

## **ОТЗЫВ**

официального оппонента на диссертационную работу  
Белоусова Кирилла Ильича  
«Моделирование конвективно-диффузионного массопереноса веществ при  
выборе конструкций и режимов функционирования микрофлюидных  
устройств»,  
представленную на соискание ученой степени кандидата физико-  
математических наук по специальности 01.04.01 – «Приборы и методы  
экспериментальной физики»

### **Актуальность**

Микроаналитические системы, основанные на применении микрофлюидных устройств, находят широкое применение в различных областях науки и техники благодаря ряду неоспоримых преимуществ, в том числе и новым возможностям, позволяющим осуществлять исследования биологических проб на молекулярном уровне. Однако разработка микрофлюидных устройств является достаточно сложной и трудоемкой задачей, упростить которую можно, используя методы математического моделирования при проектировании конструкций устройств. Большинство процессов в микрофлюидике связано с конвективно-диффузионным массопереносом веществ; изучая (моделируя) эти процессы в разных конфигурациях устройств, можно выбрать наиболее эффективные режимы функционирования этих устройств для решения поставленных задач. Таким образом, учитывая вышеизложенное, можно уверенно констатировать, что диссертационная работа Белоусова К.И. является актуальной и востребованной.

### **Обоснованность и новизна научных результатов диссертационной работы**

Обоснованность научных результатов подтверждается корректностью постановки задач исследования, получением устойчивых решений при моделировании, сходящихся с уменьшением размера элементов расчетной сетки, соответствием расчетных и экспериментальных данных. Полученные результаты воспроизводимы и соответствуют признанным теоретическим положениям. Они были представлены на международных и всероссийских конференциях, а также опубликованы в журналах (ВАК, Scopus), пройдя обязательное рецензирование.

Новизна научных результатов заключается: 1) в использовании модифицированных чисел Куранта и Пекле, что позволило при решении конвективно-диффузионных задач определить шаг времени метода конечных элементов, обеспечивающий уменьшение значения численных осцилляций; 2) впервые оценена величина дисперсии пробки пробы с использованием двумерной модели электрокинетического ввода анализа в микрофлюидный чип для электрофоретического разделения, дополнительно учитывающей эффект поперечного массопереноса в каналах, при различных схемах ввода (простой крест, Z- и П-ввод); 3) с использованием произвольном Лагранж-Эйлеровом метода определены условия (частота и амплитуда колебаний расхода жидкости) эффективного перемешивания реагентов в микрофлюидном чипе; 4) предложена оригинальная процедура нахождения параметра мобильности метода фазового поля, обеспечивающего заданную точность расчета профиля скоростей и смещения границы раздела фаз, с использованием метода явного выделения границы; 5) оценено влияние геометрии каналов и расходов потоков дисперсной и непрерывной фаз на эффективность перемешивания растворенных реагентов на стадии формирования капель пиколитровых объемов.

### **Научная значимость и практическая ценность результатов диссертационной работы.**

**Научная ценность** характеризуется следующими положениями:

1) замена в числе Куранта и сеточном числе Пекле размера элемента сетки на среднее квадратичное отклонение, характеризующее ширину переходной области концентрации, позволяет при решении конвективно-диффузионных задач определить шаг времени метода конечных элементов, который обеспечивает уменьшение нефизических осцилляций;

2) уменьшение величины дисперсии пробки жидкой пробы при её загрузке под действием электрического поля в микрофлюидном чипе для электрофоретического разделения её компонентов достигается использованием схемы простой крест, уменьшением ширины каналов и двухстадийным регулированием запирающих потенциалов: их повышением относительно потенциала в месте пересечения каналов при загрузке пробы в инжектор и понижением при её вводе в сепарационный канал;

3) активное механическое перемешивание с использованием режима импульсных колебаний жидкости с равномерным возрастанием частоты в

течение 3 секунд с 1 до 10 Гц и амплитудой расхода 2 мкл позволяет достичь равномерного распределения концентрации компонентов реакции (коэффициент вариации 0,03) в замкнутой восьмиугольной реакционной камере микрофлюидного чипа;

4) расчет профиля скоростей жидкостей в двухфазной системе с заданной точностью обеспечивается выбором параметра мобильности метода фазового поля по разработанной процедуре, не требующей дополнительных экспериментальных исследований и основанной на оценке и сравнении скоростей на границе фаз с данными, вычисленными методом с явным выделением границы;

5) показано, что эффективное перемешивание реагентов на этапе формирования капель пиколитровых объемов в микрофлюидных устройствах достигается за счет использования асимметричных геометрий генераторов с фокусировкой потоков в системе пересекающихся каналов.

**Практическая значимость** диссертационной работы определяется:

1) установленными с помощью численного моделирования режимами эффективного управления стадиями анализа и инженерными расчетами конфигураций микрофлюидных чипов:

а) для электрофоретического разделения пробы;

б) для ферментативного анализа с пассивным перемешиванием реагентов в изогнутом канале и активным механическим перемешиванием в замкнутой камере;

в) для перемешивания реагентов на этапе генерации капель пиколитровых объемов;

2) разработанной в диссертации процедурой выбора параметра мобильности фазового поля, которая позволяет уменьшить время моделирования двухфазных потоков, повысить точность получаемых результатов и не требует проведения дополнительных натуральных экспериментальных исследований.

**По рецензируемой диссертации можно сделать следующие замечания:**

1. В работе встречаются терминологические неточности. Например, на с. 38 использовано слово «перемешиватель» (лучше – перемешивающее устройство, смеситель). На с. 99, 102 и далее вместо «поток концентрации» следовало бы использовать «массовый поток вещества» или «поток вещества». С. 31 «уменьшение шага времени и сетки» – здесь не ясно, что означает «шаг сетки».

2. В гл. 3 некорректно используется понятие «эффективность перемешивания», определяемое по коэффициенту вариации концентрации. В действительности определялась степень перемешивания, а эффективность перемешивания характеризуется долей энергии, затрачиваемой непосредственно на перемешивание.

3. На с. 94, в уравнении (31.1) коэффициент, представляющий собой по существу поверхностный коэффициент массоотдачи, назван «константа, масштабирующая величину разности между поверхностной и объемной концентрациями». То же касается уравнения (117.1), где использован устаревший термин «коэффициент скорости растворения».

4. Объяснение механизма возникновения вихрей Дина на с. 14 «из-за центроостремительных сил создается градиент давления с большим значением у внутренней стороны канала, что вызывает вторичное движение жидкости, наложенное на первичный поток» неточное. Здесь не учтена роль вязкости и обусловленное вязким трением гашение кинетической энергии вблизи стенок канала. Центроостремительным является ускорение, а силы инерции, согласно принципу Д'Аламбера, – центробежные.

5. С. 26. Аппроксимацию уравнений в частных производных в методе конечных разностей получают не только разложением в ряд Тейлора. Чаще применяют метод контрольного объема и интегро-интерполяционный.

6. В подписи к Рис. 112.2 указано «в случае приложения переменного давления при фазовых углах  $0$  (сверху) и  $\pi/2$  (снизу)». Здесь следовало пояснить, между какими векторами отсчитывался фазовый угол.

7. На с. 51 и далее обсуждаются численные ошибки диффузионного и дисперсионного типов. Следовало бы указать источники этих ошибок в уравнениях, используемых для численного решения – частные производные четных и нечетных порядков. Это позволило бы принять превентивные по уменьшению указанных ошибок и оптимизации вычислительного алгоритма.

Указанные замечания не снижают общей высокой оценки диссертационной работы Белоусова К.И., которая является законченным научным исследованием.

Результаты, полученные в работе, и использованные методы решения поставленных задач полностью соответствуют специальности

01.04.01 – Приборы и методы экспериментальной физики, пунктам 2 и 8 «разработка и создание научной аппаратуры и приборов для экспериментальных исследований в различных областях физики» и «моделирование физических явлений и процессов», физико-математическим наукам.

Автореферат и публикации отражает содержание работы, позволяют судить о полученных результатах, научной и практической значимости работы, а также о значимости научного вклада соискателя.

Диссертация полностью отвечает п. 9 Положения ВАК РФ «О присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ № 842 от 24 сентября 2013 года (в редакции от 01.10.2018 года), а её автор, Белоусов Кирилл Ильич заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.01 – Приборы и методы экспериментальной физики.

Официальный оппонент,  
Заведующий кафедрой  
оптимизации химической и  
биотехнологической аппаратуры  
Санкт-Петербургского государственного  
технологического института  
(технического университета)  
д.т.н., профессор  
телефон: +7-921-752-63-00  
E-mail: rufat.abiev@gmail.com

Абиев Руфат Шовкетович

Подпись *Абиева Р. Ш.*  
Начальник отдела кадров *Абиев*  
удостоверяю



*Г. Ю. Трохорова*