутності підйомної сили та силової віртуальної маси, причому коефіцієнт підйомної сили 0,2 показав кращу продуктивність, ніж 0,14, але викликав швидке гасіння підйомної сили та спричинив втрату точності моделювання. Водночас, баланс населення не покращив прогнози [27].

У даному дослідженні використано математичне моделювання та чисельне дослідження процесу розпаду мікрокрапель у системі двофазного потоку, зумовленого коливального потоку, у сплаві з низькою температурою плавлення (LMPA) у воді в мікроканалі. Досліджено вплив числа Вебера, частоти коливання та температури на динаміку розпаду крапель. Зниження температури завдяки швидкому твердінню крапельки LMPA, що призводить до утворення наддрібних часток розміром до 1 мікрона менше ніж за 3 мс. Розроблений універсальний підхід за рахунок процесу розпаду краплі з домінуванням коливального потоку та фазовою зміною, що призводить до утворення мікрочастинок LMPA з монодисперсним розподілом розмірів та адаптованими властивостями за допомогою прямого мікроканалу, що спрощує процес виготовлення мікропристроїв. Це дослідження може відкрити нові можливості для використання мікрочастинок LMPA в різних галузях, таких як зберігання енергії та управління теплом [28].

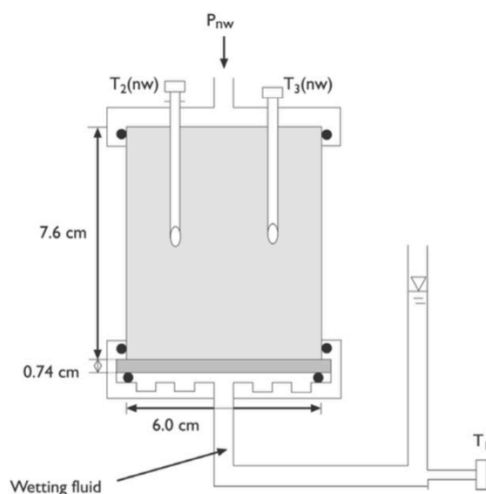
Нафтова індустрія постійно вдосконалює свої технології, щоб зменшити витрати на транспортування вуглеводнів, з корозією трубопроводів та краще розуміти характеристики двофазного потоку. Для досягнення цієї мети використовуються прогностичні моделі з використанням нейронних мереж. У

даному дослідженні було створено обширну базу даних з 4864 точок, що містить інформацію про властивості двофазного потоку нафта-води у вертикальних трубопроводах. Для ідентифікації моделей потоку використовувалася трансформаторна нейронна мережа типу лише кодера (TNN). Було відзначено різні конфігурації моделі TNN з вибором оптимальних параметрів, таких як кількість головок уваги, функції активації та швидкість навчання. Після навчання мережі були створені прогнози з використанням резервного набору даних, що дозволило побудувати картковий потік, відображаючи закономірності, передбачені моделлю. Розроблена модель TNN успішно передала 9 із 10 моделей потоків з максимальною точністю 53,07%. Крім того, різні прогнозовані схеми потоку показали середню точність 63,21% і середню точність 86,51% [29].

Циркулюючі псевдозріджені шари (CFB), такі як рідинно-твердий (LSCFB) і газ-рідина-твердий (GLSCFB), широко використані в хімічних, біохімічних і екологічних процесах із забезпеченням поліпшення міжфазного контакту та зменшення зворотного змішування замість традиційних киплячих шарів. Розуміння гідродинамічної поведінки (G)LSCFB має ключове значення для їх оптимального проектування та ефективної роботи. Рекомендується використовувати надійні методи вимірювання концентрації твердих речовин, швидкості, потоків і розмірів частинок. У цій статті подано вступ до гідродинаміки та системи моделювання (G)LSCFB, яке є необхідним для розуміння їхніх властивостей та представлених компонентів. Оптимізація умов роботи (G)LSCFB приносить різним галузям промисловості. У цьому огляді розглядаються різні методи моделювання, такі як CFD, ANN та ANFIS у системі (G)LSCFB, які допомагають мінімізувати витрати та час, необхідні для експериментальних досліджень. Крім того, (G)LSCFB є універсальним і корисним для розробки нових біореакторів, особливо для одночасної та незалежної реакції та регенерації частинок біокатализатора завдяки двом окремим зонам. У статті описано застосування (G)LSCFB в різних аспектах, включаючи очищення стічних вод, полімеризацію фенолу, виробництво молочної кислоти, відновлення білка, видалення важких металів і виробництво

лінійного алкілбензолу (LAB). У цьому підкреслі розміщені унікальні особливості системи (G)LSCFB, які можуть сприяти розвитку нових дослідницьких можливостей і стимулювати подальші дослідження в цій галузі [30].

У наступному прикладі розглядається двофазний потік у пористому середовищі. Опис того, як рідини, що не змішуються, переміщуються через пористі середовища, є ключовим для розуміння багатьох екологічних і промислових проблем. Багатофазний аналіз ускладнений вирішенням низки взаємозалежних змінних разом з різними невідомими, зокрема гідравлічними властивостями, що залежать від тиску та рівнів насичення кожної рідинної фази. У цьому експерименті спостерігалася лабораторна колонка, а числові оцінки двофазного потоку порівнювалися з результатами комп'ютерного моделювання, яке використовувало аналітичні вирази для визначення проникності. Робота Лінкольна заснована на застосуванні формул Муалема та van Genuchten для встановлення гідравлічних властивостей.



Мал. 1 Геометрія колони двофазного потоку в експериментах Хопманса а інших.

Це багатокомпонентний приклад. Перша частина встановлює модель двофазного потоку для води та повітря; рівняння тиску. Насиченість залежить від розчину. Основне припущення виникає в тому, що принаймні деяка кількість залишків повітря та води завжди існує в товщі підстави. Модель відстежує

фронт газу, коли він витісняє зволожуючу рідину, спостерігаючи за насиченням, а не припускаючи дискретну межу. Друга частина модифікує симуляцію повітря-води для суміші повітря-нафти та нафти-води. В експериментальній установці для повітря і води повітря надходить з верхньої поверхні колони з води і піску. Вхідне повітря (фаза змочування) змушує воду (фаза змочування) до вихідного отвору в основі колони. На вході тиск повітря зростає з часом, і вода не виходить через верх колонки. Рухаючись до вихідного отвору, вода проходить через диск, непроникний для потоку повітря. Ні повітря, ні вода не можуть пройти через стіни вертикальної колони. Тиск води на виході, який змінюється в часі, відповідає висоті підйомної рідини в приймальній бюретці. Загальна висота колони 8,34 см, радіус 6 см, товщина диска 0,74 см. Експеримент триває 170 годин [31].

Таким чином, актуальним є науково-технічне завдання моделювання процесів багатокомпонентного змішування у мікропористих середовищах для змішування незмішуваних речовин.

## 1.6. Методи оцінки ефективності та технологічності середовищ та засобів для змішування

Можна досліджувати процес згуртування суспензій, розглядаючи загальні аспекти руху двофазних потоків. У випадку відсутності тепло- і масообміну рівняння руху двовимірного нестационарного двофазного потоку можна записати так:

$$\rho(1-\alpha)\left[\frac{dU}{dt} + u\frac{dU}{dz}\right] + \rho_g\alpha\left[\frac{dU_g}{dt} + u_g\frac{dU_g}{dz}\right] = -g[(1-\alpha)\rho + \alpha\rho_g] - \frac{dP}{dz} - \frac{d\tau}{dz}. \quad (1)$$

Величина  $\alpha$  визначає частку дисперсної фази в середовищі носії. При  $\alpha=0$  рівняння (1) збігається з звичайним рівнянням руху матеріального потоку.

Рівняння нерозривності для середовища носія і дисперсної фази, що рівномірно розподіляється за даним обсягом суспензії, записується у вигляді :

$$\frac{d}{dt}[(1-\alpha)\rho] + \frac{d}{dz}[(1-\alpha)\rho U] = 0, \quad (2)$$

$$\frac{d}{dt}(\alpha\rho_g) + \frac{d}{dz}(\alpha\rho_g U_g), \quad (3)$$

де:  $\rho$  та  $\rho_d$  – густина середовища носія, і дисперсної фази;

$U$  та  $U_g$  – швидкість руху середовища носія, і дисперсної фази;

$T$  та  $z$  – координати часу і довжини;

$P$  – тиск.

Прийнявши, що в'язкість рідини у разі взаємодії з дисперсною фазою повністю характеризується силою гідравлічного опору, запишеться система рівнянь (4-6)

для стаціонарного процесу згущення у вигляді :

$$\frac{dP}{dz} + g \left[ (1 - \alpha)\rho + \alpha\rho_g \right] = 0, \quad (4)$$

$$3\pi\mu_0d(U - U_g) = \frac{1}{6}\pi d^3 \left[ (\rho_g - \rho)g + \frac{dP}{dz} \right] f(\alpha), (5)$$

## 1.7. Порівняльний аналіз існуючих технологій та обладнання для змішування

Емульсії - це гетерогенні системи, що складаються принаймні з двох незмішуваних рідин, води та олії, одна з яких зазвичай рівномірно диспергована у вигляді дрібних крапель в іншій рідкій фазі за допомогою механічного перемішування. Емульсії часто використовуються у місцевих фармацевтичних і косметичних засобах, таких як лосьйони та креми. Найбільш поширеною групою емульсій, доступних для придбання як медикаменти, є дерматологічні продукти для місцевого застосування, розроблені для полегшення проникнення ліків у та/або через шкіру. Обидва типи емульсій, як масло-у-воді, так і вода-у-маслі, широко використовуються для доставки медикаментів і косметичних засобів на шкіру, залежно від властивостей активних компонентів і вказань до застосування. Вибір емульгатора та стабілізатора є важливим у процесі розробки емульсій, адже це може впливати на їхню мікроструктуру та функцію в доставці активних речовин. Вплив розміру крапельок емульсій на проникнення ліків через шкіру може бути, але не завжди, клінічно значущим. Деякі допоміжні речовини можуть випаровуватися, що також впливає на проникнення препарату через шкіру [32].

Сучасні підходи до захисту біоактивних олій:

Біоактивні олії мають широке застосування у фармацевтичній, косметичній та харчовій промисловості через їх корисні властивості. Однак, вони можуть бути вразливі до кисню, світла, вологи та тепла, що обмежує їх використання. Інкапсуляція є ефективним методом захисту біоактивних олій, і дослідження в цьому напрямку активно ведуться. Вибір системи інкапсуляції залежить від призначення кінцевого продукту, існують різні методи розробки для досягнення цієї мети [33].

Було проведено порівняльне дослідження високоенергетичного методу, такого як мікрофлюїдізація, та низькоенергетичного методу, наприклад, спонтанна емульгація, для виготовлення надтонких їстівних емульсій. Мікрофлюїдізація потребувала високих витрат енергії та спеціального обладнання, але мала менше вимог до співвідношення поверхнево-активної речовини до олії. З іншого боку, спонтанна емульгація вимагала лише простого змішування, але для отримання нанорозмірних емульсій потрібні більші співвідношення поверхнево-активної речовини до олії. Також було проведено порівняльне дослідження між спонтанною емульгацією і методом PIS для визначення факторів, що впливають на утворення та стабільність крапель. Комбінований метод PIS та високого зсуву виявився енергоефективнішим у чотири рази порівняно з прямим методом високого зсуву [34].

Проводилося порівняння розділення та визначення дев'яти консервантів з гідрофільними та гідрофобними властивостями, що часто використовуються як добавки у різноманітних фармацевтичних і косметичних продуктах, за допомогою міцелярної електрокінетичної хроматографії (МЕКС) та мікроемульсійної електрокінетичної хроматографії (МЕЕКС). Досліджено вплив температури, рН буфера та концентрації поверхнево-активних речовин на процес розділення. У МЕКС покращення роздільної здатності консервантів було зафіксовано завдяки зміні концентрації додецилсульфату натрію. Температура та рН буферів використовувались для скорочення часу розділення. У МЕЕКС для виявлення всіх консервантів за один цикл знадобилася мікроемульсія з вищим рН. Зміна температури значно покращила роздільну



здатність, а для стабільного мікроемульсійного розчину була необхідна вища концентрація SDS, тому розділення в МЕЕКС займало більше часу. Оптимальний метод МЕКС для розділення дев'яти консервантів було отримано за 9,0 хв з рН буфера 9,0 і концентрацією 20 мМ SDS при 25 °С. Також було досягнуто розділення з базовою роздільною здатністю протягом 16 хвилин за допомогою мікроемульсії з рН 9,5, яка складалася з SDS, 1-бутанолу та октану, і коротшої капілярної колонки при 34 °С. Розроблені методи МЕКС і МЕЕКС успішно використовувалися для визначення консервантів у різних косметичних і фармацевтичних продуктах [35].

Мікроспонжі стоять на передньому краї розвиваючоїся галузі новітніх технологій доставки ліків. Технологія доставки ліків мікроспонжів має велике обіцяння для досягнення цілі контрольованої та місцево-специфічної доставки ліків, тому вона привертає широку увагу дослідників. У цій статті представлено широкий огляд системи доставки мікроспонжів, обговорюються принципи та методи підготовки. Вона охоплює відповідні аналітичні техніки для характеристики мікроспонжів, такі як розмір часток та їх розподіл, поверхнева морфологія, пористість, щільність. Також згадуються переваги, обмеження та можливі заходи для їх вирішення у системі доставки ліків мікроспонжів. Ці мікроспонжі використовуються в сонцезахисних кремах, мазях, препаратах для догляду за шкірою, які продаються без рецепту, і призначені для зовнішнього застосування. Доставка ліків мікроспонжів може забезпечити збільшену ефективність для топічно активних засобів з покращеною безпекою, підвищеною стабільністю продукту та покращеними естетичними властивостями ефективним та новаторським способом. Вони використовуються переважно для зовнішнього застосування і нещодавно почали використовуватися для перорального введення [36].

За останні десятиліття цікавість у нанорозмірних емульсіях значно зростає за рахунок їх унікальних властивостей, таким як стабільність, зовнішній вигляд і продуктивність, що сприяло їх широкому застосуванню у фармацевтичних та косметичних галузях. Наномульсії стали популярною системою рецептур, завдяки їх термодинамічній та кінетичній стабільності, а також мініатюрному

розміру крапель, що сприяє швидкому та ефективному доставленню активних речовин у продаж. Виробники акцентуються на високій продуктивності та масовому виробництві, однак показують певні виклики, зокрема, щодо дифузії активних компонентів у продажі [37].

Отже, використання наноемільсій, дослідження з емульсій, захисту біоактивних олій, методів їх виготовлення та застосування мікроспонжів свідчать про постійний розвиток технологій у фармацевтичних та косметичних галузях.

### **1.8. Перспективи застосування математичних моделей для оптимізації процесів змішування не змішуваних речовин**

В останні десятиліття значну увагу привертають можливості комп'ютерного моделювання. Насамперед, це обумовлено потребами сучасних підходів до розв'язання складних і багатосторонніх проблем. Наразі спостерігається активна цифровізація суспільства в усіх його організаційних сферах а інформаційні технології знаходять широке застосування в освіті та науці. Так, комп'ютерне моделювання стало одним з важливих сфер застосування інформаційних технологій, що зумовлене збільшенням кількості даних, які генеруються в різних сферах людської діяльності, а також зі зростанням обчислювальної потужності комп'ютерів та доступності програмного забезпечення для розробки та використання комп'ютерних моделей. Використання методів і засобів комп'ютерного моделювання дає змогу моделювати різні процеси, що відбуваються в реальному світі, проводити експерименти з різними параметрами цих процесів, що дозволяє зробити прогнози та приймати важливі рішення. Застосування комп'ютерних моделей дозволяє знизити витрати на проведення експериментів та випробувань, покращити якість продуктів та послуг, підвищити ефективність виробництва та зменшити вплив людської діяльності на довкілля. Тому цифровізація суспільства в галузі комп'ютерного моделювання є дуже важливим процесом, який дозволяє зробити світ кращим та ефективнішим [1].

## РОЗДІЛ 2

### ЧИСЕЛЬНИЙ ЕКСПЕРИМЕНТ

В експериментальній частині для математичного моделювання середовища для змішування незмішуваних речовин у пористому середовищі було обрано дослідження Лінкольна та використано формули Муалема [5] і ван Генухтен [33] для надання необхідних гідравлічних властивостей для змішування незмішуваних речовин в пористих середовищах з крайовими умовами екологічно здорового тоніку для очищення шкіри обличчя, як додатковий засіб доглядової косметики для жінок.

Середовищем для проведення експерименту було обрано Comsol Multiphysics для математичного моделювання процесів. Було використано побудовану модель двофазного потоку у пористому середовищі з наявних бібліотек моделі доступних в навчальній версії програми. Опис того, як рідини, що не змішуються, рухаються через пористі середовища, є ключовим для відповіді на багато екологічних і промислових питань. На жаль, багатофазний аналіз ускладнюється необхідністю розв'язувати множину залежних змінних разом із різними невідомими. Серед них є гідравлічні властивості, які залежать від тиску та рівнів насичення кожної рідинної фази.

Керуючі рівняння та граничні умови - це фундаментальні поняття у фізиці та інженерії, які описують, як фізична система поводить себе та взаємодіє з навколишнім середовищем. Ці рівняння та умови необхідні для розв'язання задач, пов'язаних з динамікою рідини, теплопередачею, електромагнетизмом та багатьма іншими галузями.

Граничні умови походять від природи. Тому ці умови існують на природних кордонах. Часто, через обмеження в обчислювальних потужностях і засобах, великі області усикаються і обмежуються штучними синтетичними межами. Тоді необхідні граничні умови там не можуть бути забезпечені природним чином, і виникає потреба сфабрикувати їх за допомогою інтуїції, досвіду, асимптотичної поведінки та чисельних експериментів.

У цій роботі оцінено кілька типів граничних умов відтоку, включаючи основні, природні та вільні граничні умови, для двох модельних задач течії та

теплообміну. Введено і протестовано нову граничну умову відтоку, яку надалі називатимемо вільною граничною умовою. Ця вільна гранична умова еквівалентна поширенню дії слабкої форми визначальних рівнянь на синтетичний відтік замість того, щоб замінити їх невідомими основними або природними граничними умовами. У випадку нульового числа Рейнольдса вільна гранична умова мінімізує функціонал енергії серед усіх можливих варіантів граничних умов витікання. Також представлено та обговорено огляд результатів застосування тих самих граничних умов до кількох інших ситуацій течії.

Використання керуючих рівнянь та граничних умов у фізиці та інженерії слугує декільком важливим цілям:

**Опис фізичних явищ:** Керуючі рівняння забезпечують стисле математичне представлення фундаментальних фізичних законів, які керують певною системою. Вони дозволяють науковцям та інженерам описувати і розуміти складні фізичні явища в систематичний і кількісний спосіб.

**Прогнозування поведінки системи:** Ці рівняння дають змогу передбачити, як система поводитиметься за різних умов. Розв'язуючи керуючі рівняння, стає можливим визначити, як такі змінні, як температура, швидкість, електричне поле або поширення хвиль змінюються в часі або просторі.

**Оптимізація конструкції:** В інженерії рівняння мають вирішальне значення для проектування та оптимізації систем і конструкцій. Інженери можуть використовувати ці рівняння для прийняття обґрунтованих рішень щодо проектних параметрів, які призведуть до бажаної продуктивності системи, наприклад, проектування більш ефективних теплообмінників або аеродинамічних форм.

**Імітація реальних сценаріїв:** Чисельні симуляції на основі рівнянь дозволяють дослідникам та інженерам моделювати та аналізувати складні системи без потреби у фізичних прототипах. Це особливо цінно в ситуаціях, коли проведення реальних експериментів є дорогим, небезпечним або недоцільним.

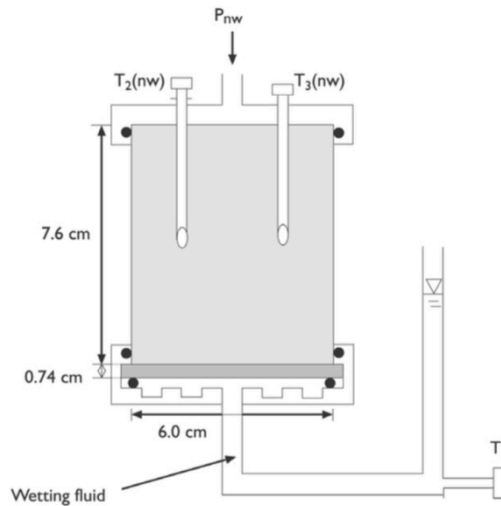
**Пошук та усунення несправностей:** Коли фізична система поводить не так, як очікувалося, керуючі рівняння можуть бути використані для виявлення

першопричин проблем. Порівнюючи математичні прогнози зі спостережуваними даними, інженери можуть точно визначити проблеми і розробити рішення.

**Інновації та відкриття:** У сфері наукових досліджень рівняння слугують основою для вивчення нових явищ і відкриття нових законів природи. Вони дозволяють вченим формулювати гіпотези, проводити експерименти та перевіряти теоретичні передбачення.

**Спрямовують політику та прийняття рішень:** Розуміння того, як працюють фізичні системи, має вирішальне значення в таких галузях, як екологія та державна політика. Рівняння керування використовуються для моделювання складних систем, таких як клімат, екосистеми та транспортні мережі, допомагаючи політикам приймати обґрунтовані рішення.

**Забезпечення безпеки та надійності:** У таких галузях, як аерокосмічна інженерія, цивільне будівництво та ядерна фізика, безпека і надійність мають першорядне значення. Керуючі рівняння допомагають інженерам проектувати системи, які відповідають стандартам безпеки і витримують екстремальні умови. Ця проблема демонструє двофазний потік після експериментальної установки Агентства з охорони навколишнього середовища США (посилання 1). Цей простий експеримент зіставляє спостереження за лабораторною колоною з числовими оцінками двофазного потоку. За допомогою цих колонкових експериментів дослідники оцінили потік для різних пар рідин (повітря-вода, повітря-масло та нафта-вода), а потім зіставили експериментальні результати з результатами комп'ютерного моделювання, які використовують аналітичні вирази для утримання та проникності. Це обговорення стосується їхньої роботи для ґрунту Лінкольна та використання формул Муалема і ван Генухтен для надання гідравлічних властивостей.



Мал. 1 Геометрія колони двофазного потоку в експериментах Хопманса а інших.

Це багатокomпонентний приклад. Перша частина встановлює модель двофазного потоку для води та повітря; рівняння тиску. Насиченість залежить від розчину. Основне припущення виникає в тому, що принаймні деяка кількість залишків повітря та води завжди існує в товщі підстави. Модель відстежує фронт газу, коли він витісняє зволожуючу рідину, спостерігаючи за насиченням, а не припускаючи дискретну межу. Друга частина модифікує симуляцію повітря-води для суміші повітря-нафти та нафти-води. В експериментальній установці для повітря і води повітря надходить з верхньої поверхні колони з води і піску. Вхідне повітря (фаза змочування) змушує воду (фаза змочування) до вихідного отвору в основі колони. На вході тиск повітря зростає з часом, і вода не виходить через верх колонки. Рухаючись до вихідного отвору, вода проходить через диск, непроникний для потоку повітря. Ні повітря, ні вода не можуть пройти через стіни вертикальної колони. Тиск води на виході, який змінюється в часі, відповідає висоті підйомної рідини в приймальній бюретці. Загальна висота колони 8,34 см, радіус 6 см, товщина диска 0,74 см. Експеримент триває 170 годин. [34].

## 2.1. ОСНОВНІ РІВНЯННЯ ТА ГРАНИЧНІ УМОВИ

Двофазний потік у пористих середовищах слідує окремим **рівнянням для змочування (w) і незмочуючі (nw) рідини**

$$(\theta_s - \theta_r) \frac{\partial Se_w}{\partial t} + \nabla \cdot \left[ -\frac{\kappa_{int} k_{r,w}}{\mu_w} \nabla (p_w + \rho_w g \nabla D) \right] = 0 \quad (1)$$

$$(\theta_s - \theta_r) \frac{\partial Se_{nw}}{\partial t} + \nabla \cdot \left[ -\frac{\kappa_{int} k_{r,nw}}{\mu_{nw}} \nabla (p_{nw} + \rho_{nw} g \nabla D) \right] = 0 \quad (2)$$

де  $\theta_s$  - загальна пористість або насичена об'ємна частка;  $\theta_r$  - залишковий об'єм частка, тому різниця  $\theta_s - \theta_r$  є доступним поровим простором для переміщення фаз;  $Se$  є ефективне насичення;  $t$  - час;  $\kappa_{int}$  - власна проникність пористого середовища;  $k_r$  - відносна проникність (функція насичення для даної рідини);  $\mu$  - рідина динамічна в'язкість (Па·с);  $p$  - тиск (Па);  $\rho$  - густина рідини (кг/м<sup>3</sup>);  $g$  - прискорення гравітації;  $D$  - координата (наприклад,  $x$ ,  $y$  або  $z$ ) вертикальної висоти (м).

Якщо розглядати безперервне поле рідини, жодна фаза ніколи не заповнює пору повністю простір, що дає об'ємну частку для фази змочування  $\theta_w$  і фази, що не змочується,  $\theta_{nw}$ . Для фази змочування  $\theta$  змінюється від нуля або невеликого залишкового значення  $\theta_r$  до загальної пористості  $\theta_s$ . Ефективне насичення  $Se$  походить від масштабування  $\theta$  по відношенню до  $\theta_s$  і  $\theta_r$  і таким чином змінюється від 0 до 1. І  $\theta$ , і  $Se$  є функціями тисків обох рідин у системі **Капілярний тиск  $p_c$  зазвичай визначається як різниця між тиском фази незмочування і зволоження**

$$(3) p_c = p_{nw} - p_w$$

## 2.2. ЕМУЛЬСІЙНИЙ МЕТОД

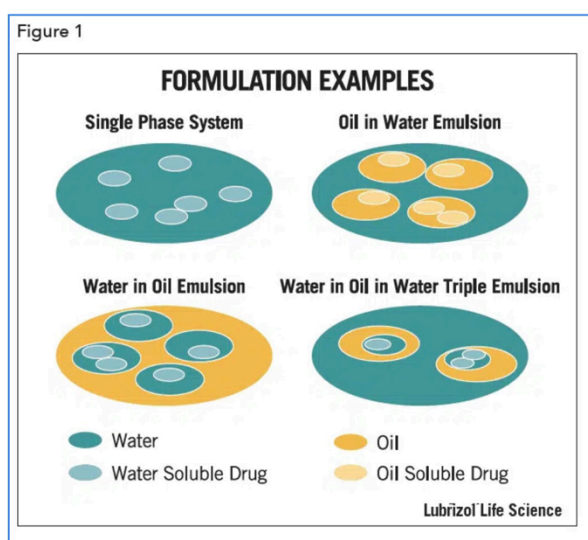
Емульсії використовуються в широкому спектрі промислових і фармацевтичних продуктів, включаючи продукти для очей, місцевого застосування, слизових оболонок, внутрішньовенні, внутрішньом'язові та пероральні продукти. Емульсії також використовуються як прекурсори для отримання полімерних мікрочастинок, наночастинок твердих ліпідів, неорганічних наночастинок і мікрокапсул, наповнених маслом, і були розроблені як попередники магнітних частинок для візуалізації, діагностики та доставки ліків. Незважаючи на їх широке використання, вони залишаються маловикористовуваним форматом лікарського засобу.

У лікарському засобі емульсія може бути:

- Сам активний компонент
- Підсилювач активності активного фармацевтичного інгредієнта (API), що вводиться разом, пасивно діючи як розчинник/стабілізуюча система або активно як система посилення проникнення/поглинання
- Фармацевтично неактивний і просто забезпечує елегантний транспортний засіб для рецептури API

У своїй найпростішій формі емульсія являє собою суміш двох незмішуваних рідин (зазвичай органічної «олії» та води), в якій одна рідина (дисперсна фаза) знаходиться у формі мікроскопічних крапельок, диспергованих в іншій (безперервній) фазі. Емульсії також містять емульгатори – матеріали, які концентруються на межі розділу фаз, щоб знизити міжфазний натяг. Емульгатори зменшують енергію, необхідну для розбиття дисперсної фази на краплі, і запобігають їх зливанню, створюючи силу відштовхування або фізичний бар'єр між ними.

Емульсії, які утворюються диспергуванням рідини, що не змішується з водою, у водній фазі, називаються масло-у-воді (м/в), тоді як ті, що мають водні краплі, дисперговані в суцільній масляній фазі, називаються вода-в-маслі (в/м). Більш складні «потрійні» емульсії мають дисперговані краплі, які містять більш дрібні краплі матеріалу безперервної фази. Потрійна емульсія з водою, диспергованою в краплях олії, які потім диспергуються у воді, називається емульсією «вода-в-олії-у-воді» (в/в/в), а менш поширений зворотний аналог називається емульсією «олія-в». -водно-масло (м/в/м). Ці типи емульсії схематично показані на малюнку 1.





Більшість емульсій містять краплі із середнім діаметром  $>1$  мкм, однак міні-та наноемульсії можуть бути утворені з розмірами крапель у діапазоні 100-500 нм, а за належного складу можна приготувати високостабільні мікроемульсії з краплями розміром до кілька нанометрів. Емульсія Пікерінга — це емульсія, стабілізована за допомогою надтонких твердих частинок, а не молекулярних емульгаторів. Стабілізуючі частинки вибирають або проектують таким чином, щоб кут контакту з водою становив близько  $90^\circ$ , щоб вони змочувалися суцільною та дисперсною фазами. Таким чином, вони залишаються на межі розділу крапель, де можуть створити бар'єр для злиття крапель.

В експериментальній установці для композиції рідина-рідина рідини надходять з верхньої поверхні колони. Вхідні рідини (олію) (фаза незмочування) та воду (фаза змочування) спрямовує до вихідного отвору в основі колони. На вході тиск рідин поступово зростає з часом, і рідина не виходить через верх колонки. Рухаючись до вихідного отвору, рідини проходять через диск, непроникний для потоку повітря. Ні рідини не можуть пройти через стіни вертикальної колони. Тиск рідин на виході, який змінюється в часі, відповідає висоті підйому рідини в приймальній бюретці. Кожна з рідин яка змішується має наступні характеристики, які є сталими.

Дані, використані в цій моделі, відповідають експериментам повітря-вода для піску Лінкольна, як зазначено в таблиці 1.

<b>ЗМІННА</b>	<b>ВИРАЗ</b>	<b>ОПИС</b>
$\rho_w$	1000 kg/m <sup>3</sup>	Щільність рідини, вода
$\mu_w$	1-103 Па-с	Динамічна в'язкість, вода
$\rho_a$	1,28 kg/m <sup>3</sup>	Густина рідина, повітря
$\mu_a$	1,81-105 пас	Динамічна в'язкість, повітря
$k_{int}$	2480 mD	Внутрішня проникність, колонка
$k_s$	13,57 mD	Прохідність, диск
$\theta_s$	0,32 m	Насичена об'ємна частка, колонка
$\theta_{s,u}$	0,5 m	Насичена об'ємна частка, диск
$p_{nw,top}$	0,2 m води	Початковий напір на вході, фаза незмочування

Таб 1. Данні, що відповідають експериментам повітря-вода для піску Лінкольна.

Параметри ван Генухтена для різних рідинних пар такі :

	ОПИС	ОДИНИ	Повітря/во	Повітря/ олія	Олія/вода
	Залишкова об'ємна частка		0,021	0,00001	0,0072
$\alpha$	Альфа-параметр	m -1	1,89	5,29	3,58
n	n параметр, стовпець		2,811	3,002	3,1365
L	L параметр, стовпець		0,5	0,5	0,5
ks	Прохідність, диск	m -2	2,48*10-12	1,09*10-12	0,94*10-12

Таб 2. Вихідні данні для рідинних пар.

Колона має загальні геометричні характеристики: висоту, радіус, а диск товщину. Пористе середовище характеризується, пористістю, проникністю, залишковою об'ємною часткою, які під час чисельного експерименту будуть змінюватись для досягнення найкращих якісно-часових характеристик.

### 2.3. Чисельний експеримент

Для забезпечення оптимального технологічного процесу змішування екологічно здорового тоніку, проведемо чисельне моделювання доступних компонентів моделі.

За допомогою програми комп'ютерного моделювання Comsol Multiphysics визначаємо як пористість, проникність, насичена об'ємна частка та залишкова об'ємна частка впливатиме на загальний показник змішування рідин, підбираючи різні показники середовища.

**Пористість** - це властивість матеріалів або середовища, яка визначає відношення об'єму пор певного матеріалу до загального об'єму цього матеріалу. Ця властивість вимірюється у відсотках або у відносних одиницях від 0 до 100%.

Relative Permeability - відносна проникність

Effective Saturation - ефективне насичення

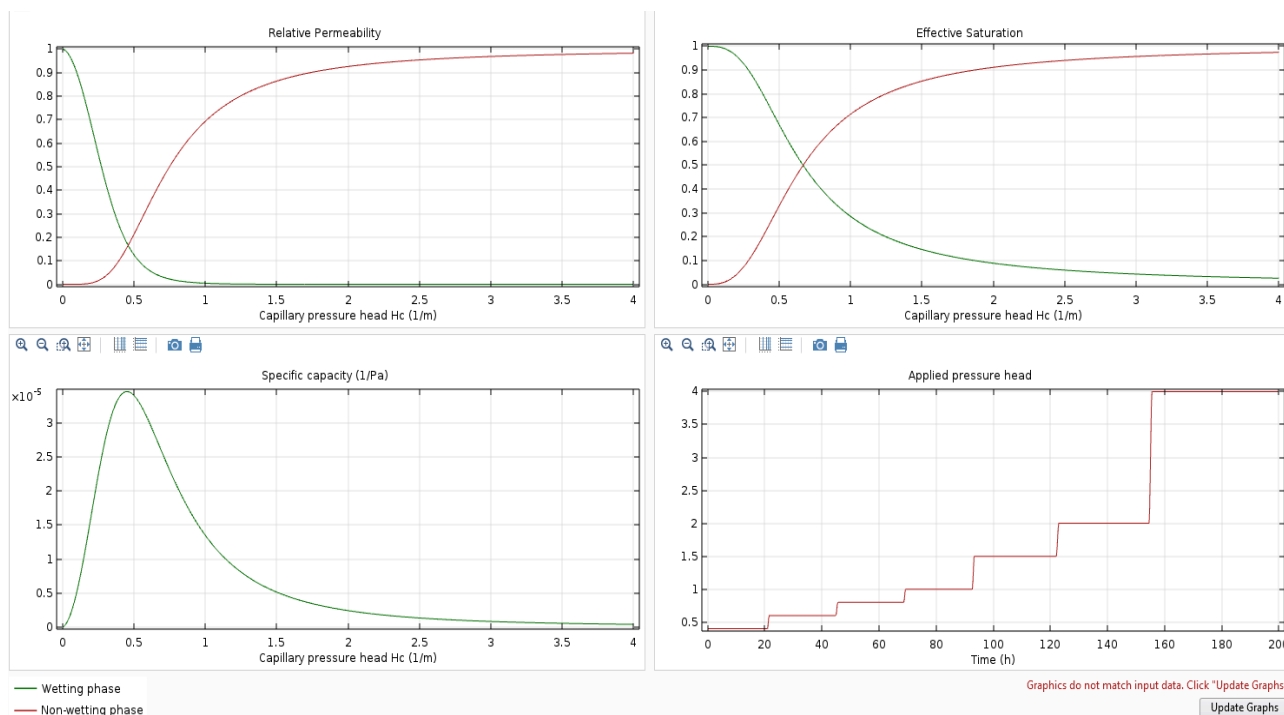
Specific capacity - питома ємкість

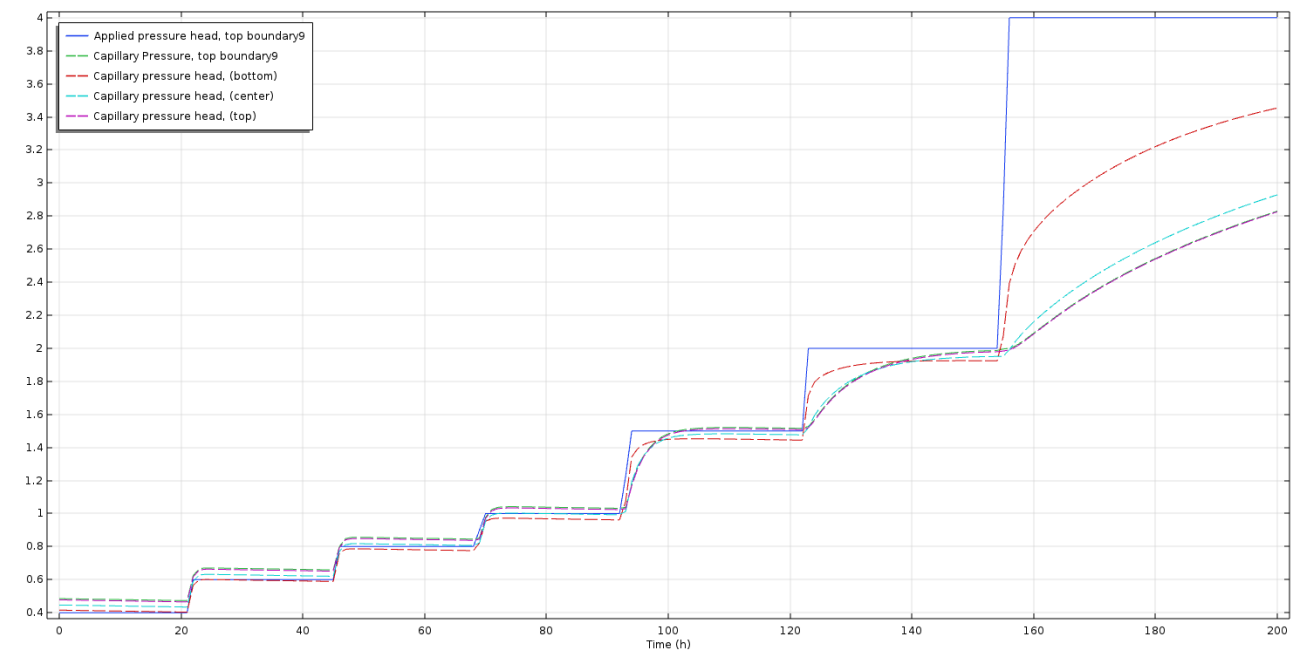
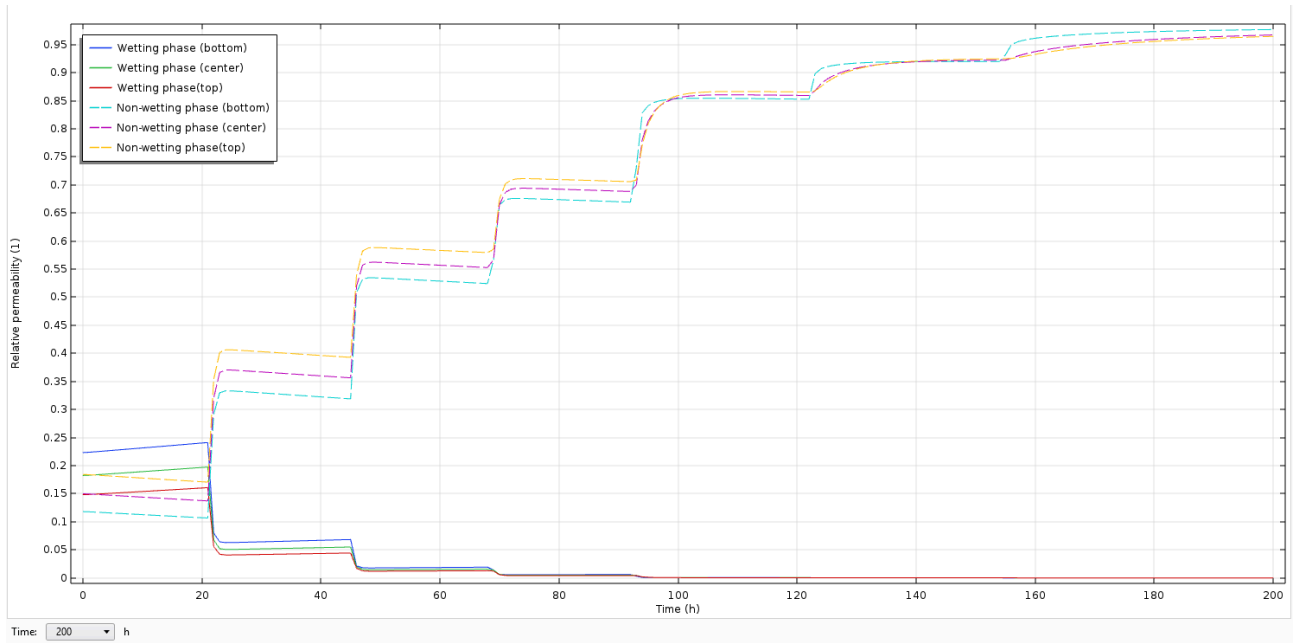
Applied pressure head - прикладний тиск

Проведемо чисельне моделювання середовища для змішування тоніку при значенні пористості 0,25

<input type="radio"/>	Lincoln soil	Porosity:	<input type="text" value="0.25"/>	
<input type="radio"/>	Columbia soil	Permeability:	<input type="text" value="2480"/>	mD
<input checked="" type="radio"/>	User-defined	Saturated volume fraction:	<input type="text" value="0.32"/>	
		Residual volume fraction:	<input type="text" value="0.021"/>	
Van Genuchten parameter:				
		$\alpha$	<input type="text" value="1.89"/>	1/m
		L	<input type="text" value="0.5"/>	
		N	<input type="text" value="2.811"/>	

Результати розрахунку пористості представлено на графіках :

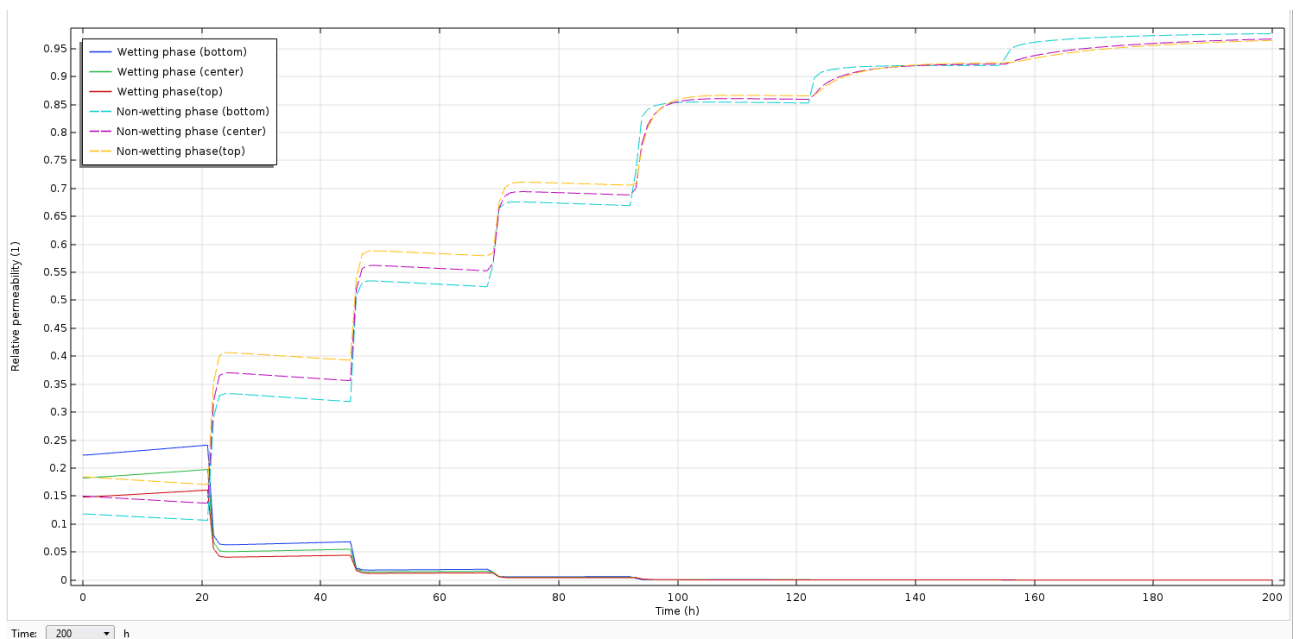
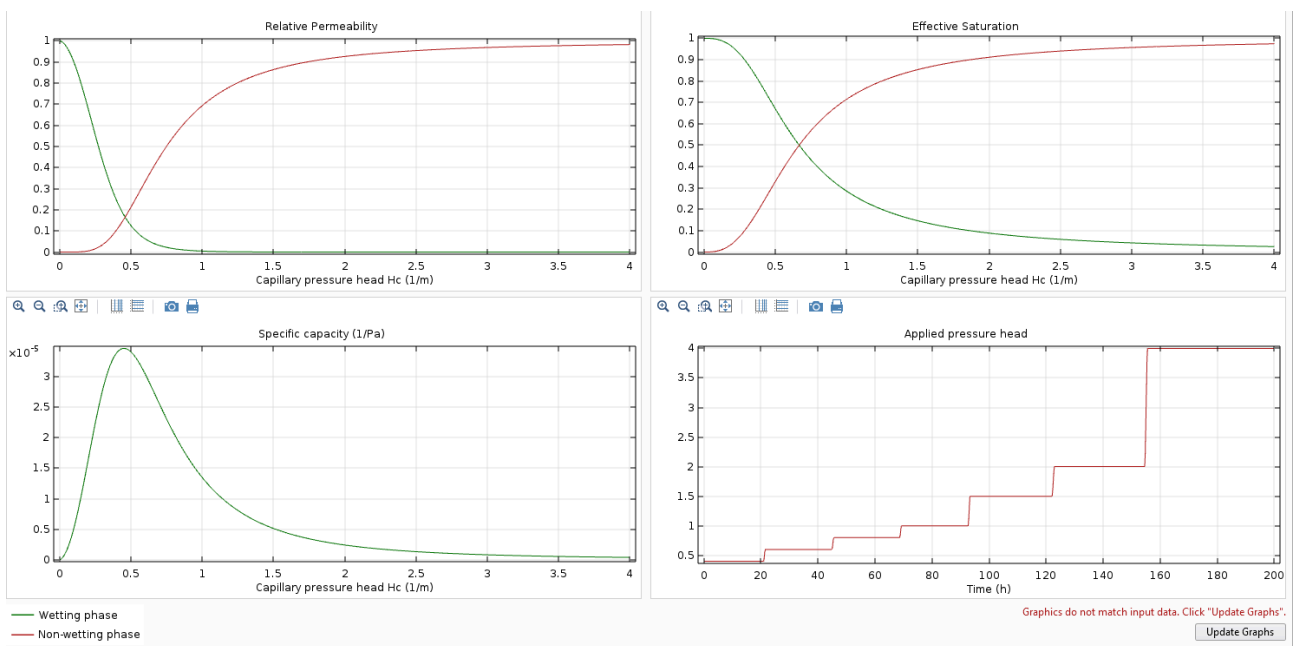


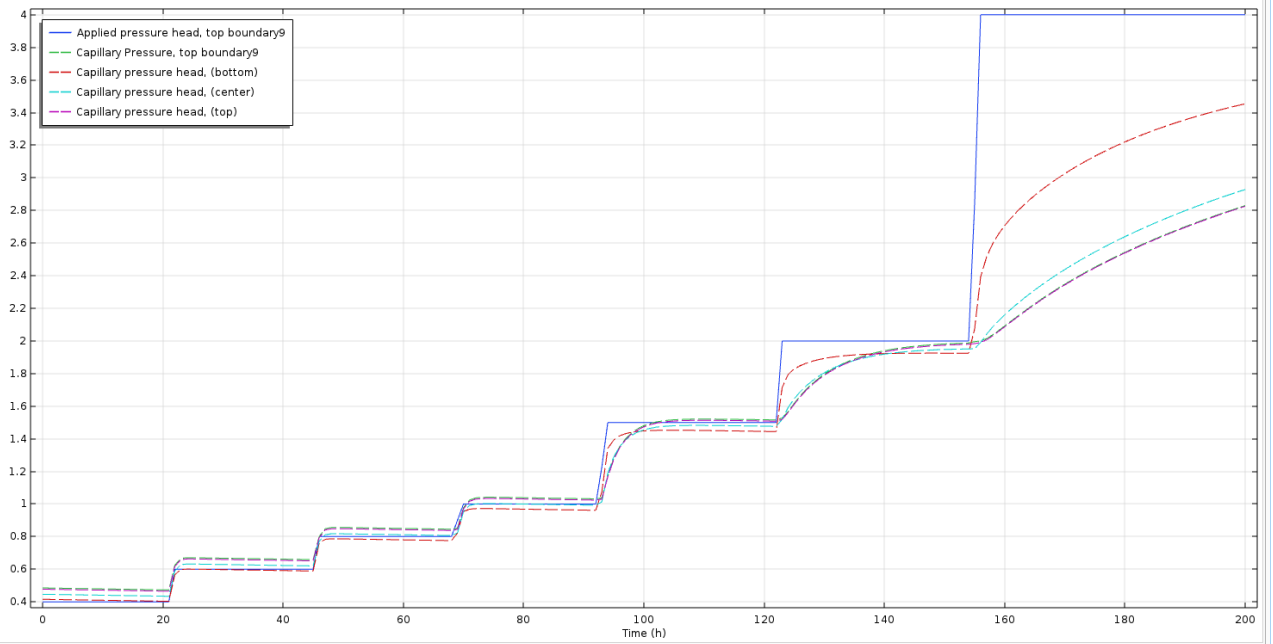


Проведемо чисельне моделювання середовища для змішування тоніку при значенні пористості 0,1

<input type="radio"/> Lincoln soil	Porosity:	<input type="text" value="0.1"/>
<input type="radio"/> Columbia soil	Permeability:	<input type="text" value="2480"/> mD
<input checked="" type="radio"/> User-defined	Saturated volume fraction:	<input type="text" value="0.32"/>
	Residual volume fraction:	<input type="text" value="0.021"/>
Van Genuchten parameter:		
	$\alpha$	<input type="text" value="1.89"/> 1/m
	L	<input type="text" value="0.5"/>
	N	<input type="text" value="2.811"/>
	$M=1-1/N$	<input type="text" value="0.6443"/>

Результати розрахунку пористості представлено на графіках:

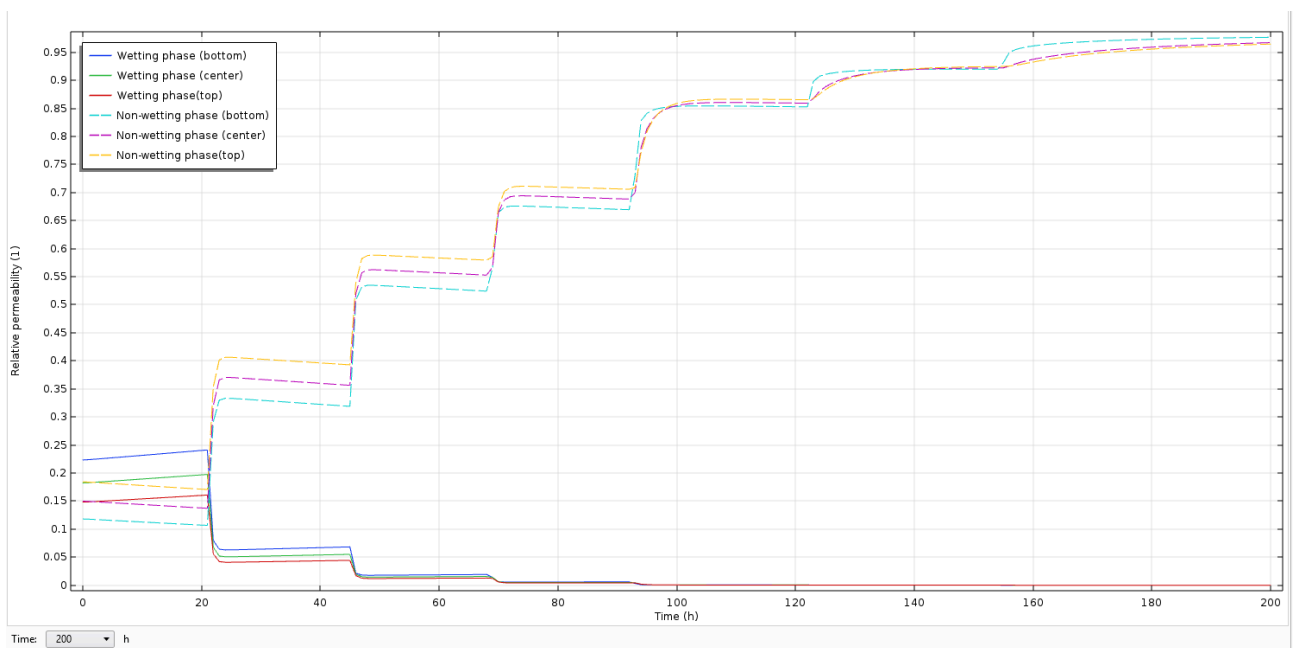
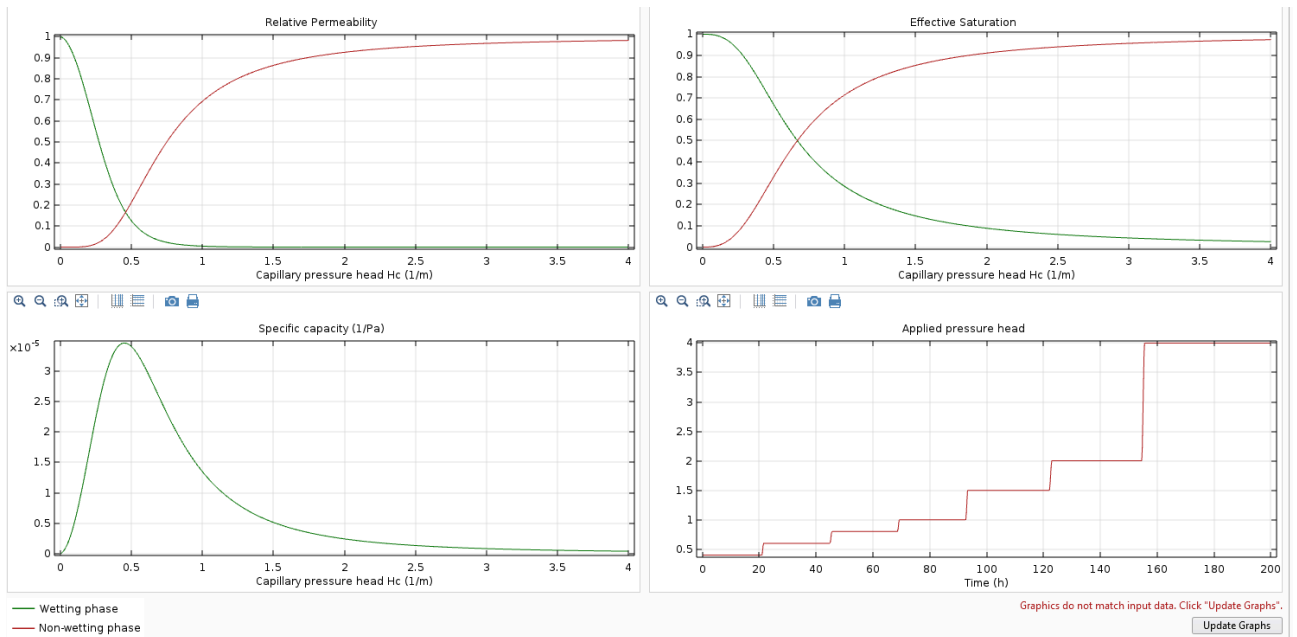


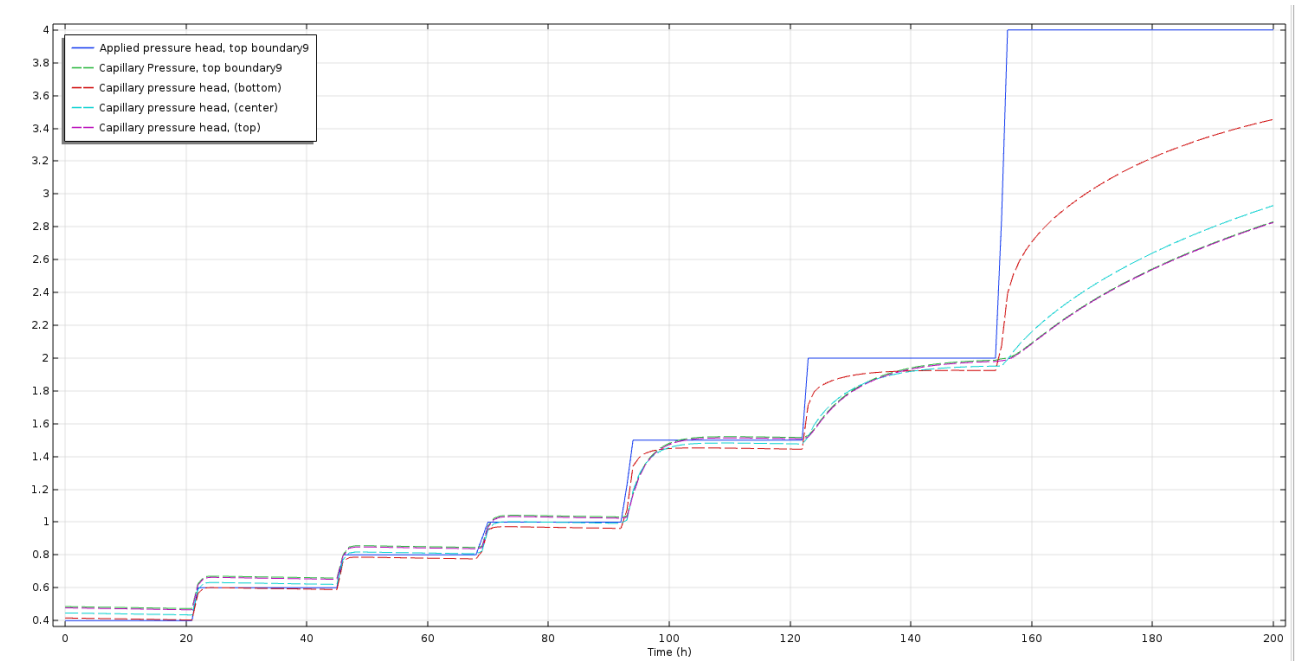


Проведемо чисельне моделювання середовища для змішування тоніку при значенні пористості 0,9

<input type="radio"/> Lincoln soil	Porosity:	<input type="text" value="0.9"/>
<input type="radio"/> Columbia soil	Permeability:	<input type="text" value="2480"/> mD
<input checked="" type="radio"/> User-defined	Saturated volume fraction:	<input type="text" value="0.32"/>
	Residual volume fraction:	<input type="text" value="0.021"/>
Van Genuchten parameter:		
	$\alpha$	<input type="text" value="1.89"/> 1/m
	L	<input type="text" value="0.5"/>
	N	<input type="text" value="2.811"/>
	M=1-1/N	0.6443

Результати розрахунку пористості представлено на графіках:





Висновок: провівши дослідження ми можемо зробити висовок, що пористість не впливає на загальний показник змішування рідин.

**ПРОНИКНІСТЬ** - це властивість середовища (наприклад, пористої породи, ґрунту або матеріалу), яка визначає його здатність пропускати рідини або газу через себе. Вимірюється проникливість у відповідних одиницях, зазвичай у метрах за секунду (м/с) для рідин або у метрах кубічних за секунду на квадратний метр ( $\text{м}^3/(\text{с} \cdot \text{м}^2)$ ) для газів. Межі значень доступних для зміни проникливості залежать від властивостей самого середовища, його структури та інших факторів. Наприклад, для пористих порід проникливість може варіюватися від дуже низьких значень до високих, враховуючи такі фактори, як розмір та форма пор, ступінь насичення рідиною чи газом, тиск та температура.

Relative Permeability - відносна проникність

Effective Saturation - ефективне насичення

Specific capacity - питома ємність

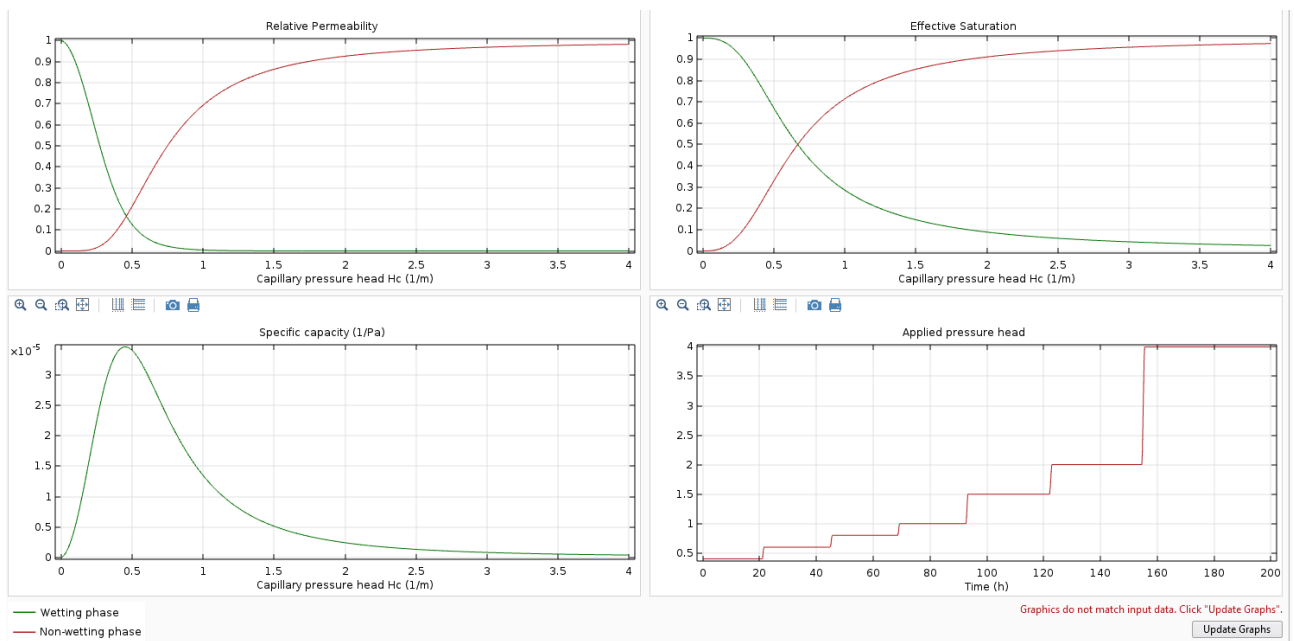
Applied pressure head - прикладний тиск

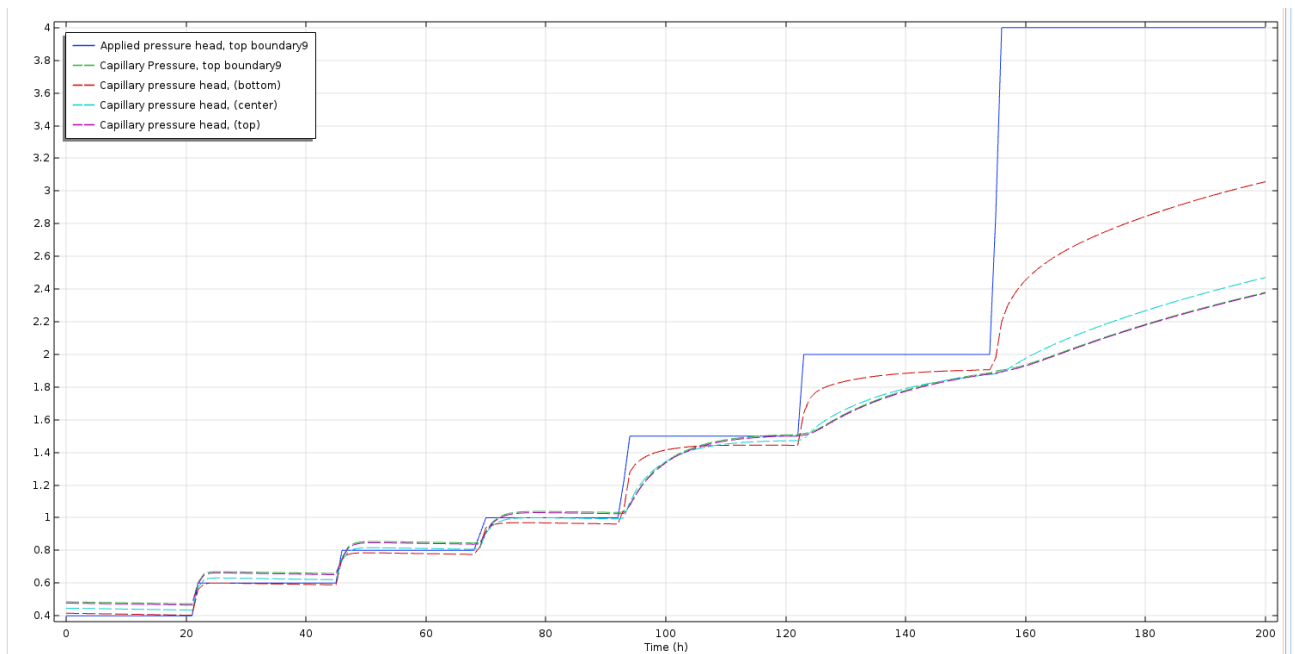
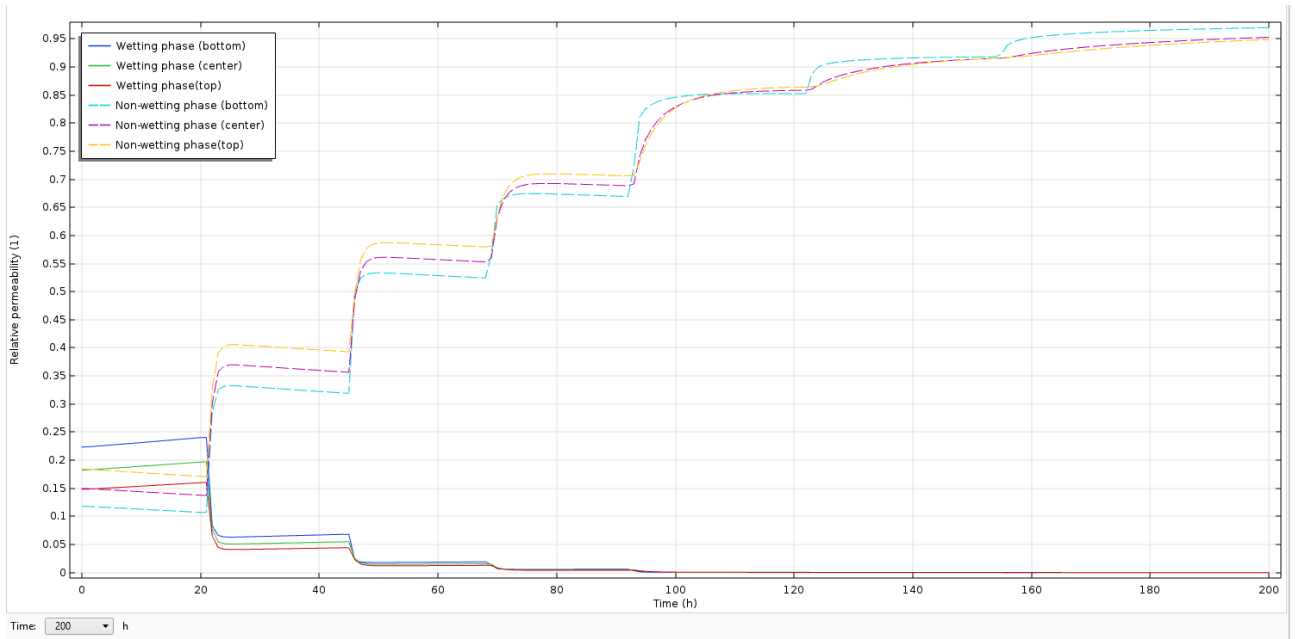
Проведемо чисельне моделювання середовища для змішування тоніку при значенні проникності 1000



<input type="radio"/> Lincoln soil	Porosity:	<input type="text" value="0.25"/>
<input type="radio"/> Columbia soil	Permeability:	<input type="text" value="1000[mD]"/> mD
<input checked="" type="radio"/> User-defined	Saturated volume fraction:	<input type="text" value="0.32"/>
	Residual volume fraction:	<input type="text" value="0.021"/>
Van Genuchten parameter:		
	$\alpha$	<input type="text" value="1.89"/> 1/m
	L	<input type="text" value="0.5"/>
	N	<input type="text" value="2.811"/>
	M=1-1/N	<input type="text" value="0.6443"/>

Результати розрахунку проникності представлено на графіках:

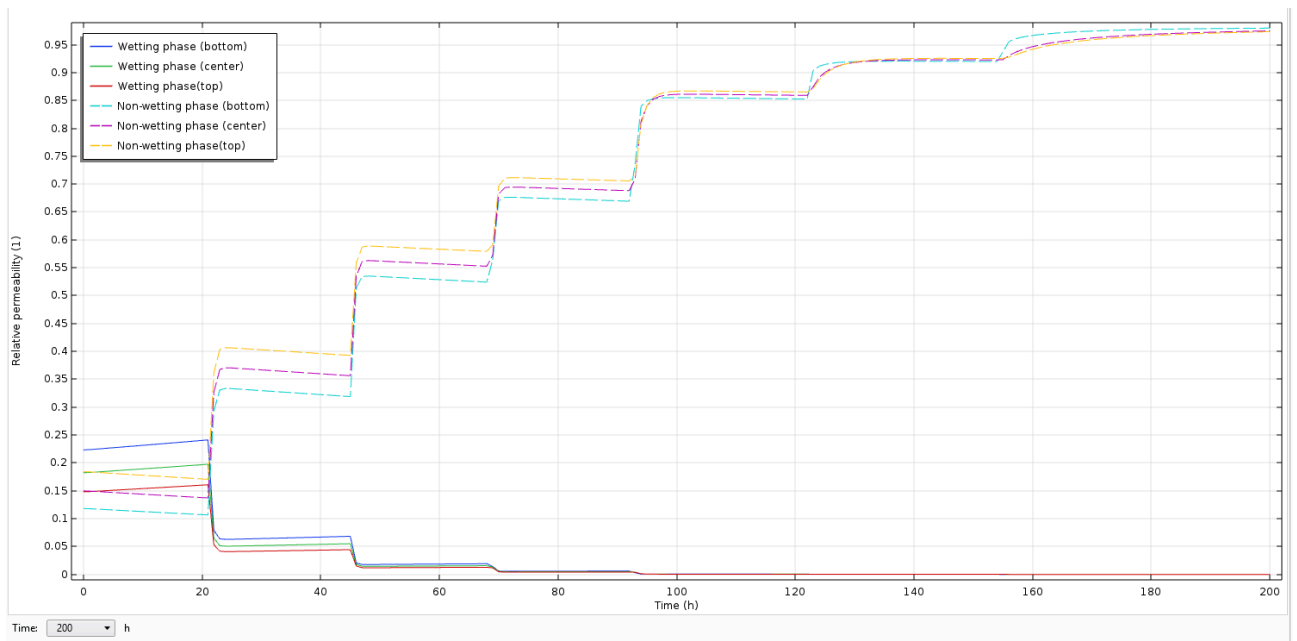
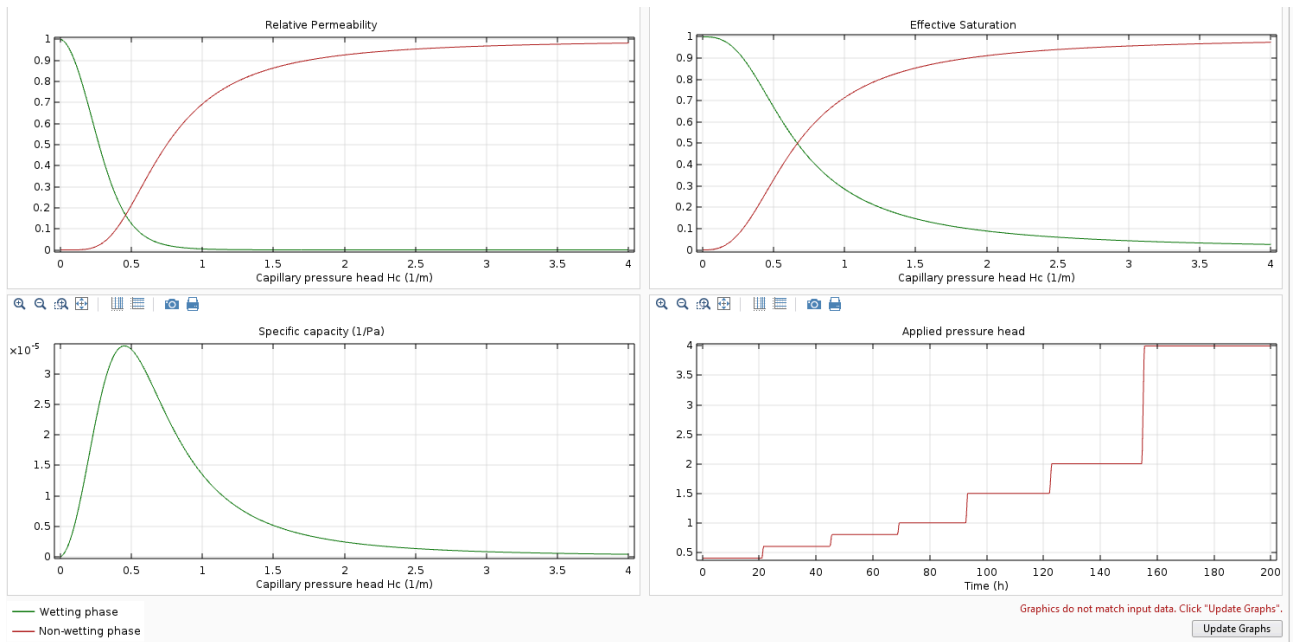


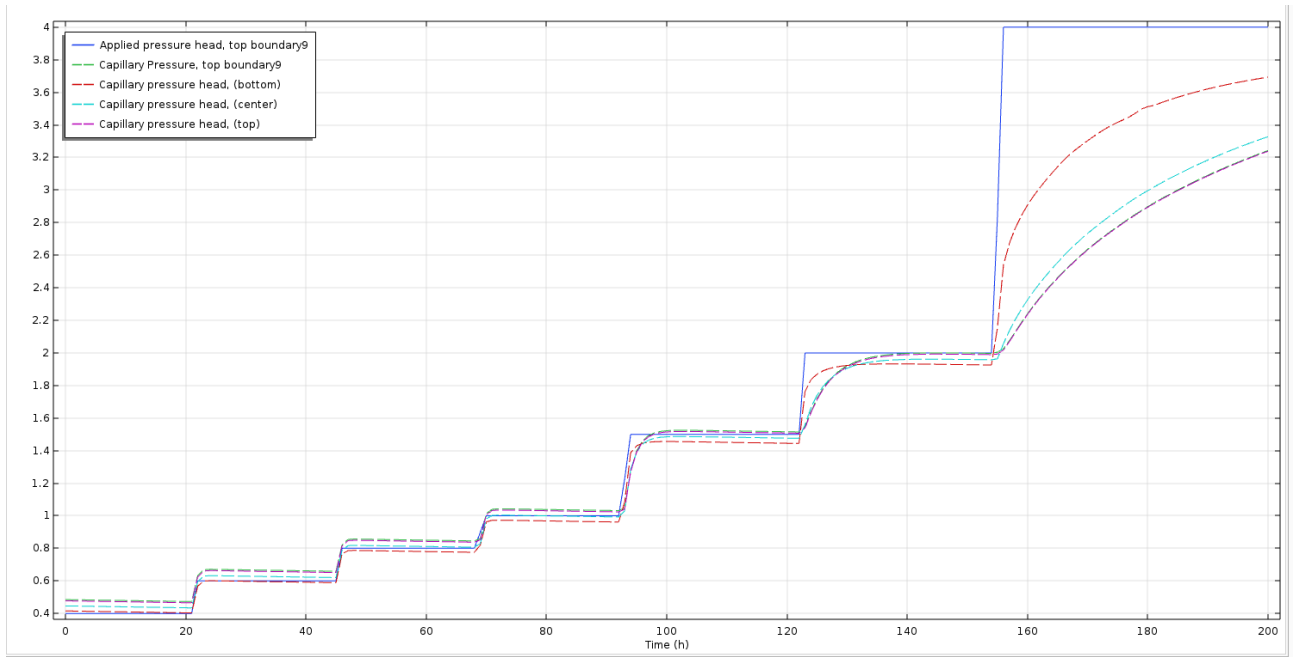


Проведемо чисельне моделювання середовища для змішування тоніку при значенні проникності 5000

<input type="radio"/> Lincoln soil	Porosity:	<input type="text" value="0.25"/>
<input type="radio"/> Columbia soil	Permeability:	<input type="text" value="5000"/> mD
<input checked="" type="radio"/> User-defined	Saturated volume fraction:	<input type="text" value="0.32"/>
	Residual volume fraction:	<input type="text" value="0.021"/>
Van Genuchten parameter:		
	$\alpha$	<input type="text" value="1.89"/> 1/m
	L	<input type="text" value="0.5"/>
	N	<input type="text" value="2.811"/>
	$M=1-1/N$	<input type="text" value="0.6443"/>

Результати розрахунку проникності представлено на графіках:





Висновок: провівши дослідження та проаналізувавши результати, можна зробити висновок про те, що зі зниженням значення проникності, відносна проникність незмочуваної фази верхньої та середньої знижується, а зі збільшенням проникності капілярний тиск підвищується.

**НАСИЧЕНА ОБ'ЄМНА ЧАСТКА** - це властивість пористих матеріалів або середовищ, яка визначає об'єм рідини або газу, який може бути поглинутий або утриманий цим матеріалом при повному насиченні. Вимірюється насичена об'ємна частка у відсотках або у відносних одиницях. Межі значень доступних для зміни насиченої об'ємної частки залежать від властивостей самого матеріалу або середовища, таких як порозробленість, розмір та форма пор, ступінь компактності, а також від умов експлуатації, таких як тиск та температура. Наприклад, для пористих порід насичена об'ємна частка може варіюватися від 0% до 100%, відображаючи різні рівні насичення рідиною або газом змішуваних речовин.

Relative Permeability - відносна проникність

Effective Saturation - ефективне насичення

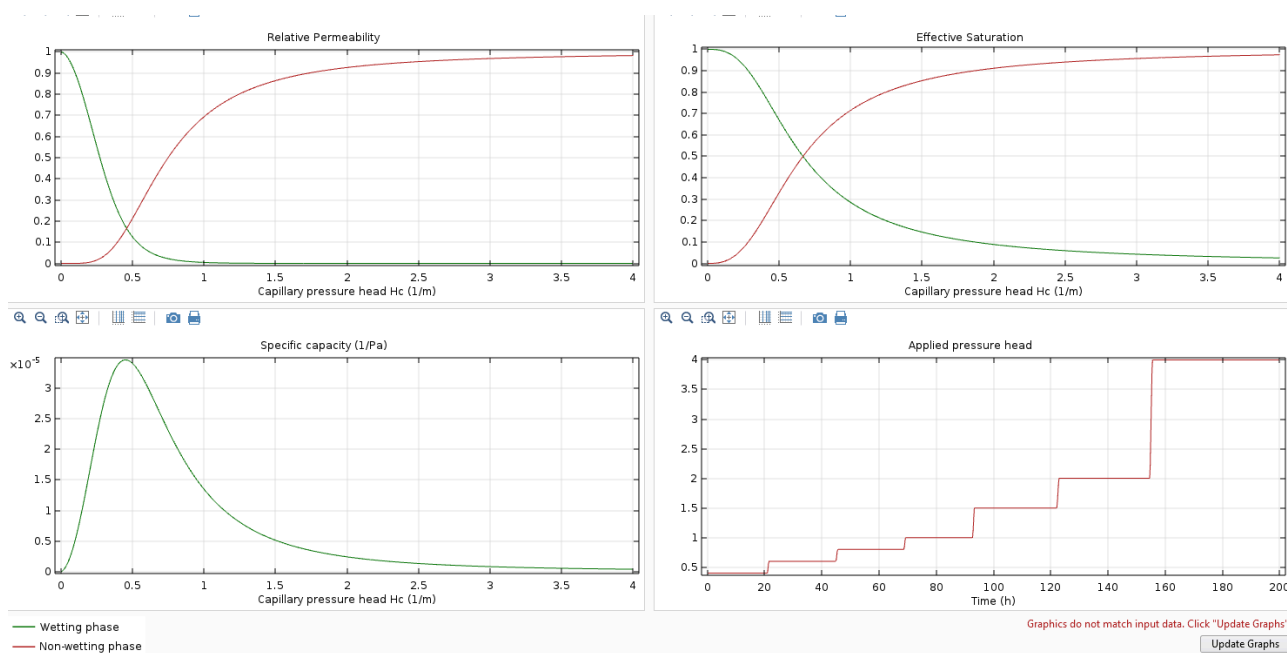
Specific capacity - питома ємність

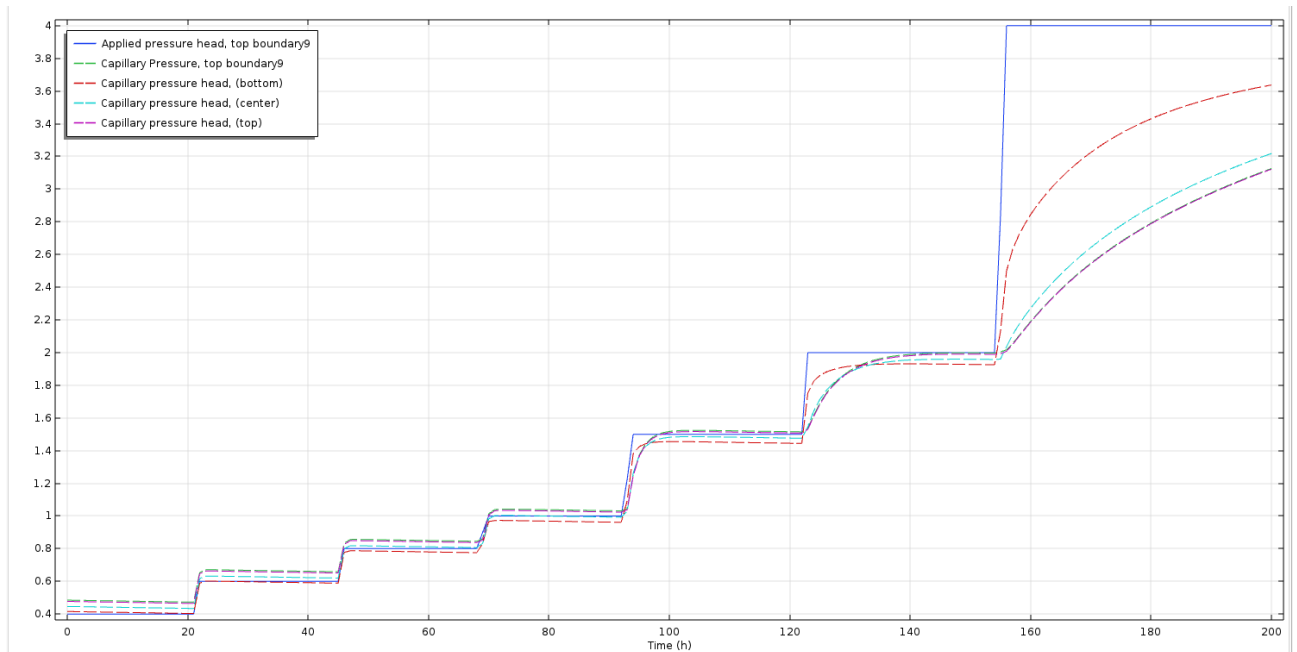
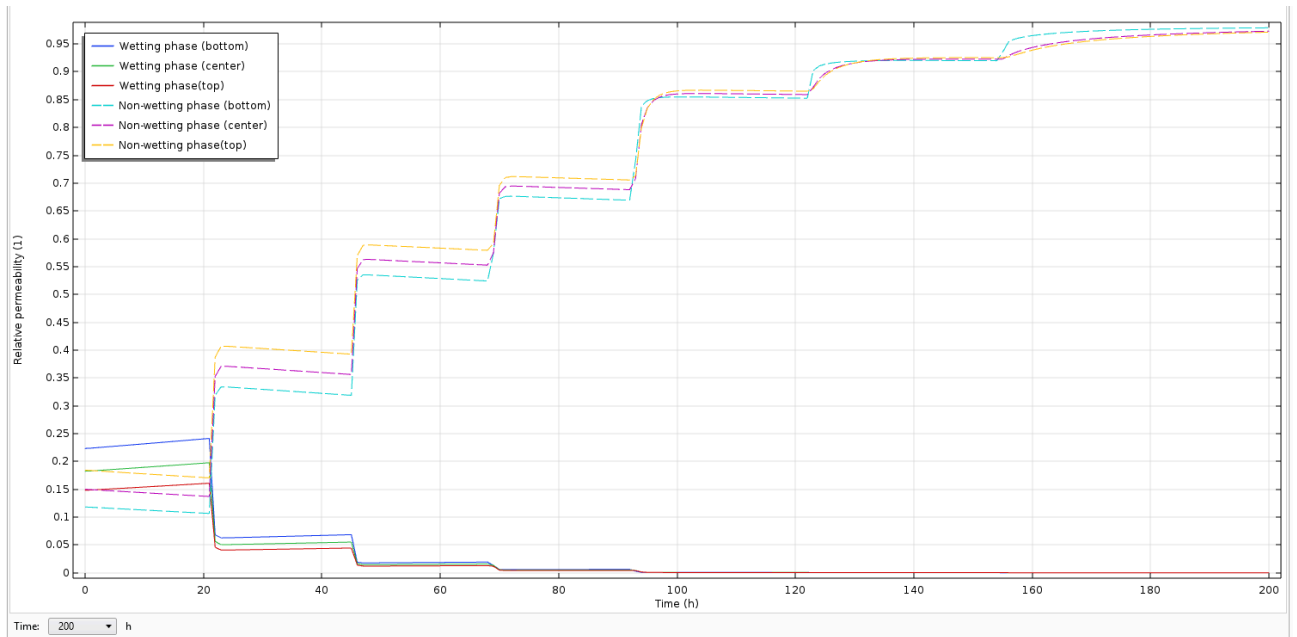
Applied pressure head - прикладний тиск

Проведемо чисельне моделювання середовища для змішування тоніку при значенні насиченої об'ємної частки 0,2

<input type="radio"/> Lincoln soil	Porosity:	<input type="text" value="0.25"/>
<input type="radio"/> Columbia soil	Permeability:	<input type="text" value="2480"/> mD
<input checked="" type="radio"/> User-defined	Saturated volume fraction:	<input type="text" value="0.2"/>
	Residual volume fraction:	<input type="text" value="0.021"/>
	Van Genuchten parameter:	
	$\alpha$	<input type="text" value="1.89"/> 1/m
	L	<input type="text" value="0.5"/>
	N	<input type="text" value="2.811"/>
	$M=1-1/N$	0.6443

Результати розрахунку насиченої об'ємної частки представлено на графіках:

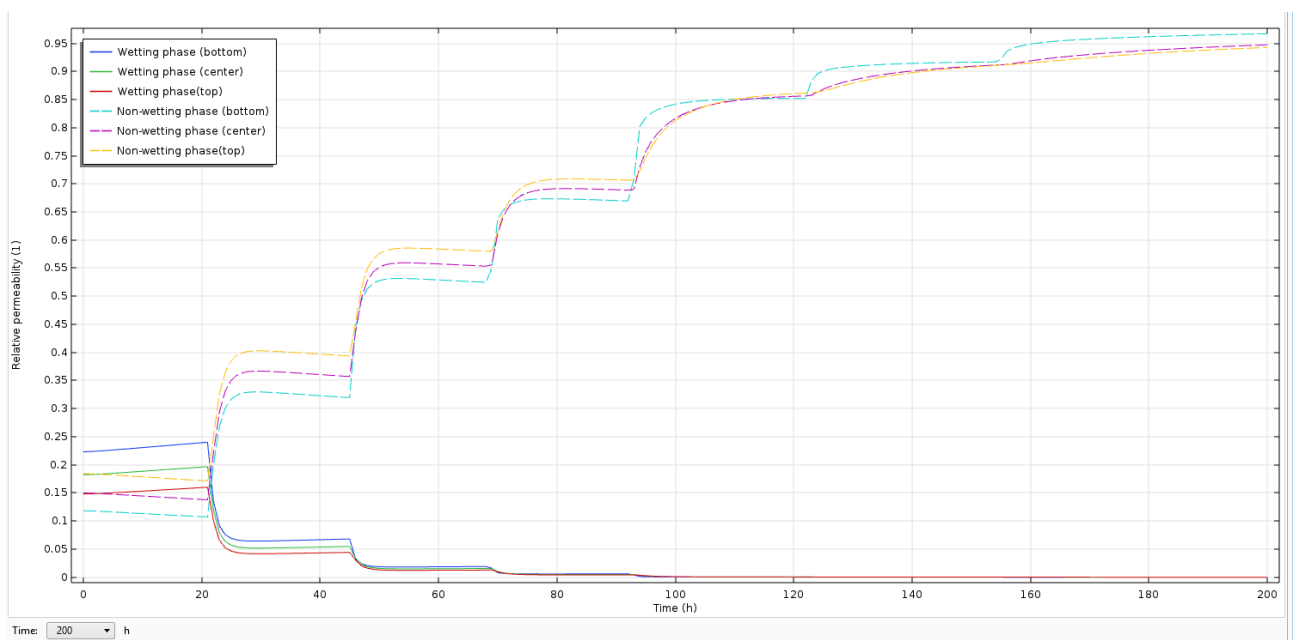
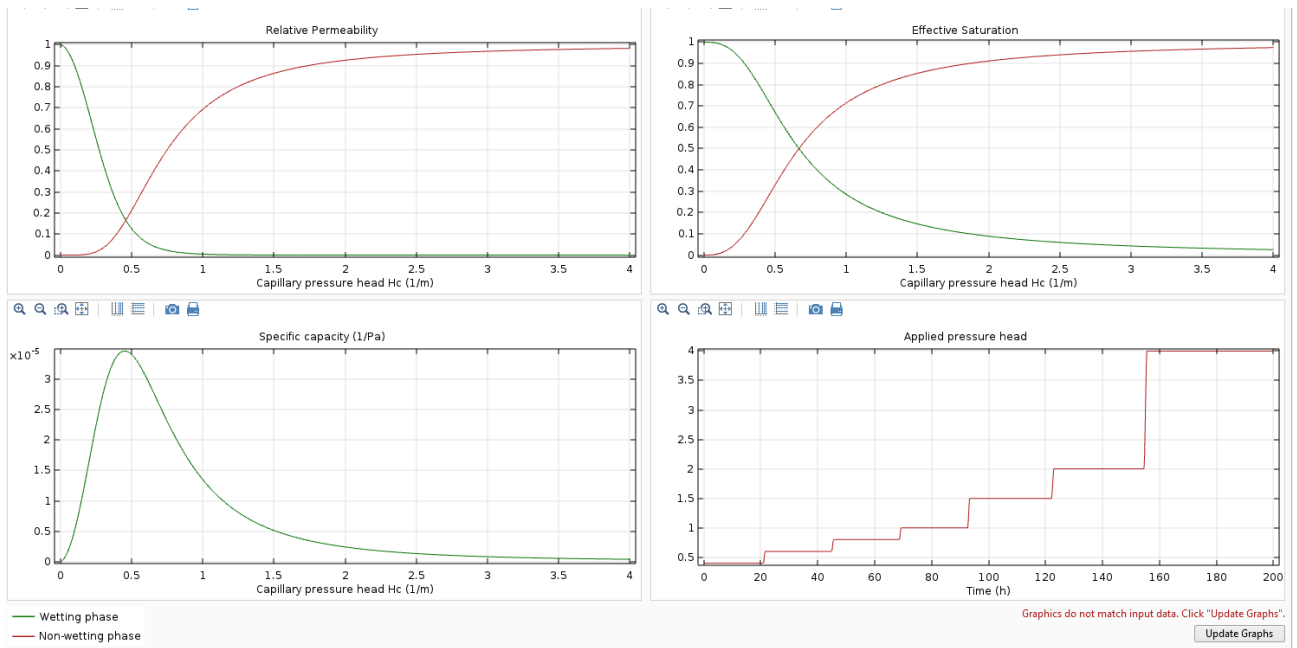


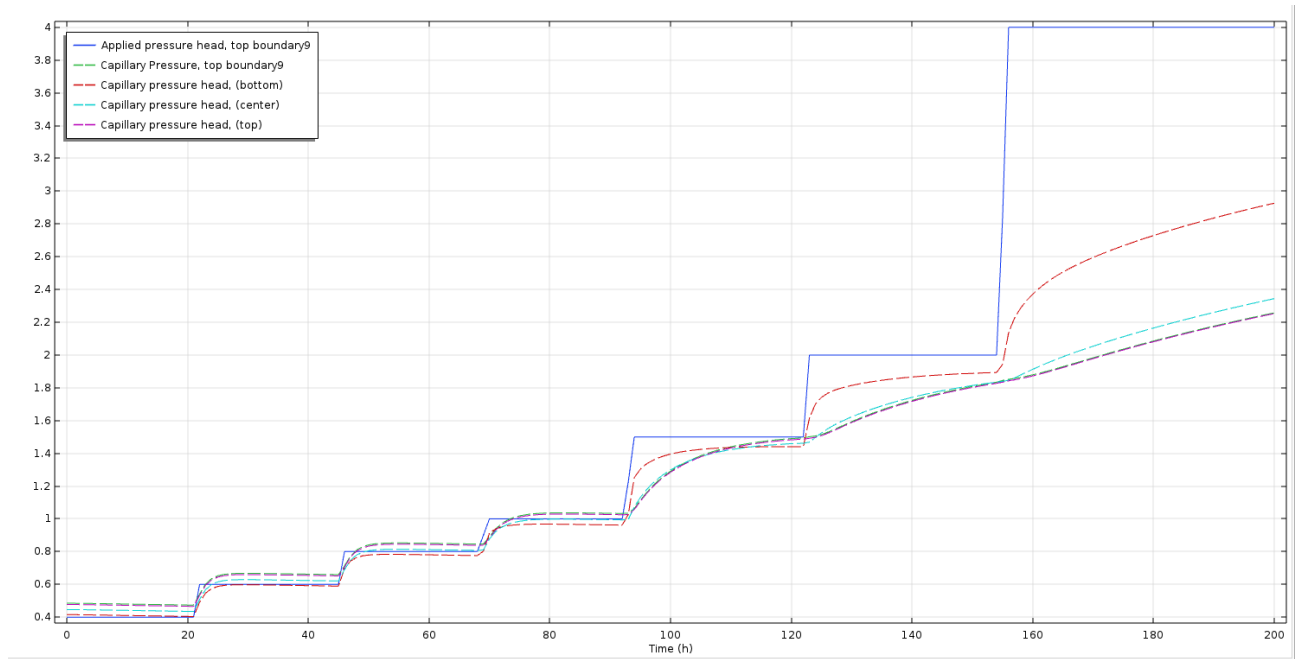


Проведемо чисельне моделювання середовища для змішування тоніку при значенні насиченої об'ємної частки 1

<input type="radio"/> Lincoln soil	Porosity:	<input type="text" value="0.25"/>
<input type="radio"/> Columbia soil	Permeability:	<input type="text" value="2480"/> mD
<input checked="" type="radio"/> User-defined	Saturated volume fraction:	<input type="text" value="1"/>
	Residual volume fraction:	<input type="text" value="0.021"/>
Van Genuchten parameter:		
	$\alpha$	<input type="text" value="1.89"/> 1/m
	L	<input type="text" value="0.5"/>
	N	<input type="text" value="2.811"/>
	M=1-1/N	<input type="text" value="0.6443"/>

Результати розрахунку насиченої об'ємної частки представлено на графіках:





Висновок: зі збільшенням насиченої об'ємної частки, незмочувана фаза (верхня і центральна) знижується, а капілярний тиск на всіх рівнях спадає.

**ЗАЛИШКОВА ОБ'ЄМНА ЧАСТКА** - це властивість пористих матеріалів або середовищ, яка визначає об'єм рідини або газу, який залишається у порах матеріалу після видалення надлишкового тиску чи після процесу відкачування. Ця властивість вимірюється відсотками або у відносних одиницях. Межі значень доступних для зміни залишкової об'ємної частки також залежать від властивостей самого матеріалу чи середовища. Вони можуть варіюватися від 0% (коли всі рідина або газ видалені) до 100% (коли рідина або газ повністю утримується у порах навіть після видалення надлишкового тиску). Залишкова об'ємна частка є важливою характеристикою для розуміння поведінки пористих матеріалів в умовах відкачування, нафтовидобутку, газовидобутку та інших процесів, де залучені пористі структури.

Relative Permeability - відносна проникність

Effective Saturation - ефективне насичення

Specific capacity - питома ємність

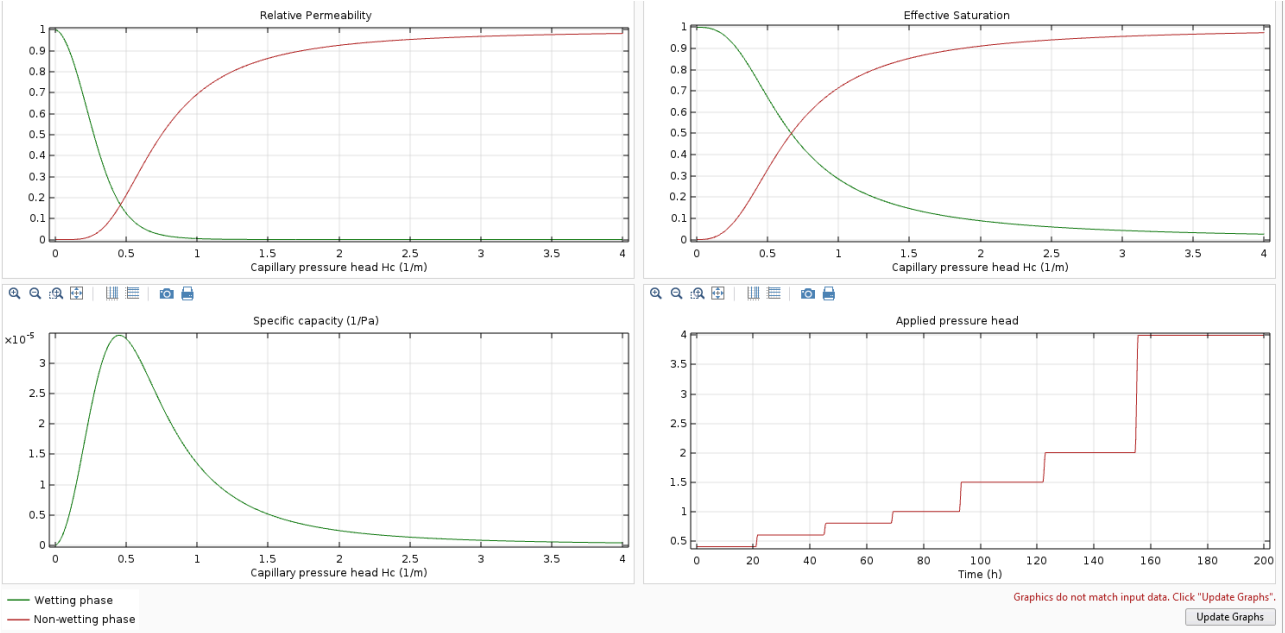
Applied pressure head - прикладний тиск

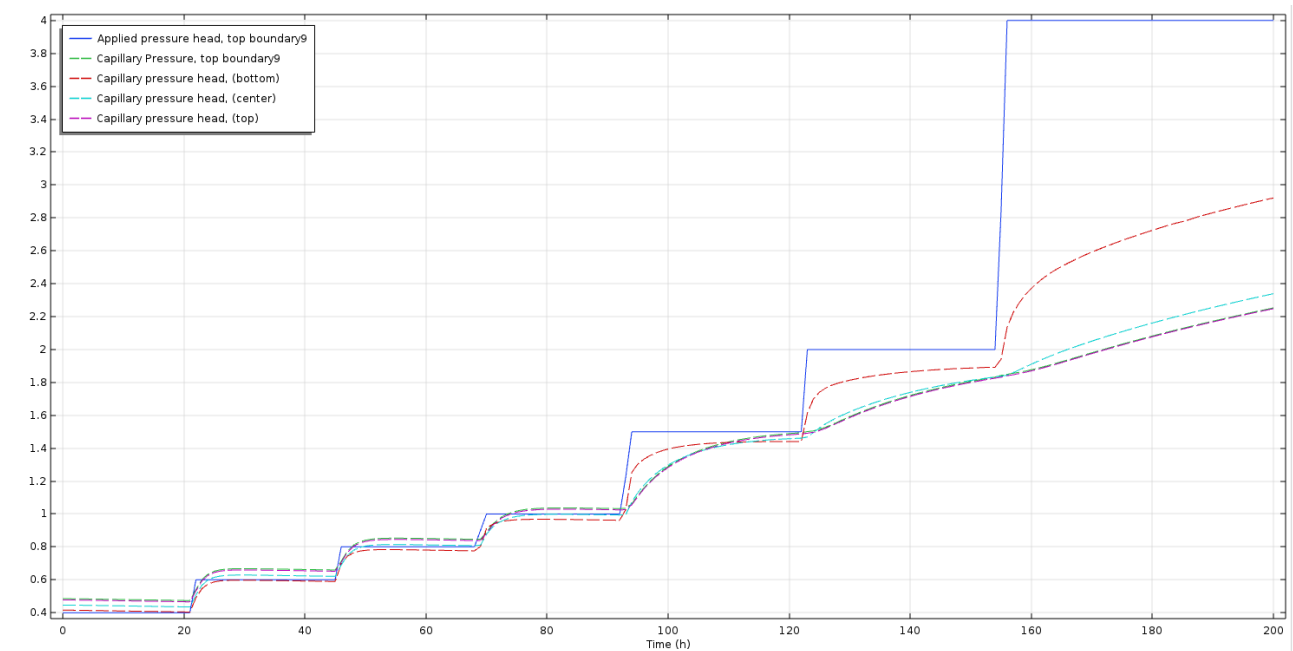
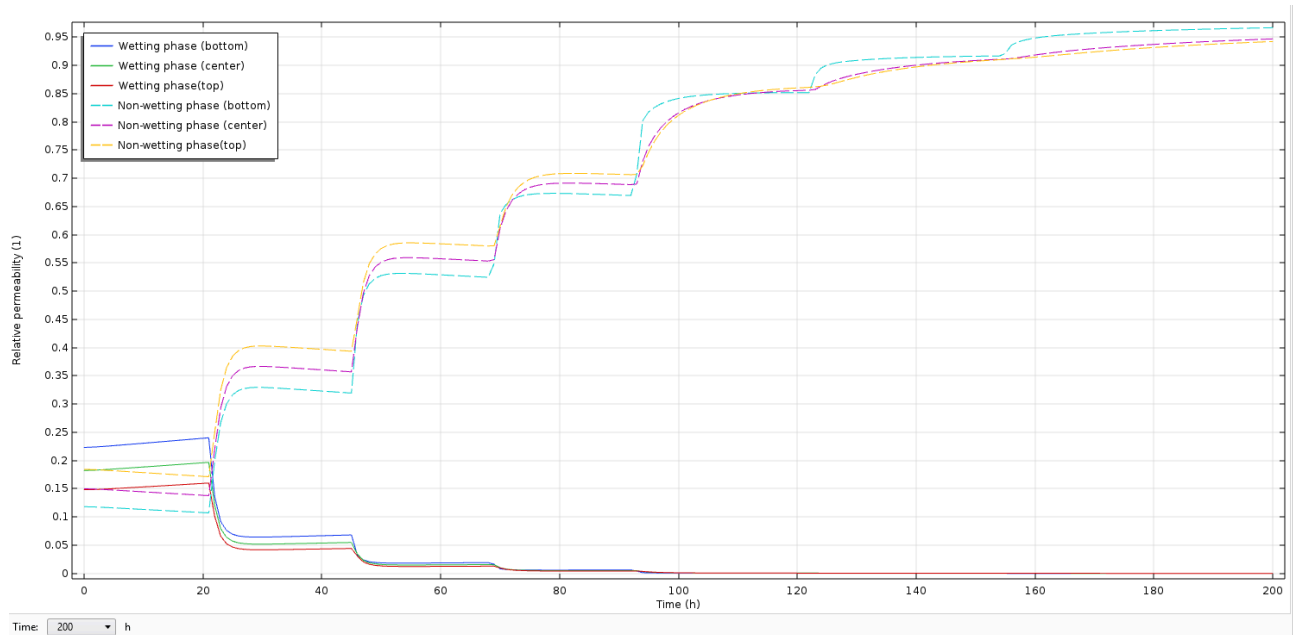
Проведемо чисельне моделювання середовища для змішування тоніку при значенні залишку об'ємної частки 0,01



<input type="radio"/> Lincoln soil	Porosity:	<input type="text" value="0.25"/>
<input type="radio"/> Columbia soil	Permeability:	<input type="text" value="2480"/> mD
<input checked="" type="radio"/> User-defined	Saturated volume fraction:	<input type="text" value="1"/>
	Residual volume fraction:	<input type="text" value="0.01"/>
Van Genuchten parameter:		
	$\alpha$	<input type="text" value="1.89"/> 1/m
	L	<input type="text" value="0.5"/>
	N	<input type="text" value="2.811"/>
	M=1-1/N	0.6443

Результати розрахунку залишку об'ємної частки представлено на графіках :

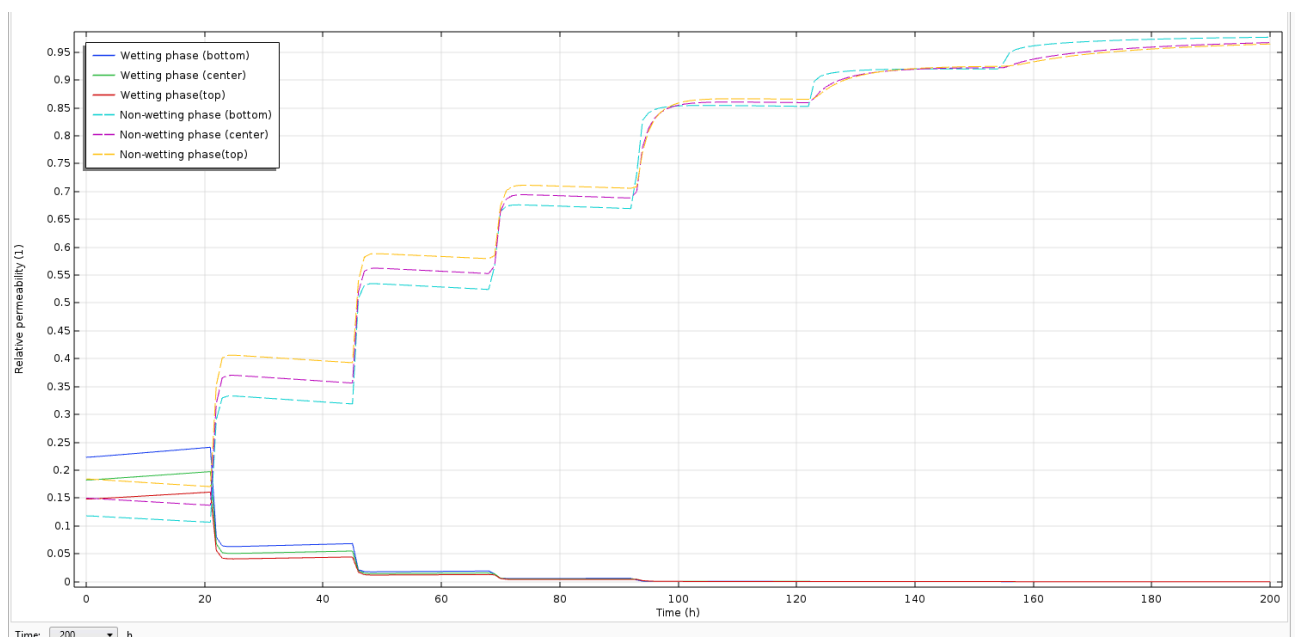
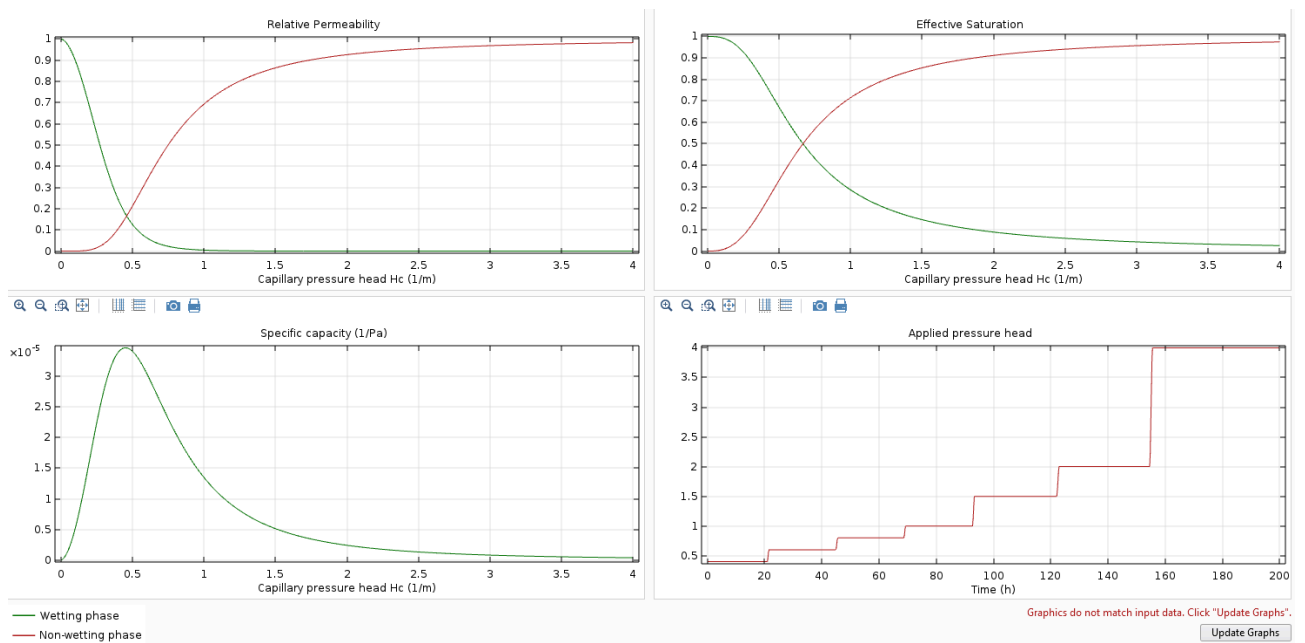


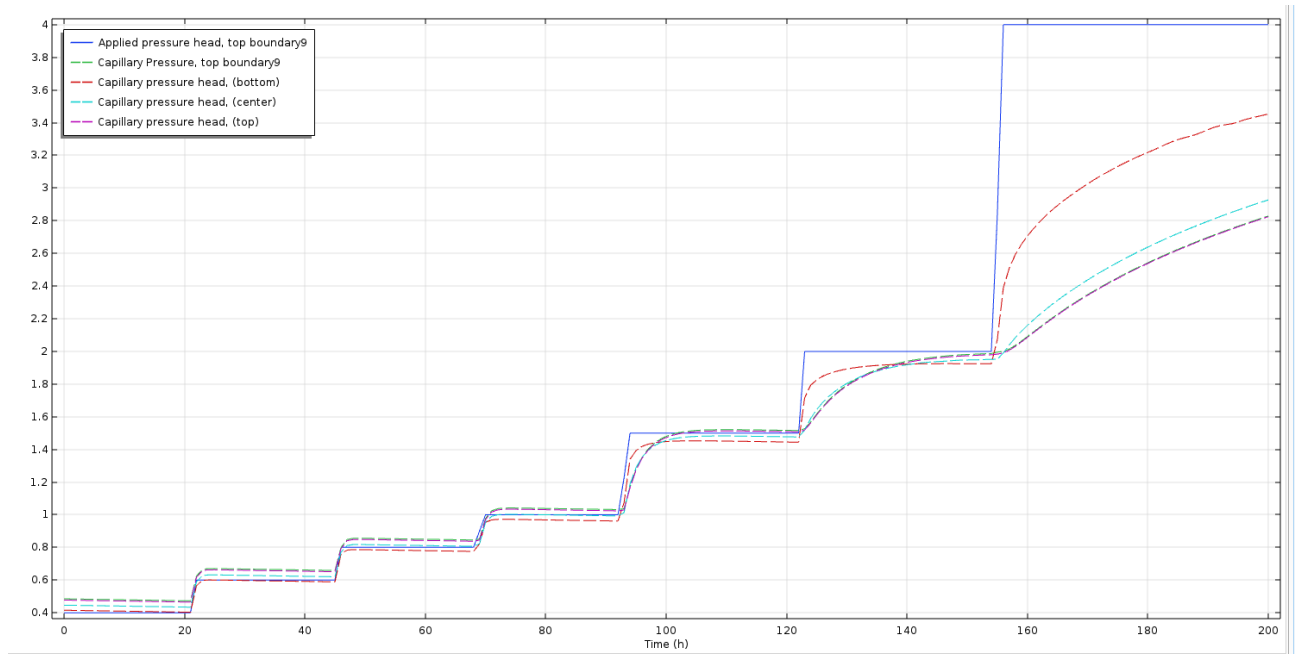


Проведемо чисельне моделювання середовища для змішування тоніку при значенні залишку об'ємної частки 0,7

<input type="radio"/> Lincoln soil	Porosity:	<input type="text" value="0.25"/>
<input type="radio"/> Columbia soil	Permeability:	<input type="text" value="2480"/> mD
<input checked="" type="radio"/> User-defined	Saturated volume fraction:	<input type="text" value="1"/>
	Residual volume fraction:	<input type="text" value="0.7"/>
Van Genuchten parameter:		
	$\alpha$	<input type="text" value="1.89"/> 1/m
	L	<input type="text" value="0.5"/>
	N	<input type="text" value="2.811"/>
	M=1-1/N	0.6443

Результати розрахунку залишку об'ємної частки представлено на графіках :





Висновок: зі зниженням залишкової об'ємної частки капілярний тиск спадає.

**Висновок** до розділу Чисельний експеримент: В результаті проведеного експерименту було обрано такі показники чисельного моделювання середовища для змішування тоніку пористість 0,25; проникність 5000; насичена об'ємна частка 0,2 ; залишок об'ємної частки 0,07. Вказаний підбір параметрів математичної моделі, дасть можливість досягнути належного змішування тоніку за 160 годин. Процес змішування косметичного тоніку важливий для забезпечення якісної продукції. Основні характеристики включають рівномірність змішування і розподілу інгредієнтів, стабільність формули, збереження активних компонентів та відсутність утворення грудочок чи осаду. Для забезпечення оптимального технологічного процесу змішування екологічно здорового косметичного тоніку важливо такі характеристики, як використання натуральних інгредієнтів, щоб мінімізувати негативний вплив на навколишнє середовище та здоров'я споживачів, ефективне використання ресурсів, щоб мінімізувати втрати, використання екологічно чистих технологій які мінімізують викиди забруднюючих речовин. Провівши аналіз , щодо значень які впливають на результат розподілу температури в реакторі, можна зробити висновок, що найоптимальнішого результату набуває реактор при максимальному значенні енергії активації.

## **ВИСНОВКИ:**

1. Зроблено аналіз наукової літератури, наукових публікацій щодо застосування, властивостей та особливостей змішування незмішуваних рідин. Визначено актуальні методи та проблеми змішування незмішуваних рідин у косметичній промисловості, для безпечності застосування для шкіри та навколишнього середовища, а саме змішування рідин у для створення екологічно здорового тоніку, який буде досконало очищувати обличчя, без вмісту спирту, агресивних та шкідливих речовин.

2. Вивчено властивості та особливості незмішуваних рідин, таких як олія у воді чи вода в олії. З основних це густини, поверхнева напруга, температура кипіння, точка замерзання, полярність, розчинність.

3. Вивчено використання об'єктів для моделювання середовищ для змішування незмішуваних рідин та основні характеристики процесу. Для цього можна використовувати мікросистеми змішування, що можуть включати мікроканали, мікросенсори або мікропомпи, що допомагають утворювати турбулентні потоки та забезпечують ефективне змішування, ультразвукові системи для створення турбулентності рідин, що полегшує їх змішування, механічні засоби змішування, це можуть бути мішалки, блендери, вібраційні платформи або інші механічні пристрої, які створюють турбулентні потоки та сприяють змішуванню рідин. Емульгатори та стабілізатори допомагають стабілізувати емульсії, таких як емульгатори та стабілізатори, може полегшити змішування незмішуваних рідин. Комп'ютерні програми для візуалізації та аналізу процесу змішування. Ці об'єкти та системи можуть бути використані окремо або у поєднанні з іншими методами для ефективного змішування незмішуваних рідин у різних дослідницьких, промислових та медичних застосуваннях.

4. Визначено перспективи використання методів моделювання середовищ та засобів для змішування. На теперішній час перспективним є використання мікропористих середовищ для змішування потоків незмішуваних речовин, що дає можливість зменшити розміри відповідних пристроїв, створити відносно недорогі, швидкі і ефективні методи виготовлення високоякісних фармацевтичних та косметичних продуктів.

5. Середовищем для проведення експерименту було обрано Comsol Multiphysics для математичного моделювання процесів. Було використано побудовану модель двофазного потоку у пористому середовищі з наявних бібліотек моделі доступних в навчальній версії програми.

6. Для забезпечення оптимального технологічного процесу змішування екологічно здорового тоніку, проведено чисельне моделювання доступних компонентів моделі. За допомогою програми комп'ютерного моделювання Comsol Multiphysics визначена як пористість, проникність, насичена об'ємна частка та залишкова об'ємна частка впливатиме на загальний показник змішування рідин, підбираючи різні показники середовища.

7. За результатами проведеного огляду було обрано такі показники чисельного моделювання середовища для змішування тоніку пористість 0,25; проникність 5000; насичена об'ємна частка 0,2 ; залишок об'ємної частки 0,7. Вказаний підбір параметрів математичної моделі, дасть можливість досягнути належного змішування тоніку за 160 годин. Слід зазначити проведений чисельний експеримент надасть можливість якісніше провести технологічну підготовку виробництва тоніку на підприємстві.

## СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Ткаченко С. Й. Самозакипаючі потоки в дренажних каналах теплотехнологічних систем /С. Й. Ткаченко, Н. д. Степанова — Вінниця: УНІВЕРСУМ-Вінниця, 2008. – 163 с.
2. Касімов, А. М. Залежність швидкості згущення дисперсної фази суспензії від властивостей двофазного потоку / А. М. Касімов, О. А. Атаманюк, О. М. Назаренко // Науковий вісник Івано-Франківського національного технічного університету нафти і газу. - 2009. - № 2. - С. 108-112.
3. Naidarov, V. H., Borovinskaya, E. S., Tomas, A., Holodniv, V. A., Reshetilovskii, V. P. (2013). Modelirovanie reakcii omyleniia etilacetata i izopropilacetata s uchetom hidrodinamiki i trohmernoy modeli reaktora v Ansys Fluent [Simulation of the saponification reaction of ethyl acetate and isopropyl acetate, considering hydrodynamics and three dimensional model of reactor in Ansys Fluent]. Proceedings of the St. Petersburg State Technological Institute (technical university), 44, 93–96.
4. Корнієнко Б.Я. Особливості моделювання процесів переносу в дисперсних системах / Б.Я. Корнієнко // Вісн. Нац. техн. ун-ту України «Київ. політехн. ін-т». Сер. Хімічна інженерія, екологія та ресурсозбереження. – 2011. - No 2 (8). - С. 5-9.
5. J.W. Normans, M.E. Grismer, J. Chen, and Y.P. Liu, Parameter Estimation of Two-fluid Capillary Pressure Saturation and Permeability Functions, U.S. Environmental Protection Agency EPA/600/R-98/046, Cincinnati, Ohio, 1998.
6. Rogankov V.B. Suprun N.P., Shvets M.V., Shchutska A.V. About correlation between the percolation rate of moisture through the semi-permeable membranes and the standard measurements of their permeability or evaporative resistance. Refrigeration Engineering and Technology.- 2015.-№ 51 (1).- С. 47-54
8. Момот Р.А., Шамоля В.Г. До питання про комп'ютерну модель та комп'ютерне моделювання. Інформаційні технології в професійній діяльності : матеріали XIV Всеукраїнської науково-практичної конференції. Рівне: РВВ РДГУ. 2021. С. 134 – 135.

9. Кравченко І.В., Микитенко В.І., Тимчик Г.С. Комп'ютерне моделювання: системи і процеси. Київ: НТУ КПІ імені Ігоря Сікорського, 2022
10. M. A. M. Hashim and S. S. Sabirin, "A Neural Network-based Adaptive Assessment System for Mathematics Learning," in 2019 6th International Conference on Research and Innovation in Information Systems (ICRIIS), Kuala Lumpur, Malaysia, 2019, pp. 1-6.
11. T. Gholizadeh, M. Vajdi, H. Rostamzadeh, A new trigeneration system for power, cooling, and freshwater production driven by a flash-binary geothermal heat source, *Renewable Energy* 148 (2020) 31-43.
12. R.S. Jakati, K.B. Balavalad, B.G. Sheeparamatti, Comparative analysis of different micro-pressure sensors using comsol multiphysics, in: 2016 Int. Conf. Electr. Electron. Commun. Comput. Optim. Tech., IEEE, 2016: pp. 355–360.
13. M. Vajdi, F.S. Moghanlou, F. Sharifianjazi, M.S. Asl, M. Shokouhimehr, A review on the Comsol Multiphysics studies of heat transfer in advanced ceramics, *Journal of Composites and Compounds* 2(2) (2020) 35-43.
14. P. Wang, K. Vafai, D.Y. Liu, Analysis of radiative effect under local thermal non-equilibrium conditions in porous media-application to a solar air receiver, *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications* 65(10) (2014) 931-948.
15. COMSOL33\doc, Contact and Friction Models : 2D Cylinder Roller Contact
16. Graupner, B.J.; Shao, H.; Wang, X.R.; Nguyen, T.S.; Li, Z.; Rutqvist, J.; Chen, F.; Birkholzer, J.; Wang, W.; Kolditz, O.; et al. Comparative modelling of the coupled thermal–hydraulic-mechanical (THM) processes in a heated bentonite pellet column with hydration. *Environ. Earth Sci.* 2018, 77, 84. [[Google Scholar](#)] [[CrossRef](#)] [[Green Version](#)]
17. Dagher, E.E.; Sedano, J.A.I.; Nguyen, T.S. A Mathematical Model of Gas and Water Flow in a Swelling Geomaterial—Part 2. Process Simulation. *Minerals* 2019, 10, 32. [[Google Scholar](#)] [[CrossRef](#)] [[Green Version](#)]
18. Dagher, E.E.; Sedano, J.A.I.; Nguyen, T.S. A Mathematical Model of Gas and Water Flow in a Swelling Geomaterial—Part 1. Verification with Analytical Solution. *Minerals* 2019, 10, 30. [[Google Scholar](#)] [[CrossRef](#)] [[Green Version](#)]
19. L. Berg, A.S. Verdugo, C. Hochenauer, R. Scharler, A.A. Couce



Evaluation of heat transfer models at various fluidization velocities for biomass pyrolysis conducted in a bubbling fluidized bed *Int. J. Heat Mass Tran.*, 160 (2020), p. 120175, [10.1016/j.ijheatmasstransfer.2020.120175](https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2020.120175)

20. Gerke HH, van Genuchten MT. Evaluation of a first-order water transfer term for variably saturated dual-porosity flow models. *Water Resour Res* 1993;29(4):1225-1238.

21. COMSOL Multiphysics User's Guide (2017) Version 5.3. COMSO LAB, Stockholm COMSOL AB. (2024). COMSOL Multiphysics User's Guide.

23. Edelvik, S. D. Gossellin, A. F. Massetti, & J. Lindblad. (2016). COMSOL Multiphysics Modeling Guidelines. COMSOL.

24. T. G. Myers, D. S. Yee, & J. H. A. Miller. (2017). Introduction to Finite Element Analysis Using COMSOL 5.3. SDC Publications.

25. J. K. Kreider, L. L. Glicksman, & S. M. Gadgil. (2015). Principles of Heat Transfer in Porous Media Using COMSOL Multiphysics 5.2. CRC Press.

26. J. M. Hill, K. J. Lage, & M. F. Edwards. (2014). Multiphysics Modeling Using COMSOL: A First Principles Approach. Jones & Bartlett Learning.

27. P. J. Lewandowski, K. A. Reinhardt, & D. L. Henderson. (2020). Modeling Chemical Engineering Processes with COMSOL Multiphysics. Wiley

28. Blunt, M. J. (2017). Multiphase Flow in Permeable Media: A Pore-Scale Perspective. Cambridge University Press.

29. Anderson, D. M., & McWorther, D. B. (2015). Permeability and Seepage. CRC Press.

30. D. Marchesin, M. Santos, and J. C. T. Oliveira, "Recent advances and open challenges in the simulation of two-phase flow in porous media," *Advances in Water Resources*, vol. 149, p. 103835, 2021.

31. M. J. Blunt, "Flow in porous media—pore-network models and multiphase flow," *Current Opinion in Colloid & Interface Science*, vol. 38, pp. 51-57, 2018.

32. Y. Mualem, "A new model for predicting the hydraulic permeability of unsaturated porous media", *Water Res. Research*, vol. 12, pp. 513–522, 1976.

33. M.Th. van Genuchten, "A closed-form equation for predicting the hydraulic of

conductivity of unsaturated soils”, *Soil Sci. Soc. Am. J.*, vol. 44, pp. 892–898, 1980.