

Становище по процедура за защита на дисертационен труд
на тема „Numerical Modelling of Nonlinear Boundary Value Problems of Second and
Fourth Order: Application in Physicochemistry and Biology“
с автор Галина Стоянова Люцканова-Жекова
за получаване на образователната и научна степен „доктор“
в област на висше образование „4. Природни науки, математика и информатика“,
направление „4.5 Математика“,
докторска програма „Математическо моделиране и приложение на математиката“
на Института по математика и информатика при Българската академия на науките

Становището е изготвено от доц. д-р Петър Рашков (ИМИ-БАН), член на Научното жури, определено със заповед №445/07.10.2022 г. на Директора на Института по математика и информатика-БАН, която е издадена на основание на решение на Научния съвет на ИМИ-БАН (Протокол №8/30.09.2022 г.).

1. ОБЩО ОПИСАНИЕ НА ДИСЕРТАЦИЯТА

Предоставеният ми комплект материали в електронен вид е в съответствие с Правилника за условията и реда за придобиване на научни степени и за заемане на академични длъжности в ИМИ-БАН и съдържа всички предвидени трудове и документи.

Дисертационният труд се състои от 160 стандартни машинописни страници и е написан на английски език. Материалът е структуриран в увод, три глави с номера 2, 3 и 4 и заключение. Трудът съдържа една таблица, 27 фигури и 3 приложения (S. Тензори в криволинейни координати, Т. Електростатика и U. Механика на непрекъснатите среди). Библиографската справка показва, че са използвани 142 литературни източника.

Приложени са три статии, свързани с тематиката на дисертацията и представящи основните научни резултати. Всички статии са съвместни с единия ѝ научен ръководител, чл.-кор. проф. дмн Красимир Данов.

Представените трудове отговарят на изискванията на процедурата по обем и форма. Дисертационният труд съдържа научни резултати, които са оригинален принос към математическото моделиране и които могат да бъдат използвани за основа на по-нататъшни изследвания в друга научна област (физична химия).

2. ДАННИ И ЛИЧНИ ВПЕЧАТЛЕНИЯ ЗА КАНДИДАТКАТА

Галина Люцканова-Жекова е възпитаничка на Факултета по математика и информатика към Софийския университет „Свети Климент Охридски“. Там тя завършила бакалавърска програма „Приложна математика“ с допълнителна професионална квалификация „Учител по математика“ през 2014 г. и магистърска програма „Изчислителна математика и математическо моделиране“ през 2016 г. От 2017 до 2022 г. е редовен докторант към докторска програма „Математическо моделиране и приложение на математиката“ в Института по математика и информатика при БАН.

Познавам кандидатката покрай нейните участия в семинара на секцията „Математическо моделиране и числен анализ“ и доклади на различни научни конференции (Годишна среща на българската секция на SIAM, BIOMATH2018).

3. ХАРАКТЕРИСТИКА НА НАУЧНИТЕ ПОСТИЖЕНИЯ В ДИСЕРТАЦИОННИЯ ТРУД

Предмет на дисертационния труд са три задачи от математическото моделиране, описващи различни явления във физикохимията. Те са решени с умело приложение на подходящи аналитични и числени методи.

Във *първа глава* (част 2) от дисертационния труд се пресмята разпределението на електростатичните потенциали в случай на диелектрична заредена частица, закрепена на плоска повърхност на границата между неполярна (масло, въздух) и водна фаза. Анализира се влиянието на водната фаза с крайна проводимост върху разпределението на електростатични потенциали във всички фази. Задачата е описана със система уравнения на Лаплас за стойностите на потенциалите, придружена от гранични условия на междуфазовите граници. Смяна на координатите свежда сложната дефиниционна област до правоъгълник, в който задачата е сведена до параболична задача чрез въвеждане на числено време, и след дискретизация с крайни разлики е решена по метода на Дъяконов. Основната трудност при дискретната задача е в приближаването на граничните условия. Проведени са числени експерименти за различни стойности на трифазния контактен ъгъл.

Във *втора глава* (част 3) е разработен числен метод за общата задача за движение на сферична частица, закрепена на границата между два вискозни флуиди. Тя е зададена с уравненията на Стокс за несвиваем флуид с условия за полепване на повърхността на частицата и кинематични и динамични гранични условия по плоската граница между двата флуида. Постановката на задачата е опростена чрез въвеждането на скаларен и векторен потенциал и оригиналната система, която се състои от шест ЧДУ от втори ред и две ЧДУ от първи ред, е преобразувана в система от осем елиптични ЧДУ. Размерността на областта на дефиниция е намалена от три на две, след въвеждане на цилиндрични координати и включване само на първите фуриерови моди по отношение на полярния ъгъл. Подобно на задачата от първа глава (част 2), и тази е сведена до параболична задача чрез въвеждане на числено време и след дискретизация с крайни разлики е решена по метода на Дъяконов. Получено е ускорение на времето за решаването ѝ спрямо метода, ползван от K. Danov, R. Dimova, B. Pouliquen (2000).

В *трета глава* (част 4) се разглежда движението на дълги, осевосиметрични межурчета през цилиндрични капиляри под действието на налягане (поток на Поазьой) и гравитачна сила. Задачата на Стокс е решена за два типа гранични условия: на свободна или тангенциално неподвижна повърхност. Използвайки асимптотично развитие по малкия параметър на радиалната и аксиалната координата на скоростта на флуида и на налягането, чрез сравняване на коефициентите се получава система от ЧДУ, която е решена аналитично за нулевото и първото приближение на неизвестните. Оттам чрез заместване е получена нелинейна система-задача на Коши за променливите, които описват формата на межурчето. За различни стойности на числлото на Бонд и на капиллярното число, като се варира безразмерната дебелина на филма на межурчето, се получават различни решения, от които се избира само онова, което съответства на затворен профил и представлява интерес за физикохимични приложения. Резултатите от числените симулации са сравнени с експериментални данни.

Избраният изследователски подход стъпва върху аналитични методи от диференциалното смятане за постигане на поставените цели във всяка глава. Теоретичният

анализ е допълнен с избор на подходяща дискретна формулировка на получена-та задача, която е решена числено. Направени са числени симулации на модела за избрани стойности на параметрите, които илюстрират поведението му.

Резултатите в дисертационния труд обобщават публикувани в литературата ре-зултати (например в задачата от *първа глава* (част 2) се разглежда крайна диелек-трична проницаемост) и имат потенциал да намерят приложение в компютърното моделиране на физикохимични процеси.

Смятам, че изброените от дисертанта приноси правилно отразяват поставените цели и постигнатите резултати.

4. КРИТИЧНИ БЕЛЕЖКИ

В дисертационния труд липсва резюме. Оформлението на дисертационния труд е такова, че всяка глава започва със собствен увод и завършва със собствено заключение и библиография. Накрая се повтаря библиографията от трите глави по азбучен ред, въпреки че е напълно постижимо да се организира обобщена библиография с всички използвани източници.

В основния текст липсва наредба на аналитичните резултати като твърдения с придружаващи ги доказателства. Извеждането на някои равенства е поставено в основния текст, а на други – в приложението. Това създава затруднение при просле-дяването на получените резултати, понеже липсва степенуване на тяхната значимост в процеса на решаване на конкретните задачи.

Форматът на дисертационния труд създава впечатление за механично обединение на материали, каквото е можело да бъде избегнато, ако беше направена последова-телна, заключителна систематизация на всички резултати.

Във *първа глава* (стр. 24) се твърди: „It is well-known fact that the solution of a parabolic problem with appropriate boundary conditions, applied at the boundaries, approaches the solution of an elliptical problem with the same boundary conditions for $T \rightarrow \infty$ regardless of the initial condition“, което само по себе си не е убедително без посочване на конкретна задача или източник.

На стр. 26 се въвежда спомагателна неизвестна величина ψ , но не е изяснено какви гранични условия са ѝ наложени при решаването на уравнение (2.80).

Не е споменато в каква програмна среда са осъществени симулациите, за да може да се направи сравнение за постигнатите подобрени методи спрямо цитираните в литературата (относно *втора глава*).

В *трета глава* (част 4, стр. 126) вместо относителна грешка се използва понятието „точност“ („the value of h is computed with precision of 0.001%“), но това понятие се отнася до броя знаци при пресмятането. Във *втора глава* (част 3, стр.78) от друга страна се употребява правилно „relative error“. Също така в *параграф 4.5* биха могли да се изложат поотделно случаите на свободна повърхност и на тангенциално неподвижна повърхност, а не да се прехвърля изложението на всяка стъпка между двата случая (стр. 103-123).

Другите бележки са редакционни и засягат общата структура на текста на дисертационния труд и начина на изразяване.

- В *първа глава* (стр. 25) се използва „unit operator“ вместо „identity operator“.
- На стр. 26 не е ясно какво се има предвид в следния текст: „Thus, the obtained problem in sigma direction is cyclic and has no boundary conditions and the one in tau direction is the one described by Eq. (2.81). Thus, the sigma problem is cyclic and has no boundary conditions, but for the one on the tau is the original one“ и как се подхожда към решаване на задачата.

- Дискретната формулировка на смесените частни производни (3.282) не е съвсем ясна.
- Изложението в *трета глава* (стр. 90) не е съвсем ясно. Би трябвало да се уточни, че се използват равенства или изводи от литературата. Например, „Using geometric considerations, we conclude that the following differential equations [4.2, 4.87] ...“, а после е дадено равенство (4.25), или „We compute the mean curvature of the bubble surface, H , [4.2, 4.87] as“, а после е дадено равенство (4.26).
- Не е изяснено на стр. 124, в уравнение (4.275) как се замества $\sin \theta = 1$ само в знаменателите, докато числителят остава функция на θ ? (4.275): “In the latter, we shall set $\sin \theta = 1$ in the denominators, i.e.”, за да се стигне до заключение, че посоченото приближение може да използва за произволна стойност на θ . (“Due to this fact, the approximation F_1 is appropriate to use for arbitrary value of θ .”)
- В заключението към *трета глава* (стр. 132) се твърди: “The implemented method allows fast and precise calculation of the dependence of the capillary number and the wetting film thickness in the cylindrical part on the system parameters.” – без никакви подробности за представянето на числения метод като време за пресмятане и.т.н.

5. АНАЛИЗ НА ПУБЛИКАЦИИТЕ НА ДИСЕРТАНТА

Резултатите от дисертацията са публикувани в три статии. Съавтори на дисертантката са научният ръководител, чл-кор. проф. дмн Красимир Данов (СУ–ФХФ), и проф. Stoyan Smoukov (Queen Mary University London, Англия).

Една от статиите (K. Danov, G. Lyutskanova-Zheкова, S. Smoukov, Motion of long bubbles in gravity-and pressure-driven flow through cylindrical capillaries up to moderate capillary numbers, *Physics of fluids* 33 (2021)) е в списание с **импакт фактор**.

Втората статия (G. Lyutskanova-Zheкова, K. Danov, Motion of a Spherical Particle Attached to the Interface Between Two Viscous Fluids, *Progress in Industrial Mathematics*) е глава от сборник с доклади от конференция „*Progress in Industrial Mathematics at ECMI 2018*“.

Третата статия (G. Lyutskanova-Zheкова, K. Danov, Effect of Ionic Strength on the Electro-Dipping Force. *Lecture Notes in Computer Science*) е публикувана в сборник с доклади от деветата международна конференция „*Numerical Methods and Applications NMA*, Боровец, България, 2018“.

В статиите липсват данни за приноса на всеки от авторите, което тълкувам като равностоен принос на всеки съавтор. Справка в **Google Scholar** показва 3 независими цитирания на две от статиите по дисертацията.

6. ОЦЕНКА НА АВТОРЕФЕРАТА

Авторефератът се състои от 31 стандартни машинописни страници и съдържа 15 фигури. Изготвен е на български и на английски език. Приложена е справка за приносите в дисертацията и публикациите, свързани с тематиката ѝ. Авторефератът отразява правилно резултатите от дисертацията.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представеният дисертационен труд напълно отговаря на съвкупността от критерии и показатели, посочени в Закона за развитие на академичния състав в Република

България (ЗРАСРБ), неговия Правилник и Правилниците за прилагане на ЗРАСРБ на БАН и ИМИ-БАН. Представените към дисертацията трудове са достатъчни по качество и количество, като няма съмнение относно значимостта на приносите в тях, не е установено plagiatство. Резултатите в дисертационния труд и в статиите не са използвани в процедури за придобиване на предишни образователни и научни степени.

Това ми дава основание да оценя **положително** дисертацията и да **препоръчам** на научното жури да гласува положително за присъждане на Галина Стоянова Люцканова-Жекова на образователната и научна степен „доктор“ в област на висше образование „4. Природни науки, математика и информатика“, направление „4.5 Математика“.

София, 6 декември 2022 г.

.....

(доц. д-р Петър Рашков)