

**Авторска справка
на научните приноси**
на гл. ас. д-р Милена Ганчева Димова,
ИМИ-БАН

Пълният списък на научните публикации включва общо 23 заглавия, от които 10 са в издания с импакт фактор.

За участие в конкурса са представени 12 публикации като от тях:

- 4 публикации в международни научни периодични списания с импакт фактор;
- 7 публикации в реферирани международни поредици на Springer и American Institute of Physics;
- 1 публикация в рефриран сборник на международна конференция.

От представените 12 публикации 11 са излезли от печат, а една е приета за печат. Никоя от представените публикации не е използвана в дисертационния труд за получаване на образователната и научна степен “Доктор”.

Две от публикациите, [11] и [12], (виж приложение „Публикации за конкурса.pdf”) са излезли от печат преди заемане на длъжността гл. асистент/н.с. I ст. (16.03.2001г.). Никоя от представените за конкурса публикации, обаче, не е използвана в предходен конкурс.

Приносите на кандидата се отнасят към научната област 01.01.13 – Математическо моделиране и приложение на математиката и включват разработване на ефективни числени методи, алгоритми и научен софтуер за решаване на нелинейни и спектрални задачи. Конструиранияте методи и алгоритми използват различни варианти за дискретизация (методи на крайните елементи и крайните разлики), техники за линеаризация, ефективни итерационни методи, оценки на грешката. В някои от случаите численият анализ е съпътстван от аналитично изследване на задачите за разрешимост, единственост, асимптотично поведение на решението.

Представените за конкурса 12 научни публикации могат да бъдат разделени в следните 3 групи:

- I. Числен и теоретичен анализ на решенията на обобщеното уравнение на Бусинеск.
- II. Числен анализ на нелинейни топлинни структури.
- III. Числени методи за нелинейни и спектрални задачи в областта на хидродинамиката и квантовата механика.

I. Числен и теоретичен анализ на решенията на обобщеното уравнение на Бусинеск

Публикации [2,4,5,6,7] са посветени на численото и аналитично изследване на решенията на обобщеното уравнение на Бусинеск, наречено парадигматично уравнение на Бусинеск (Boussinesq Paradigm Equation, BPE). Обобщените вълнови уравнения от типа на Бусинеск описват сложни нелинейни процеси, включващи разпространение на вълни с малка амплитуда в плитки води, вълни в деформируеми кристали, надлъжни вълни в еластичен прът, вълни в диелектрици с нелинейна поляризация и др.

Особеностите на ВРЕ са наличието на нелинеен член (най-често полином относно неизвестната функция) и балансираща дисперсна линейна част, съдържаща производни на решението от четвърти ред по пространствените променливи и смесени четвърти производни по пространствено-времените променливи. Качественото поведение на решенията на обобщеното уравнение на Бусинеск се определя от баланса между нелинейността и дисперсните линейни членове. При доминираща роля на нелинейния член се наблюдават нелинейни ефекти на избухване на амплитудата на решението за крайно време, докато при доминация на дисперсията – решенията са глобално определени във времето. Липсата на достатъчни теоретични резултати към настоящия момент, особено в двумерния случай, налага разработване и прилагане на различни числени подходи за изследване.

Публикации [2,5,6] са посветени на числения анализ на решенията на обобщеното уравнение на Бусинеск. В [5] теоретично са изследвани от Н. Колковска консервативни диференчни схеми за многомерното уравнение, получени вследствие на различна апроксимация на нелинейния член. Доказано е локалното съществуване на численото решение, а също така втори ред на сходимост на численото към точното решение в дискретна норма по пространствените и времевата променливи. Показано е, че при гладко решение (ограничена 2-ра производна) една от предложените апроксимации на нелинейния член води до по-малка грешка на дискретното решение в сравнение с другите разгледани апроксимации. На основата на тези неявни диференчни схеми в [2,6] е предложена факторизирана диференчна схема за двумерното ВРЕ. Основното предимство на факторизираната задача е редуцирането \square до последователност от три по-прости диференчни задачи при подходящи гранични условия. Диференчните оператори в две от задачите зависят само от една пространствена променлива (едномерни по отношение на пространствените променливи), а третата задача е стандартна двумерна елиптична задача с дискретен Лапласиан. За линеаризиране на схемата е приложен методът на последователните (вътрешни) итерации. Формулираният числен подход води до решаване на всяка стъпка по времето на петдиагонални системи линейни алгебрични уравнения. За целта са използвани модификация на метода на Гаус с избор на главен елемент (тип „прогонка”) (за едномерните дискретни задачи по съответните координатни направления) и модификация на метода на спрегнатия градиент с преобуславяне за дискретен Лапласиан.

Видът на факторизирания оператор обуславя необходимостта от първоначално изследване на диференчните схеми в едномерния случай. В [5,6] са представени резултатите от численото изследване на едномерната задача със степенна нелинейност. В [5] са сравнени три семейства диференчни схеми, получени вследствие на различна апроксимация на нелинейния член. Основната цел на проведения числен анализ е изследване на сходимостта, точността на схемите, както и свойството на консервативните схеми да запазват енергията. Реализирани са числени тестове за два основни модела: разпространение на един солитон (в този случай съществува точно решение) и взаимодействие на два солитона. Числените експерименти потвърждават теоретичните резултати за втори ред на сходимост относно времето и пространството. Дискретният енергетичен функционал се запазва във времето с висока точност и от двете консервативни схеми (например при $h=\tau=0.05$ въведената относителна енергетична грешка е 10^{-10}). Проведените числени експерименти за едномерното уравнение на Бусинеск с квадратична [6] и кубична нелинейност [5] показват предимството на една от предложените консервативни схеми, а именно фактът, че е два пъти по-точна от другата. Резултатите от проведените числени тестове в едномерния

случай демонстриратат висока надежност на числените схеми и гарантират ефективността при прилагането им в двумерния случай.

Резултатите от числената реализация на факторизираната схема в двумерния случай са представени в [2]. Числено е изследвано както уравнение с квадратична нелинейност, така и с нелинейност, включваща трета и пета степен на неизвестната функция. Проведени са многобройни числени експерименти за изследване на поведението във времето на двумерни “солитоноподобни” структури, които са решения на стационарното уравнение и са конструирани чрез метода на пертурбациите, спектралния метод на Галеркин и др. В [2] числените резултати са сравнени с тези, получени при прилагане на друг подход за решаване на задачата (предложен и реализиран от Д. Василева), а именно – свеждане на изходното уравнение от четвърти ред до система от хиперболично и елиптично уравнение от втори ред и последващо прилагане на неявни диференчни схеми. Наблюдава се много добро съвпадение на числените резултати, получени по двата подхода. Този факт е добра илюстрация за надежността на двата числени подхода. В случая на квадратична нелинейност се потвърждават резултатите за неустойчивост на изследваните двумерни структури от тип солитон. За малки времена те запазват своята форма, но за по-големи времена се трансформират в затихващи вълни или избухват в зависимост от зададените параметри. В [2] за първи път са представени числени резултати за задачата на Бусинеск с нелинейност –линейна комбинация на третата и пета степен на неизвестната функция. Числените експериментите показват, че структурите в този случай са неустойчиви и се трансформират в затихващи вълни. За разлика от случая с квадратична нелинейност, тук не се наблюдава избухване на решението.

Публикации [4,7] са посветени на изучаване качествено поведение на решенията на задачата на Коши за многомерното обобщено уравнение на Бусинеск със степенна нелинейност. Техниката на изследване се базира на метода на потенциалните ями, включваща въвеждане на функционали на Нехари, „потенциални ями”, за които решенията имат различно качествено поведение, както и тяхната вакуумна изолация чрез многообразието на Нехари. С използването на същата техника, в [7] е намерена константа, такава че при начална енергия по-малка или равна на тази константа (субкритична енергия), знакът на функционала на Нехари определя глобалната разрешимост или избухване за крайно време на решенията на задачата на Коши. Тази константа, наречена критична енергитична константа, зависи единствено от константите в теоремите за влагане на пространствата на Соболев и константите, определящи вида на нелинейния член в уравнението. Енергитичната критична константа е получена в явен вид, а в едномерния случай е пресметната точно. Знанието на тази константа позволява пълно описание на свойствата на решенията на уравнението на Бусинеск със субкритична начална енергия и е изключително важна за теоретичното и числено изследване на задачата.

Числени експерименти, демонстриращи валидността на теоремата за глобална разрешимост или избухване на решението за крайно време при субкритична начална енергия са реализирани в едномерния случай. В [7] е разгледана задача с квадратична нелинейност, а в [4] - с кубична. За численото решаване са използвани разработените в [5,6] консервативни числени схеми.

В [7], като приложение на намерената в едномерния случай критична енергитична константа, е доказана нелинейна устойчивост на солитони със субкритична енергия. За първи път числено са намерени интервалите на скоростта на солитонните вълни, за които в случай, че началните данни са близки до профила на солитонна вълна с такава скорост, то решението е глобално дефинирано и ограничено.

При суперкритична начална енергия в [4,7] са проведени и други числени експерименти, чиято цел е да подсказват нови идеи за условията върху началните данни, определящи вида на решението. В едномерния случай за квадратична и кубична нелинейност числено е демонстрирано различното поведение на решението на задачата на Коши при суперкритична начална енергия и при начални данни, различаващи се само по знака на началната скорост. Тези резултати показват значимостта на началната скорост за поведението на решението.

Ето защо в [4] е дефиниран нов функционал на Нехари, зависещ не само от профила на решението, но и от неговата скорост. Намерени са условия, при които този функционал запазва знака си през целия период на еволюцията на решението във времето. Посредством този нов функционал на Нехари е доказано глобално съществуване на задачата на Коши при суперкритична начална енергия и при някои допълнителни условия за началните данни. Като един предварителен резултат, в случая на квадратична нелинейност и $n=1$ е предложена идея за избор на начални данни, удовлетворяващи тези допълнителни условия.

II. Числен анализ на нелинейни топлинни структури

Публикации [1,3,8] са посветени на числената реализация и анализ на нови класове решения на нелинейното уравнение на топлопроводността с коефициент на топлопроводност и източник - степенни функции на температурата. За целта е разработен числен подход, включващ числени методи за решаване както на нелинейна елиптична (автомоделна) задача, така и на нелинейна параболична задача, изследваща еволюцията във времето на решенията на автомобилната задача.

Основният принос на кандидатата в разглежданите публикации [1,3,8] се състои в разработването на ефективни и надежни изчислителни схеми за решаване на нелинейната автомобилна задача - по същество - гранична задача за нелинейно елиптично уравнение (или обикновено уравнение в радиално - симетричния случай).

За получаването на нови класове автомобилни решения на нелинейното уравнение на топлопроводност от изключителна важност е намирането на решения с различна структура на съответната автомобилна задача. Решенията на автомобилната задача наричаме автомобилни функции. Тези функции определят пространствено-времевата структура на съответния клас автомобилни решения и поради това са известни в литературата и като “собствени функции на горене”.

Неединствеността на решението при едни и същи стойности на параметрите на средата е основното предизвикателство при решаване на автомобилната задача. Затова за да бъдат намерени радиално-несиметрични решения (например решения със сложна структура [1] или “спирална” структура [8,3]) трябва да се решат следните подзадачи: намиране на “подходящи” начални приближения към всяко едно от решенията, т.е. начални приближения, имащи подходящата структура; провеждане на асимптотичен анализ за получаване на гранични условия, гарантиращи сходимост към решение с “желаната структура” (да отбележим, че стандартни гранични условия от тип Дирихле или Нойман с нулева дясна част водят до получаване само на радиално-симетрични решения); конструиране на итерационен процес, бързо сходящ към съответните решения и осигуряващ достатъчна точност.

Предложеният итерационен процес се базира на прилагане на непрекъснатия аналог на метода на Нютон (НАМН) и последваща дискретизация на слабата форма на еволюционната му задача с метода на крайните елементи. Използвани са билинейни крайни елементи (линейни и квадратични в радиално-симетричния случай). На всяка стъпка от итерационния процес се получава система линейни алгебрични уравнения с

несиметрични лентови матрици. За решаването им се използва пряк метод LU-разлагане, като матриците се съхраняват в sky-line формат. За установяване точността на разработените изчислителни схеми са проведени числени експерименти върху последователност от вложени мрежи, като чрез правилото на Runge е получен оптимален ред на точност за съответните крайни елементи.

В [1,8] са изследвани автомоделните функции, съответстващи на един специален специален клас избухващи автомоделни решения, получен с помощта на инвариантно-груповия анализ. При еволюция във времето в зависимост от съотношението на параметрите на средата, както и на параметър, характерен за дадения клас автомоделни решения, нехомогенностите на тези решения (например локални максимуми) се движат по логаритмични спирали или окръжности.

Основната ключова идея, довела до получаване за първи път на автомоделни функции със сложна структура [1] и “спирална” структура [8], е идеята за смяна на граничното условие на безкрайност. Предполага се, че автомоделните функции осцилират около нулевото константно решение и на безкрайност клонят към него. Поради това начални приближения се търсят като частни решения на линейното уравнение, получено при линеаризация около ненулевото константно решение. В зависимост от параметрите на средата са получени частни решения с различна структура. Например в [1] числено са реализирани и изследвани двумерни радиално - симетрични и двумерни автомоделни функции със сложна структура (радиално-несиметрични) в S режим. В този случай началните приближения се изразяват чрез функции на Бесел от първи род и на базата на асимптотичен анализ на линейните приближения е получено гранично условие от 3 род, с което задачата напълно се дефинира в крайна област.

Публикация [8] е посветена на детайлния числен анализ на двумерни автомоделни функции със “спирална” структура в HS режим. За получаването на решения с такава структура са използвани начални приближения, изразени чрез изродената хипергеометрична функция. Разработени са точни, бързи и надеждни алгоритми за пресмятането на изродената хипергеометрична функция за голям диапазон на изменение на параметрите в комплексната равнина и на променлива, базирани на различни методи - Тейлорови редици, асимптотични разлагания, развитие във възходящи редове по полиноми на Чебишев и др. Детайлно е изследвана зависимостта на структурата на “спиралните” автомоделни функции както от стойностите на параметрите на средата, така и от параметъра на разглеждания клас автомоделни решения. Особено внимание е обърнато на критичните стойности на параметрите на средата, при които се доближаваме до режими, притежаващи качествено различни решения. Например при клонене към т.н. S режим, логаритмичните спирали, върху които са разположени нехомогенностите на решенията, се доближават до Архимедови.

Проведените в [1,8] многобройни числени експерименти потвърждават хипотезата за съществуване на безброй много решения, имащи аналогична “спирална” или сложна структура и отличаващи се едно от друго по амплитудата на отклонение от ненулевото константно решение при едни и същи стойности на параметрите на средата. Да отбележим, че броят на решенията е изследван теоретично (от автори от школата на С.П. Курдюмов) единствено в едномерния случай при S и HS режими, където е доказано съществуването на безброй много радиално-симетрични решения клонящи към ненулевото константно решение на безкрайност.

Вторият етап в предложения числен подход се състои в изследване на еволюцията във времето на получените класове автомоделни функции. Основната трудност при решаване на нестационарната задача е свързана с избухването на решенията и произтичащата от това нестабилност. Численият метод, разработен от С. Димова и Д.

Василева, е базиран на метода на крайните елементи, явни Рунге-Кута методи с разширена област на устойчивост, адаптация на мрежата по пространството в съответствие със структурата на автомоделни решения.

В [1,3] е изследвана еволюцията във времето на получените автомоделни функции. Проведените числени експерименти показват, че решения са “метастабилни”, т.е. те запазват сложната си структура или движението на нехомогенности на “спиралните” решения в съответствие с автомоделния закон през много голяма част от времето на съществуване на решението. Освен това получените времена на съществуване на числените решения са много близки до точните времена на съществуване, които са предватително заложили в автомоделната задача. Възстановяването на времето на съществуване е един вътрешен критерий за точността и на двата числени метода – за решаване на елиптичната и параболична задача.

Публикация [3] е обзорна. В нея са включени както част от резултатите в [1] и [8], така и резултати, получени в предишни работи на авторите. Основните приноси на кандидата в тази работа са свързани с числената реализация и анализ на следните автомоделни функции: радиално - симетрични решения в двукомпонентна нелинейна среда (система от 2 квазилинейни уравнения, свързани чрез източниците); двумерни решения със сложна структура в LS режим, двумерни решения с нулева област около началото при гранични стойности на параметрите на средата, т.е. при преминаване от LS към S режим; двумерни решения със сложна структура в HS режим. Тези резултати са публикувани в статии, които не са представени за конкурса.

III. Числени методи за нелинейни и спектрални задачи в областта на хидродинамиката и квантовата механика

В [9] е предложен ефективен и с висока точност метод за пресмятане енергиите на свързаните (ниско възбудими) състояния на водородния атом в силно магнитно поле. За решаване на съответната гранична задача за уравнението на Шрьодингер в сферични координати е приложен методът на Канторович (метод на адиабатичното представяне). Този метод успешно редуцира решаването на началната двумерна задача до една едномерна спектрална задача и система от краен брой обикновени диференциални уравнения от втори ред.

За пресмятането на коефициентите на системата ОДУ от 2-ри ред получена следствие на адиабатичното разлагане по базисните функции, е необходимо да се пресметнат производните на базисните функции по пространствената променлива. За целта е формулирана допълнителна гранична задача, чието решаване гарантира точност, сравнима с тази на самите базисни функции.

Дискретизацията на получените задачи се осъществява на базата на метода на крайните елементи. Изполвани са едномерни Лагранжеви елементи до степен $k=10$, като в представените числени експерименти $k=4$. За решаване на възникващите обобщени алгебрични задачи за собствени стойности е приложен методът итерирание по подпространства, който позволява бързо и едновременно да бъдат пресмятани първите няколко собствени стойности.

Точността и скоростта на сходимост на разработените изчислителни схеми са изследвани числено. Изследвано е поведението на собствените стойности в задачата за базисните функции в зависимост от пространствената променлива (потенциални криви или терми) и е демонстрирано отлично съвпадение с теоретичните асимптотики в нулата и на безкрайност. Изследвана е скоростта на сходимост на решението в зависимост от броя на базисните функции, т.е. броя на уравненията в системата ОДУ (максималният брой в числените експерименти е 10). Проведените многобройни

числени експерименти показват, че дори само с 10 собствени функции, получените енергетични стойности съвпадат до 10-тия знак с най-добрите до този момент резултати за някои конкретни стойности на силата на магнитното поле γ . Да отбележим, че в предложения метод за всяка стойност на γ се конструира различен базис. Това позволява намирането на решения в голям диапазон на γ ($0 < \gamma < 1000$). Благодарение на това съвременно приложение на метода на Канторович на базата на метода на крайните елементи става възможно пресмятането на енергетичните нива на водородния атом с много висока точност за изключително голям диапазон на силата на магнитното поле използвайки само конвенционално РС.

Публикации [10,11] са посветени на задачи от изчислителната хидродинамика, а именно числената симулация на смутени течения в еднослойни и двуслойни струи. В [11] е изследвана неустойчивостта на вискозна капилярна струя, като за пресмятане еволюцията на радиуса, скоростта и налягането на струята се решава система от 3 нелинейни ОДУ от първи и втори ред. Работа [10] е посветена на численото изследване на нелинейната неустойчивост на капилярна съставна струя, състояща се от течено ядро и обкръжаващ го коаксиален слой от втора несмесяема течност. Предложен е числен метод за пресмятане на радиусите на двете междуфазови повърхности, скоростите на движение на двата слоя, както и на налягането. Моделът се описва от система от 6 нелинейни диференциални уравнения от първи и втори ред с периодични гранични условия.

В [10,11] са предложени неявни схеми от тип Кранк – Никълсън с втори ред на апроксимация по пространствената и времевата променлива. Възникващите на всяка стъпка по времето системи нелинейни алгебрични уравнения се решават с помощта на модифициран (damped) метод на Нютон. Началните условия се базират на проведения линеен анализ на разглежданите задачи. В [11] числено е изследван случай на разпадане на струята, провокирано от начални смущения, които включват първите 4 хармоники. В зависимост от входните параметрите в началното смущение се проследяват различни характеристики при разпад на струята, като време на скъсване, обем на основната и сателитните капки и т.н. Показано е, че комбинацията от няколко хармоники с различно фазово отместване в някои случаи може да контролира типа на процеса на разпадане на струята. В [10] числено е демонстрирано същественото влияние на нелинейността на финалния стадий от разпадане на струята. Сценарият на разпадане, както и типа на сателитните формации, основно са контролирани от съотношението на повърхностните напрежения между двете фази.

В публикация [12] е разработен метод за числено симулиране на съвместни топло-масообмен и химическа реакция около плоска граница в двуфазно стационарно ламинарно течение. Математическият модел се основава на апроксимация на граничния слой на двумерните уравнения на Навие-Стокс и съответните уравнения от тип конвекция-дифузия за топлината и концентрацията в двете фази. Численият алгоритъм се основава на линеаризация на нелинейните членове чрез метода на последователните итерации. Получените уравнения се дискретизират посредством явни и неявни диференциални схеми върху неравномерни мрежи. За конвективните членове е използвана апроксимация с централни разлики и срещу потока (upwind). Получените системи линейни алгебрични уравнения се решават с метода на насрещната прогонка. Пресметнатите стойности на скоростта, концентрацията и температурата са сравнени със съществуващи аналитични резултати при някои стойности на параметрите и е показано отлично съвпадение с тези резултати. Разработеният научен софтуер е предоставен на Хр. Бояджиев и Й. Халачев от Инст. по Инж. Химия (БАН).

09.07.2013 г.
гр. София

Подпис:
/Милена Димова/