

РЕЦЕНЗИЯ

на

на дисертационен труд, представен за получаване на образователната и научна степен „доктор“

Автор на дисертационния труд: задочен докторант **Галина Стоянова Люцканова-Жекова**

Тема на дисертационния труд: Числено моделиране на нелинейни гранични задачи от втори и четвърти ред: приложение във физикохимията и биологията

Заявител за откриване на процедурата: секция „Математическо моделиране и числен анализ“, Институт по математика и информатика – БАН

Докторска програма – Математическо моделиране и числен анализ

Рецензент: проф. д-р Михаил Д. Тодоров, кат. Математическо моделиране и числени методи, ФПМИ, ТУ – София, зап.445/07.10.2022 г. на Директора на ИМИ - БАН

Кратки биографични данни за дисертанта

Галина Люцканова е завършила ФМИ на СУ „Св.Климент Охридски“ през 2014г. с квалификация бакалавър по „Приложна математика“ с допълнителна професионална квалификация „Учител по математика“. Две години по-късно се дипломира като магистър по „Изчислителна математика и математическо моделиране“. В периода 2015-2017 г. е анализатор на риска на половин щат във Фронтекс Интернешънъл Сервисис. От 2017 г. е докторант към докторска програма „Математическо моделиране и приложение на математиката“ в ИМИ-БАН. Пак тогава е назначена за асистент на половин щат, а от 2020 г. е редовен асистент във ФМИ. Същевременно е на длъжност математик на четвърт щат в ИМИ-БАН.

Представената дисертация е написана на английски език и има обем от 160 стр., формат В5+1/2, в.т.ч. 5 глави и 1 приложение, 27 фигури, 1 таблица и библиография от 142 заглавия.

1. Актуалност на дисертационния труд

Построяването на адекватни реологични модели от своя страна изисква прости математически модели и бързи изчислителни алгоритми и процедури с

цел напасване към експериментално получените данни и извличане на информацията относно реологичните параметри (вискозитет и еластичност при разширение и прехлъзване, прагово напрежение и пр.). Подобен вид дейности изисква еднакво добро познаване на реалните процеси от една страна и съответен математически инструментариум за аналитична, изчислителна и софтуерна реализация на съответните модели и постановки. Тематиката е с ясен фундамент и с необходимост от конкретни приложения, което е достатъчна обосновка и мотивация за провеждане на изследванията. Всичко това предполага нужната математическа квалификация и практически знания, които дисертантката несъмнено притежава и умело прилага.

2. Анализ на състоянието на проблема

Класическите и нови флуидни материали имат голямо приложение в химическата, хранително-вкусовата промишленост, както и в фармацевтичните технологии. Това изисква задълбочено изучаване и предсказване на техните реологични свойства, свързани с въздействие върху кожата и очите, устойчивост, разграждане и пр. Накратко казано необходимо е и математическо описание на материалите. Естеството на разглежданите приложни задачи в дисертацията (пени, емулсии, спойки, биологични клетки, тъкани и течности и пр.) изисква математически модели на ненютонови флуиди, в които повърхностното напрежение върху техните материални граници не е константа. Такива флуиди се наричат комплексни.

3. Методика на изследванията

Два са подходите за изучаване и изследване на разглежданите проблеми – този на молекулярната динамика и от друга страна – на хидродинамиката. Предвид тяхната специфика, дисертантката се е насочила към втория, в който се предполага, че флуидът е непрекъснат и който е по-икономичен при решаване на 3D задачи. В механиката на непрекъснатите среди един комплексен флуид се моделира чрез законите за баланс на масата, момента на импулса и енергията, които обаче не са затворени. За да се затворят физикохимичните модели идват на помощ различни полуемпирични хипотези за връзка между тензорите на напреженията и деформациите. В общия случай това води до нелинейни системи от четвърти ред. Проблемът е, че макар обемните фази да са несвиваеми, материалните граници обаче се деформират и могат да имат сложна форма и реологично поведение. Методиката почива на решаването на уравнение на Лаплас с би-оператор от 4ти ред и уравнение на Стокс, което се свежда до нелинейна система от 4 ОДУ, трудностите за чието решаване са неизбежни. Всичко това налага гъвкав подход при численото решаване на съответните гранични задачи.

Според мен дисертантката е приложила всичко това професионално. Тук става дума, както за методиките и софтуера, така и за качеството и значимостта на получените резултати.

4. Характеристика и оценка на получените резултати

Дисертационният труд разглежда три приложения на гранични задачи

във физикохимията и биологията, а именно:

- пресметане на разпределението на потенциалите в две флуидни фази (полярна и неполярна) и в сферична, колоидна, диелектрична частица, прикрепена към плоска граница между тях;
- определяне на силата на триене, която действа на сферична колоидна частица, прикрепена към плоска граница между два несвиваеми вискозни флуида и движеща се успоредно на нея с постоянна скорост;
- изясняване на ефекта на реологичното поведение на границата (тангенциална подвижност или неподвижност) върху движението на дълго мехурче в тясна цилиндрична тръбичка под действието на поток, задвижван едновременно от гравитация и налягане.

Глава 1 има уводен характер. Приносен характер имат следващите 3 глави. В дисертацията са разгледани три различни приложения на граничните задачи в случаи на линейни или силно нелинейни модели от втори или по-висок ред.

В Глава 2 се разглежда взаимодействието между големи протеини и колоидни частици, прикрепени към границата между два флуида. Предполага се, че то се дължи на Ван дер Ваалсови, електростатични и капилярни сили, а гравитацията е пренебрегната. Деформацията на частиците е резултат от разпределението на електростатичното налягане върху тях и свързаната с него електропотпяща сила. Задачата включва експериментална и теоретична част, която се базира на условието за баланс на заряда, откъдето се определя деформацията на повърхността.

Втората задача всъщност се състои от две много сложни задачи и е обект на изследване и решаване в Глава 3. Първата е моделиране на подреждането на голям брой молекули и колоидни частици на повърхност и силите на триене, които им действат в следствие на Брауново движение на частиците под действието на ван дер Ваалсови, електростатични и капилярни взаимодействия. Необходимостта от формулиране и решаване на втората задача произтича от липсата на пряк микроскопски метод за измерване на стойността на трифазния контактен ъгъл. Чрез измерване на тангенциалната скорост на частиците и приложената сила на лазерните пинсети експериментално се определя силата на триене. Последното изисква бърз и прецизен числен метод за пресмятане на силата на триене при даден трифазен контактен ъгъл, целящ експерименталното напасване на стойността на трифазния контактен ъгъл.

Една от най-трудните задачи в моделирането на физикохимични и биологични процеси е получаването на формата на материални граници в статични и динамични режими с отчитане на тяхната хидродинамична устойчивост. Като илюстрация в Глава 4 е разгледано движението на дълго мехурче в цилиндричен капиляр под действието на поток, задвижван от налягането (поток на Поазьой) и/или силата на гравитацията. Повърхността на мехурчето може да бъде свободна, т.е. тангенциално подвижна повърхност — класическа формулировка; тангенциално неподвижна, но деформируема повърхност, например модел на биологични мембрани, граници с адсорбирани ПАВ, т.н. Тази задача също е част от по-сложни пресмятания, например движение на капки и мехурчета в скалиста пориозна среда в задачите за добиване на петрол чрез инжектиране на флуиди или газове, или движението на

биологични течности в човешките вени. Известни са аналитични решения за движение под действието на гравитация и налягане в случай на много малка скорост на мехурчето (задача на Bretherton), както и за движение на мехурче със свободна повърхност под действието на налягане. Сложността на задачата и необходимостта от ресурсоемки числени реализации правят трудно и дори невъзможно пресмятането на комплексни флуиди и материални граници.

Актуалността на разглежданите задачи, новост в тяхното решаване от физикохимична и математическа гледна точка, сравнение с известни резултати в литературата, и основните стратегии за решаване на задачите са описани в Глава 5, където основните приноси са обобщени в три точки. Тя фактически играе ролята на авторска справка. Основните приноси в дисертацията са

1. Математическият модел за разпределение на електростатичните потенциали в диелектрични среди (две флуидни фази и сферична колоидална частица, закрепена за плоската граница между тях) се състои от 3D уравнения на Лаплас за функциите в тримерните области, непрекъснатост на тези функции и Нойманови гранични условия върху известни граници. Задачата е решена числено, като за целта е разработен ефикасен и бърз алгоритъм. Числената реализация изисква предварителна тороидална координатна смяна, превръщайки границите в координатни линии; аналитично изследване на слабата сингулярност на трифазната контактна линия; имплементация на самосъгласувана числена схема от втори ред, която използва ADI метод. Предполага се, че проникваемостта на водата е крайна и е отчетено действието на всички диелектрични среди.

2. Транслационното движение на сферична колоидна частица, закрепена за плоска граница между два вискозни несвиваеми флуида се описва от уравнения на Стокс за вектора на скоростта и за налягането в 3D области. Предполага се, че полето на скоростта както и тангенциалните напрежения на двумерната граница между двата флуида са непрекъснати, а векторът на скоростта на повърхността на частицата е известен. Задачата е преформулирана в термини на векторни и скаларни потенциали на скоростта и налягането и трансформиране на изходната 3D задача в двумерна за първите моди на Фурие по отношение на полярния ъгъл. Последното е позволило числената реализация да се ускори многократно в сравнение с използван преди метод. В останалата част се повтарят техниките при решаване на първата задача: тороидална смяна на променливите, ADI схема от втори ред, запазвайки оригиналната формулировка на двумерните гранични условия; аналитично пресмятане на слабата сингулярност в трифазната контактна линия и изолиране на сингулярността на налягането, което увеличава точността на пресмятането на коефициента на триене.

3. Движение на дълго мехурче със свободна (класически случай) или тангенциално неподвижна граница (биологична мембрана, повърхност с прекрепени ПАВ и пр.) през цилиндричен капиляр под действие на гравитация и налягане. Подходът за решаване и изследване на такава задача е полуаналитичен. Моделът се състои от 3D уравнения на Стокс при известен профил на скоростта на голямо разстояние от мехурчето, условия за полепване върху капилярната стена, тангенциални и нормални проекции на динамичните гранични условия върху деформируемата повърхност на мехурчето. Използва се

аналитично решение на задачата на Стокс за малки наклони на допирателната към повърхността на мехурчето, което води до приближения от нулев и първи ред за произволна гладка форма на мехурчето, заместване на получените решения в нормалната проекция на динамичното гранично условие, от което следва система от четири нелинейни ОДУ от първи ред за дължината на дъгата с един неизвестен параметър (капилярното налягане във върха на мехурчето). Понататък се решава числено граничната задача от четвърти ред за формата чрез прогонване на параметъра, така че да се получи затворен профил. Като резултат полученият метод потвърждава отлично наличните експериментални данни, увеличава повече от 100 пъти областта на приложимост на известни в литературата аналитични методи и обяснява сложната физична картина при движение на дълги мехурчета под действието на потоци, задвижвани едновременно от гравитация и налягане както за класически, така и за тангенциално неподвижни повърхности.

5. Преценка на авторската справка

Авторската справка отразява приносите и акцентите в дисертацията като цяло. Приносите имат научен, но в много по-голяма степен научно-приложен характер. Представените резултати могат да се използват директно в колоидната физико-химия, нефтодобива, биохимията.

Оценявам приносите като колективни, оценявам ролята на научните ръководители, но водещата роля на дисертантката е несъмнена. Всички приноси могат да бъдат причислени към направлението „Обогатяване на съществуващи знания с цел приложение в практиката”. При решаване на подобни задачи връзката между теорията и практиката е двустранна – взаимно допълване и обогатяване.

6. Критични бележки по трудовете и литературна осведоменост на дисертанта

Дисертацията прави отлично впечатление. Написана е на английски език, изложението е стегнато и логически последователно. Нямам критични бележки по същество. Налице е и задълбочено познаване на литературата по разглежданите в дисертацията въпроси, видно от въведението, което прави получените резултати още по-убедителни. Литературната осведоменост на дисертанта се основава на най-нови източници.

7. Публикации по дисертацията

Резултатите са докладвани многократно на конференции и семинари у нас и в чужбина. Публикувани са в *Lecture Notes in Computer Science*, *Progress in Industrial Mathematics (Springer)*, *Physics of Fluids*. Всички работи са в съавторство. *Physics of Fluids* има *IF* 4.98, по данни от 2021 г., принадлежи на квартал *Q1* и вече има 2 цитата. Публикацията в *Lecture Notes in Computer Science* има *SJR* и един цитат.

Други данни за публикациите могат да се видят в представената таблица.

Таблица: Справка за трудовете

Статии – 3 бр.	<i>В чужбина - 3 бр. Physics of Fluids, LNCS, Progress in Industrial Mathematics</i>
Доклади на международни научни прояви – 7 бр.	<i>Конференции и други форуми в България (семинар на секция Мат. моделиране и числен анализ, ИМИ-БАН, пролетна сесия на ФМИ, 20та европейска конференция по индустриална математика, Будапеща, BIOMATH 2018, NM&A 2018, Mathematics in Applications-Novosibirsk 2019, International Virtual Conference on Mathematical Science-2021</i>

8. Приложение на резултатите в практиката

Получените в дисертацията резултати имат определено приносен характер към изчислителната физикохимия на колоидни частици в двуфазни среди. Тук е важно да отбележим, че говорим за резултати на моделно ниво с пряко потвърждение или предсказване от и в експеримента. Успешната реализация и надграждане предполагат решаването на нови интересни задачи и това ми е пожеланието към дисертантката.

9. Преценка на автореферата

Авторефератът отразява правилно и пълно съдържанието на дисертационния труд.

10. Лични впечатления

Не познавам дисертантката и нямам преки впечатления от нея.

Заклучение

Отчитайки значимостта на проведените изследвания и след справка с ППЗРАСРБ в БАН и специфичните изисквания на ИМИ, мога да твърдя, че представената дисертация отговаря на препоръчителните наукометрични критерии за присъждане на научни степени. Въз основа на гореизложеното си позволявам да препоръчам на членовете на уважаемото НЖ да гласуват даване на ОНС „доктор” на **Галина Стоянова Люцканова-Жекова**, Докторска програма „Математическо моделиране и числен анализ”.

СЪСТАВИЛ:

Проф. д-р Михаил Тодоров
кат. ”Матем. моделиране и числени методи”,
ФПМИ при ТУ - София

10 декември 2022 г.
София